

平成 28 年度原子力規制庁委託成果報告書

シビアアクシデント時
ソースターム評価技術高度化

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構
平成 29 年 3 月

本報告書は、原子力規制委員会原子力規制庁からの委託により実施した業務の成果をとりまとめたものです。

本報告書に関する問い合わせは、原子力規制庁までお願いします。

目次

1. はじめに	1-1
2. FP 化学及び移行に係わる実験	2-1
2.1 VERDON 実験	2-1
2.2 AGF におけるホット実験	2-3
2.3 AGF におけるコールド実験	2-11
3. FP 化学及び移行に係わる解析	3-1
3.1 AGF におけるコールド実験の解析	3-1
3.2 熱力学平衡計算機能を有する数値解析コードの比較検討	3-7
3.3 雰囲気条件が FP 化学及び FP 挙動に与える影響	3-9
3.4 FP 化学形予測のための代替統計モデルの構築	3-19
3.5 THALES2 コードの改造及び試解析	3-36
4. おわりに	4- 1
付録 A 代替統計モデルのパラメータ	A- 1
付録 B 出張報告	B- 1

1. はじめに

シビアアクシデント時におけるソースターム（環境中に放出される放射性物質の量や化学形、放出のタイミング）は、シビアアクシデントの影響評価、レベル 2 確率論的リスク評価（PRA：Probabilistic Risk Assessment）、レベル 3PRA、緊急時防護対策の検討等において不可欠な情報である。ソースタームは原子炉冷却系内や格納容器内における炉心溶融進展及び放射性物質の移行挙動に影響されるため、その評価においては、シビアアクシデントの進展を総合的に解析できる解析コードを用いる場合が多い。シビアアクシデント総合解析コードでは、図 1.1 に示すような放射性物質の多様な移行挙動が考慮される。これらの現象の多くは放射性物質の化学形に依存し得るが、現在のシビアアクシデント総合解析コードのほとんどは化学形を固定して解析を行う。ソースターム評価上重要な核分裂生成物（FP：Fission Product）であるヨウ素やセシウムについては、通常、主要な移行経路内において粒子状（エアロゾル）の形態を取るヨウ化セシウム（CsI）や水酸化セシウム（CsOH）が仮定される。

フランスで実施された PHEBUS-FP 計画の炉内実験及びその解析において、上記と異なる化学形のヨウ素及びセシウム化合物が原子炉冷却系内で形成され得ることが示された[1.1]。特に、炭化ホウ素（ B_4C ）の制御材が炉心に含まれる場合には、有意な割合の気体状ヨウ素が原子炉冷却系から模擬格納容器に移行するという結果が得られている。また、東京電力福島第一原子力発電所（1F）事故後のモニタリングでは、粒子状のヨウ素と合わせて、有意な量の気体状ヨウ素が観測されている[1.2, 1.3]。気体状ヨウ素化合物は、原子炉冷却系内で直接生成される場合やサプレッションチャンバー（S/C）等の液相内における放射線場の化学反応により生成される場合が考えられる。原子力機構において整備しているシビアアクシデント総合解析コード THALES2/KICHE[1.4, 1.5]を用いた 1F3 号機のシビアアクシデント解析では、一旦 S/C の液相内に負イオンとして溶解したヨウ素が、液相内の化学反応により揮発性の高い分子状ヨウ素（ I_2 ）や有機ヨウ素（ CH_3I ）に変換され、格納容器ベントの作動に伴う気液間の物質伝達を通じて気体状ヨウ素の形で格納容器外に移行し得ることが示唆された[1.6]。

原子炉冷却系内における FP の化学形は、個々の化合物が有する物性に依存して直接的にソースタームに影響を及ぼし得る。また、それらが液相内に溶解した場合には、pH の変化をもたらして気体状ヨウ素の生成を著しく増大させる可能性がある。しかしながら、原子炉冷却系内で想定される熱水力や化学的条件下における FP 化学に関する技術的知見は十分に整備されていない。このような点と 1F 事故の知見を踏まえて、本事業においては、表 1.1 に示すスケジュールに基づいて、BWR の原子炉冷却系内における FP（主にヨウ素及びセシウム）化学に及ぼす炭化ホウ素制御材の影響及び生成された化合物の移行挙動に着目した実験及び解析を実施し、規制判断に活用できる技術的知見を取得するとともに、シビアアクシデント時ソースターム評価手法の高度化を目指す。

今年度の事業においては、以下に示す、①照射済み燃料から放出される FP の化学形や移行挙動に関する総合的な実験のデータを入手し、②上記①の実験を補完する基礎実験を実

施するとともに、③原子炉冷却系内の FP 化学計算機能を THALES2 コードに導入して実機事故条件に対する試解析を行った。

- ① 照射済み燃料からの FP の放出、化学的特性及び移行挙動に関する総合的なデータを収集するため、フランス原子力・代替エネルギー庁（CEA）が中心になって実施する国際協力実験 VERDON-5 実験に参加した。平成 27 年度に実施された同実験では、研究炉照射により短半減期ヨウ素を蓄積させた高燃焼度 UO_2 燃料を水蒸気雰囲気下で加熱し、制御材の酸化生成物であるホウ酸（ H_3BO_3 ）を添加することで、FP の化学的挙動や気体状ヨウ素の生成挙動に及ぼすホウ素の影響に関するデータが取得された。本年度はデータの速報を入手し、放出経路に沈着した FP 及びホウ素の化学形や結晶構造を明らかにするための分析について検討を開始した。
- ② VERDON-5 実験の結果を解釈するとともに、ソースターム評価手法に取り入れる物理モデルの構築に必要な基礎データを取得するため、原子力機構大洗研究開発センターの照射燃料試験施設（AGF：Alpha Gamma Facility）ホットセル内に設置されている FP 放出移行試験装置（照射済み燃料試験片を加熱して FP 放出及び移行挙動を調べる装置）を用いて照射済み燃料の加熱試験を実施した。また、平成 27 年度に開始した非放射性のヨウ素、セシウム、ホウ素等を含有する試料を用いた基礎的な高温化学実験（コールド実験）を追加実施し、温度勾配管への沈着分布、生成された化合物の化学形や結晶構造等に関する実験データを拡充した。
- ③ 平成 27 年度に実施したコールド実験を対象として原子炉冷却系内放射性物質移行挙動解析コード VICTORIA2.0[1.7]を用いた解析を実施し、熱力学平衡計算による FP 移行挙動に関する予測性能の評価を行った。また、同様に熱力学平衡計算機能を有する HORN コード[1.8]による解析も実施し、コード間の比較検討を行った。さらに、熱力学平衡計算により作成した FP 化学組成データベースに基づき代替統計モデルを構築し、THALES2/KICHE コードに燃料からの FP 放出に係わる最新のモデル[1.10]を導入し、BWR の代表的なシビアアクシデントシーケンスを対象としたソースターム解析を実施した。

本事業における実験及び解析から得られる技術的な知見は、図 1.2 に示すアプローチにより、THALES2/KICHE コードに集約する計画である。THALES2/KICHE コードに熱化学平衡理論を直接導入するのではなく、同コードが有する高速な計算機能を維持するために、VICTORIA2.0 コードを用いて構築した化学組成データベースに基づいたベイズ統計モデルを用いる。このベイズ統計モデルは、原子力機構で整備したソースタームの不確かさ及び重要度解析手法において応用された実績を有している[1.9]。

THALES2/KICHE コードの活用例を図 1.3 に示す。1F 事故の分析・評価等に用いるとともに、不確かさ解析手法、重要度解析手法、最適化解析手法やオフサイト事故影響解析コー

ド OSCAAR[1.10]と連携することにより、多様なシビアアクシデントシーケンスのソースターム評価、PRA、緊急時防護対策の検討、シビアアクシデント対策の有効性評価等に活用することができる。

参考文献

- [1.1] N. Girault et al., “Towards a Better Understanding of Iodine Chemistry in RCS of Nuclear Reactors,” Nucl. Eng. Des., 239, 1162–1170, 2009.
- [1.2] 古田定昭 他, “福島第一原子力発電所事故に係る特別環境放射線モニタリング結果－中間報告（空間線量率, 空气中放射性物質濃度, 降下じん中放射性物質濃度）－”, JAEA-Review 2011-035, 日本原子力研究開発機構, 2011 年 8 月.
- [1.3] T. Ohkura et al., “Emergency Monitoring of Environmental Radiation and Atmospheric Radionuclides at Nuclear Science Research Institute, JAEA Following the Accident of Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant,” JAEA-Data/Code 2012-010, Japan Atomic Energy Agency, May, 2012.
- [1.4] M. Kajimoto et al., “Development of THALES-2, A Computer Code for Coupled Thermal-Hydraulics and FP Transport Analyses for Severe Accident at LWRs and Its Application to Analysis of FP Revaporization Phenomena,” Proc. International Topical Meeting on Safety of Thermal Reactors, Portland, OR, 584-592, 1991.
- [1.5] K. Moriyama, Y. Maruyama and H. Nakamura, “Kiche: A Simulation Tool for Kinetics of Iodine Chemistry in the Containment of Light Water Reactors under Severe Accident Conditions,” JAEA-Data/Code 2010-034, Japan Atomic Energy Agency, March, 2011.
- [1.6] J. Ishikawa, K. Kawaguchi and Y. Maruyama, “Analysis for Iodine Release from Unit 3 of Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant with Consideration of Water Phase Iodine Chemistry,” J. Nucl. Sci. Technol. DOI : 10.1080/00223131.2014.951417, September, 2014.
- [1.7] N. E. Bixler, “VICTORIA 2.0: A Mechanistic Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions,” NUREG/CR-6131 SAND93-2301 R3, December, 1998.
- [1.8] M. Uchida and H. Saito, “HORN: A computer code to analyze the gas-phase transport of fission products in reactor cooling system under severe accidents,” JAERI-M 86-158, 1986.
- [1.9] X. Zheng, H. Itoh, H. Tamaki and Y. Maruyama, “An Integrated Approach to Uncertainty and Sensitivity Analysis for Nuclear Reactor Severe Accidents,” J. Nucl. Sci. Technol., DOI : 10.1080/00223131.2015.1044262, June, 2015.
- [1.10] T. Homma, K. Tomita and S. Hato, “Uncertainty and Sensitivity Studies with the Probabilistic Accident Consequence Assessment Code OSCAAR,” Nucl. Eng. Technol., 37(3), 245-258, 2005.

表 1.1 事業の実施スケジュール及び実施内容

	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度
実験	●VERDON5実験 ●AGFコールド実験①② ●AGFホット実験の準備	●VERDON5実験（分析等） ●AGFコールド実験③④ ●AGFホット実験①	●AGFコールド実験⑤⑥ ●AGFホット実験①（分析等） ●AGFホット実験②	●AGFホット実験②（分析等） ●成果の取りまとめ
解析	●VICTORIA92コードの整備及び試解析（VEGA実験） ●化学平衡組成データベースの構築 ●THALES2コードへのFP放出モデルの導入	●VICTORIA92コードによる実験解析 ●化学平衡組成統計モデルの構築 ●THALES2コードへの統計モデル組み込み	●VICTORIA92コードによる実験解析 ●化学平衡組成統計モデルの更新 ●THALES2コードによる実機ソースタム解析	●THALES2コードによる実機ソースタム解析 ●成果の取りまとめ

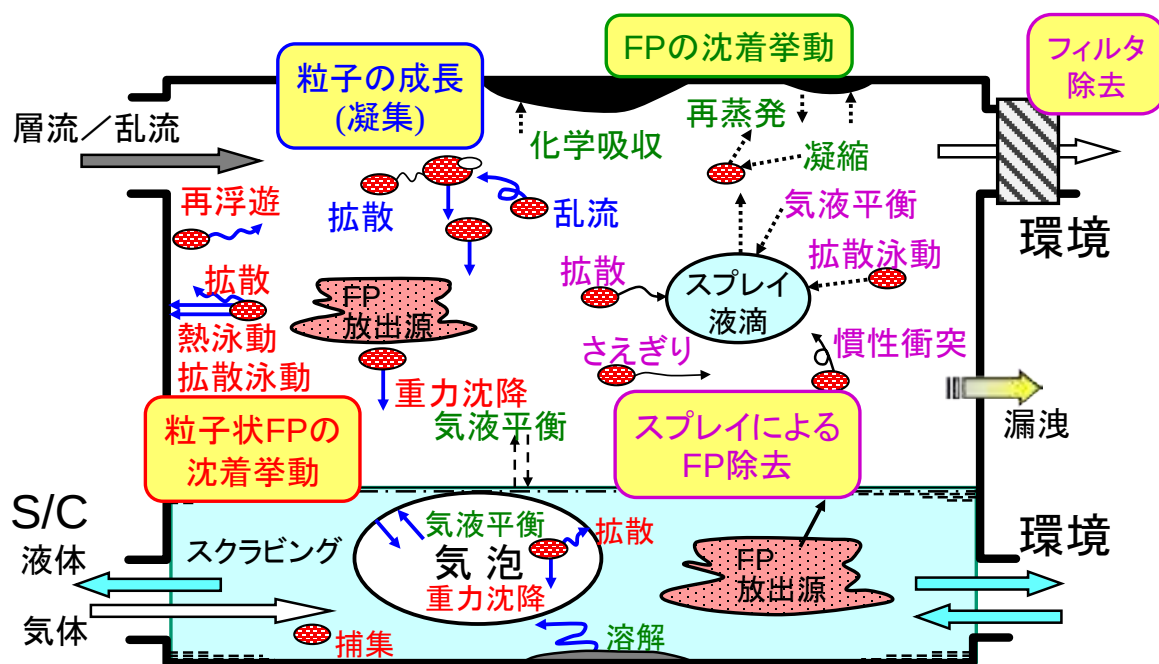


図 1.1 シビアアクシデント時に生じる放射性物質の移行挙動

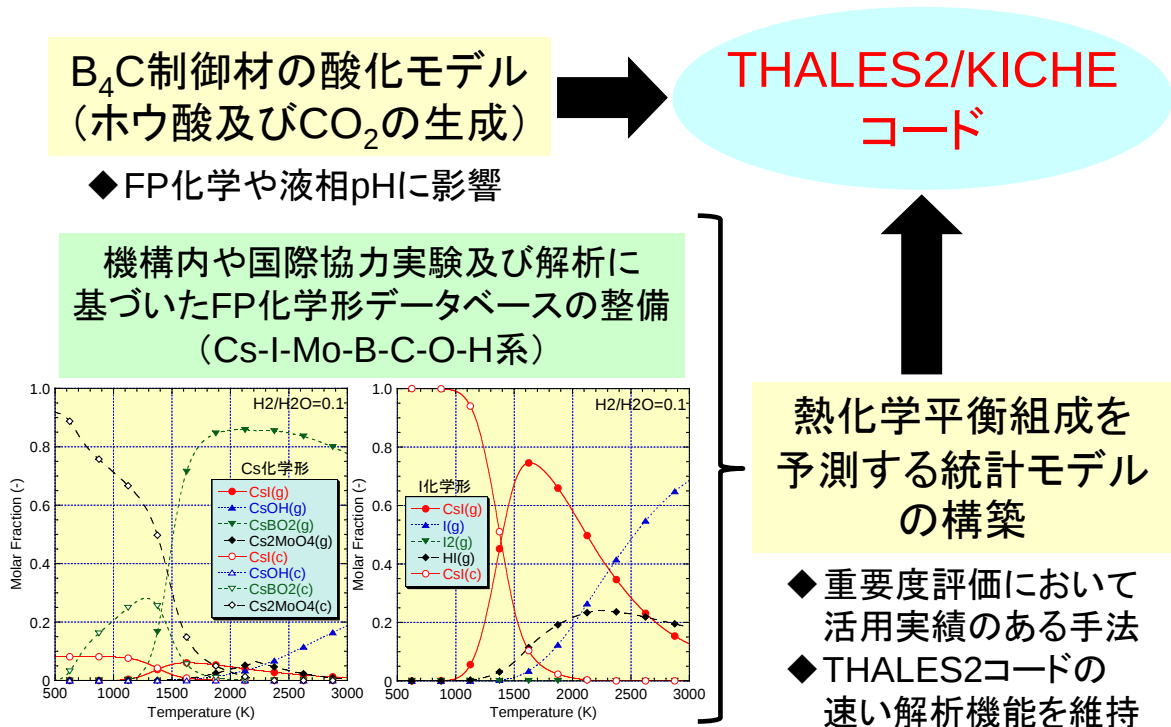


図 1.2 THALES2/KICHE コードの高度化 (原子炉冷却系内 FP 化学解析機能の導入)

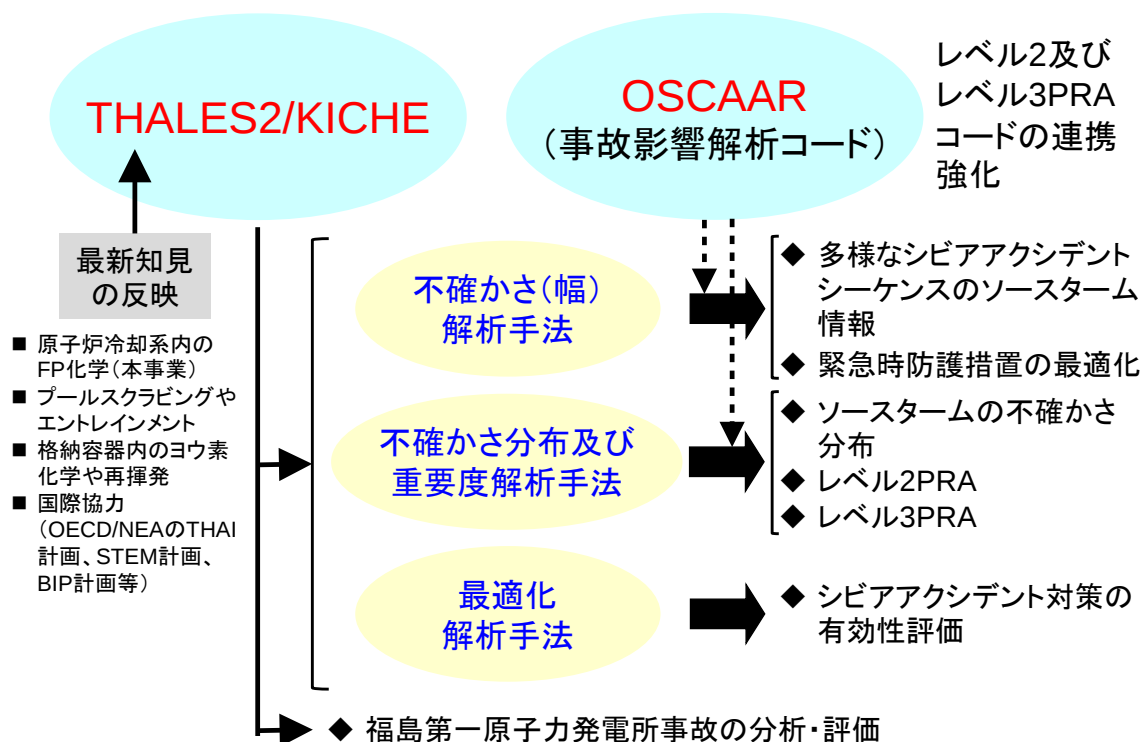


図 1.3 THALES2/KICHE コードの活用

2. FP 化学及び移行に係わる実験

2.1 VERDON 実験

2.1.1 VERDON 実験施設 [2.1.1]

VERDON 装置は仏国原子力・代替エネルギー庁 (CEA) のカダラッシュ研究所に設置された装置であり、多様な雰囲気下でのシビアアクシデント条件における核分裂生成物 (FP) 放出・移行を再現することが可能である。燃料溶融温度まで加熱可能な高周波誘導加熱炉、973 (上流) ~ 423 K (下流) で線形的に温度分布を付けた温度勾配管、エアロゾルフィルタ、ガス状ヨウ素を捕集する May-pack フィルタ、FP やホウ素 (B) 蒸気種を捕集するコンデンサー、ガス状のルテニウム (Ru) 酸化物を捕集する P4VP フィルタ、FP ガスを測定するためのガスクロマトグラフィ装置から構成される。 γ 線スペクトロメーターが加熱炉の燃料装荷部、エアロゾルフィルタ及び May-pack フィルタ (VERDON-5 実験において新たに設置) を対象に配置されており、それぞれ γ 線放出核種の放出速度、エアロゾルの沈着・再蒸発速度及びガス状のヨウ素 (I) の生成量のオンライン測定が可能となっている。また、実験後に温度勾配管を含む各部位の γ 線スペクトル測定を行うことにより、 γ 線放出核種量及びその分布を測定することが可能である。

2.1.2 VERDON-2 及び VERDON-5 実験結果概要 [2.1.2]

VERDON-2 実験は、国際ソースタームプログラム (ISTP: International Source Term Program) の枠組みにおいて 2012 年 6 月に実施された。VERDON-2 実験の主な目的は、空気中における高燃焼度の混合酸化物 (MOX) 燃料からの FP、特に空気雰囲気において放出が促進されるルテニウムの放出・移行挙動を評価することにより、PWR におけるシビアアクシデント時に想定される空気混入シナリオにおけるソースタームに係わるデータベースを拡充・改良することである。

加熱実験に供した燃料試料は、燃焼度 60 GWd/t の被覆管付き MOX 燃料であり、燃料内に短半減期 FP を生成させるために、加熱実験直前に研究炉 OSIRIS において短期間の再照射を実施している。この MOX 燃料試料を水蒸気雰囲気で 1773 K まで加熱して被覆管を酸化させた後、2273 K で雰囲気を空気雰囲気に切り替えている。加熱実験中及び実験後の γ 線スペクトル測定により以下の結果が得られている。

- ・ セシウム (Cs)、モリブデン及びバリウムの放出速度は、過去の放出実験に比べ高い値を示した。
- ・ May-Pack フィルタの γ 線スペクトル測定により、従来の既往研究において実験的なデータが得られていなかったガス状のヨウ素化合物の測定データを得ることに成功した。
- ・ セシウムの沈着挙動は、空気雰囲気への切り替えによってほとんど変化は無かったが、ヨウ素の沈着挙動は大きく変化した。沈着したヨウ素は、空気雰囲気への切り替えにより再蒸発し、低温側に移行することが分かった。
- ・ ルテニウムの放出速度・割合は、空気雰囲気において非常に高くなることが分かった。ルテニウムは温度勾配管の低温側に沈着し、再蒸発はほとんど生じなかった。

空気雰囲気下で MOX 燃料において非常に高いルテニウム放出速度・割合となった VERDON-2 実験の結果を受け、VERDON-5 実験では同加熱条件で高燃焼度の UO_2 に対して試験を実施することで、MOX との対比に着目してルテニウム挙動に関するデータを拡充し、空気混入シナリオにおけるソースタームに関するデータベースを拡充・改良することを目的としている。

加えて、被覆管酸化のための水蒸気雰囲気下での加熱時にホウ素を添加して実験を行うことで、炭化ホウ素 (B_4C) 制御材崩落が原子炉冷却系における FP の化学挙動に与える影響、またこれにより生成する可能性が考えられるガス状ヨウ素の生成挙動に関するデータ取得を目的としている。ホウ素が CsI と反応することによりガス状ヨウ素が生成し得るという挙動については、熱力学的な解析研究や基礎実験等によりその可能性が示唆されているが[2.1.3, 2.1.4]、より事故時の条件に近い VERDON 実験装置を用いて検証することにより、ソースターム上重要な挙動となり得るかの確認を行う。

VERDON-5 実験は 2015 年 11 月に実施された。研究炉 OSIRIS において短半減期 FP を生成させるために高燃焼度 UO_2 燃料を短期照射した後に、燃料試料をカダラッシュ研究所に輸送し、加熱実験に供した。ホウ素は被覆管を酸化させるための水蒸気雰囲気下での加熱時においてホウ酸水として添加された。 γ 線放出核種の放出速度及びガス状のヨウ素化合物の生成量に関するデータ取得のために加熱実験中における燃料及び May-pack フィルタへの γ 線スペクトル測定を実施した。また、FP 流路中の γ 線放出核種量及びその分布に関するデータ取得のために加熱試験後に温度勾配管等への沈着物の γ 線スペクトル測定を実施した。

本年度は VERDON-5 実験に関して CEA が取りまとめたデータ速報を入手し、プログラム管理委員会会合 (PMB) への参加により実験結果の解釈を進めるとともに、解析に必要な情報を整理した。なお、試験の最終報告書は 2017 年 12 月に入手する予定である。上記の FP に与えるホウ素の影響を評価するために VERDON-2 及び VERDON-5 実験で得られた FP 及びホウ素の沈着試料に対する X 線回折測定、ラマン分光測定、化学分析計画を検討した。

参考文献

- [2.1.1] A. Gallais-During et al., “Performance and first results of fission product release and transport provided by the VERDON facility,” Nucl. Eng. Design, 277, 117-123, 2014.
- [2.1.2] A. Gallais-During et al., “Overview of the VERDON-ISTP Program and main insights from the VERDON-2 air ingress test,” Nucl. Eng. Design, 277, 117-123, 2014.
- [2.1.3] K. Minato, “Thermodynamic analysis of cesium and iodine behavior in severe light water reactor accidents,” J. Nucl. Mater., 185, 154-758, 1991.
- [2.1.4] J. Kalilainen et al., “Chemical reactions of fission product deposits and iodine transport in primary circuit conditions,” Nucl. Eng. Design, 267, 140-147, 2014.

2.2 AGF におけるホット実験

2.2.1 目的

シビアアクシデント解析コードに組み込まれる物理モデルの構築や改良に必要な基礎データを取得するために、照射済燃料とホウ素を含有する試料を用いて FP 移行時の系統内における高温化学反応を想定した実験を行い、生成された化合物の化学形や結晶構造等に関する基礎データを取得する。

本実験においては、照射済み燃料を高温まで加熱できること、BWR 制御材に含まれるホウ素の影響を考慮できること、VERDON-5 実験を補完する雰囲気組成を設定できることを条件として、照射済み燃料を用いたホット実験が可能な日本原子力研究開発機構 大洗研究開発センター照射燃料試験施設 (AGF) のホットセル内に設置されている FP 放出移行試験装置[2.2.1, 2.2.2]を用いた。不活性雰囲気において照射済燃料から放出されたセシウム、ヨウ素等の FP 蒸気種と BWR 制御材 B_4C の酸化により生成する酸化ホウ素 (B_2O_3) 蒸気種との気相中反応が再現できる条件を設定して加熱実験を実施した。本年度においては、これらの気相中反応挙動評価において重要となるセシウム等の FP 放出速度 (量) に関するデータを取得するとともに、化学形等を評価するための化学分析等に供する試料としてシビアアクシデント時の一次冷却系の温度範囲を再現した温度勾配管やフィルタ等への沈着試料を準備した。

2.2.2 実験方法

(1) 実験装置

FP 放出移行試験装置の模式図及び外観をそれぞれ図 2.2.1 及び図 2.2.2 に示す。FP 放出移行試験装置は、加熱炉、温度勾配管、フィルタ、ガス供給システム、FP トラップシステム等から構成される。また、FP 等の放出速度等を計測するため、 γ 線スペクトロメーター、FP ガス等の捕集システム、ガスクロマトグラフィが設置されている。加熱炉は高周波誘導加熱を用いており、加熱雰囲気は不活性雰囲気に限定されるが、約 3000 K までの高温加熱が可能である。加熱炉上部に接続された温度勾配管は、1023 K (上流) ~ 423 K (下流) の間で線形的に温度分布が付けられており、充填されたステンレス鋼 (SS) 304 製のサンプリング管 (内径 4.2 mm $\times$ 30 mm : 14 本) により FP の化学形に応じた沈着物を捕集できる。この温度勾配管の他、温度勾配管の出口に配置されているメッシュの異なる SS 製焼結金属フィルタ (入口側からフィルタメッシュ : 43 μ m、30 μ m、10 μ m、5 μ m、1 μ m) によりエアロゾル状の試料を捕集する。これらの FP 沈着物を捕集可能な温度勾配管及びフィルタは二系統 (A 系統及び B 系統) を有しており、放出温度等、異なる条件で放出した FP を捕集することが可能である。

γ 線スペクトロメーター (セイコー EG & G 社製 GEM15P4-70PL) は A 系統の温度勾配管の出口に設置されている焼結金属フィルタを対象としており、 γ 線核種のフィルタへの沈着速度をオンラインで計測することが可能である。ガス捕集システムは、加熱により放出された FP ガスを最下流のグローブボックスに設置されているサンプリングボトルに捕集し、捕集したガスのガスクロマトグラフ分析 (ヤナコ社製 G2800T) を行うことにより、ガスの定量分析を行うことが可能である。

本 FP 放出移行試験装置は VERDON 装置と試験体系や計測系についてはほぼ同等であることから、不活性雰囲気での実験により VERDON-5 実験を補完するデータの取得が可能と考えられる。

(2) 実験条件

表 2.2.1 に加熱条件を示す。加熱実験には新型転換炉原型炉「ふげん」で最高燃焼度を達成した集合体である PPFE09 (E09) にて照射された MOX 燃料（製造時プルトニウム (Pu) 富化度：3.01%）及び B_2O_3 粉末（高純度化学研究所製、99.995%）を供した。「ふげん」は減速材に重水、冷却材に軽水をそれぞれ利用しており、燃料集合体が圧力管内に装荷された原子炉である。E09 は「ふげん」炉心の第 16 ～ 25 サイクルまで炉心中心位置で照射され、本加熱実験に供した中間層燃料棒の照射履歴中における最大線出力は 34.1 kW/m であり、最高約 45 GWd/t の燃焼度を達成している。本加熱実験に用いた試料は外層に装荷された MOX 燃料であり、燃焼度は約 41.6 GWd/t である。

外層燃料棒から試料重量が約 5 g になるように、ダイヤモンドホイールを用いて乾式にて輪切り切断を行い、燃料ペレットを取り出した。加熱時における燃料ペレットからの FP 放出量を促進させることを目的に、エリスモーターを用いて燃料ペレットを小片に粉砕した。

一回の加熱実験により B_2O_3 蒸気種の影響を評価するため、燃料から放出した FP と B_2O_3 蒸気種を気相中で作用させる条件（A 系統）と FP のみの条件（B 系統）となるように加熱温度履歴を検討した。検討においてセシウムの放出速度は、過去の「ふげん」E09 燃料を用いた加熱実験結果より放出モデル CORSOR-M の係数を調整して算出した。また、 B_2O_3 の放出速度は、AGF で実施したコールド実験の結果を基に算出した。図 2.2.3 に示した加熱温度履歴と想定されるセシウムとホウ素の放出速度を示す。これより、加熱温度を最高 2173 K、昇温速度を 3 K/s とすることで保持時間 5 分後までに約 40% の Cs が放出される一方で、全ての B_2O_3 が放出し、気相中で FP と B_2O_3 が共存して A 系統内を移行する条件が期待できることが分かった。また、全ての B_2O_3 が放出した保持温度 5 分で A 系統から B 系統に切り替えることで、B 系統で FP のみが移行する条件を達成できるものと考えられる。

上記の条件を達成するためには燃料と B_2O_3 （融点：約 750 K）が B_2O_3 の蒸発前に反応することを防ぐことが必要であり、加熱実験においては図 2.2.4 の模式図に示すように小型のタングステン製のつぼを準備し、約 5 g の「ふげん」燃料と約 30 mg の B_2O_3 試料を別々の加熱炉に装荷した。

加熱炉の温度 2173 K（昇温速度 3 K/s、保持時間 20 分）、温度勾配管の温度を 1023 K（上流）～ 423 K（下流）でアルゴン（Ar）ガスフロー（1 L/min）雰囲気下で試料を加熱し、温度勾配管に充填されている SS 製のサンプリング管、焼結金属フィルタ等にて放出した FP 及びホウ素化合物を捕集した。加熱中に放出され、温度勾配管上部の焼結金属フィルタに沈着した FP については、オンラインにより γ 線スペクトル測定（1 計測当たり 60 秒間、変動係数 CV 値：3%）を実施した。また、放出量を定量するために加熱前後の燃料についても γ 線スペクトル測定を実施した。フィルタを通過した FP についてはホットセル外のサンプリングボトルに 1 分間で連続 10 本捕集し、加熱試験後にオフラインにてガスクロマトグラフ分析（最小検出濃度：He 0.5 ppm、Kr 10 ppm、Xe 10 ppm）を実施した。FP ガスの捕集

は、加熱温度が約 625 K ~ 2173 K（図 2.2.3 における 1 分 ~ 11 分）における放出 FP を対象に捕集を行った。

2.2.3 実験結果

(1) オンライン γ 線スペクトル測定

オンライン γ 線スペクトル測定の結果より得られた Cs-137 の計数率変化を図 2.2.5 に示す。セシウムの放出は約 2100 K から開始しており、図 2.2.3 に示す想定に比べ高温での放出開始となった。しかしながら、加熱前後の燃料の γ 線スペクトル測定結果より算出した全放出割合は 0.86 で想定とほぼ同じであり、また図 2.2.5 に実験結果を CORSOR-M モデル式でフィッティングした結果を合わせて示すが、A 系統と B 系統でほぼ同量のセシウムが放出していることから、想定通りの加熱実験が実施でき、化学分析等に供する試料としてシビアアクシデント時の一次冷却系の温度範囲を再現した温度勾配管やフィルタ等への沈着試料を準備できたことを確認した。今後、サンプリング管や焼結金属フィルタに沈着したセシウム等の FP 量を測定し、FP 放出速度を定量する。

(2) ガスクロマトグラフ分析

ガスクロマトグラフ分析の結果より得られたヘリウム (He)、クリプトン (Kr)、キセノン (Xe) の単位時間当たりの濃度を図 2.2.6 に示す。ヘリウム、クリプトン、キセノンの燃料からの放出はそれぞれ約 1200 K から開始し、ヘリウムに関しては約 1800 K、クリプトン及びキセノンに関しては約 1900 K で放出がピークを示した。これらの FP ガスの濃度から元素量を算出し、ORIGEN-2 計算により燃料中に生成した量と比較した結果、ほぼ全量が放出されていることが分かった。これらの各 FP ガスの放出温度は、同燃料を用いた加熱実験結果[2.2.4]や欧州で実施された VERCORS 実験[2.2.5]と同様な傾向を示した。

参考文献

- [2.2.1] I. Sato et al., “Fission Products Release from Irradiated FBR MOX Fuel during Transient Conditions,” J. Nucl. Sci. Technol., 40 (2), 104-113, 2003.
- [2.2.2] K. Tanaka et al., “Effects of interaction between molten zircaloy and irradiated MOX fuel on the fission product release behavior,” J. Nucl. Sci. Technol., 51 (7-8), 876-885, 2014.
- [2.2.3] T. Haste et al., “Transport and deposition in the Phébus FP circuit,” Annal. Nucl. Eng., 61, 102-121, 2013.
- [2.2.4] 田中 康介 他, “化学形に着目した破損燃料からの核分裂生成物及びアクチニドの放出挙動評価,” JAEA 報告書, JAEA-Research 2013-022, 2013.
- [2.2.5] Y. Pontillon et al., “Behaviour of fission products under severe PWR accident conditions The VERCORS experimental programme—Part 2: Release and transport of fission gases and volatile fission products”, Nucl. Eng. Design, 240, 1853-1866, 2010.

表 2.2.1 加熱実験条件

加熱条件		
照射燃料	照射炉	新型転換炉「ふげん」
	Pu 富化度（製造時：％）	3.01（MOX 燃料）
	燃焼度（GWd/t）	41.6
	装荷重量（g）	5
ホウ素化合物	化学形	B ₂ O ₃
	装荷重量（mg）	30
試料加熱	加熱温度（K）	2173
	昇温速度（K/s）	3
	保持時間（min）	20
	ガス雰囲気	Ar
	ガス流量（L/min）	1
温度勾配管加熱	最高温度（K）	1023
	最低温度（K）	423
	温度分布	線形

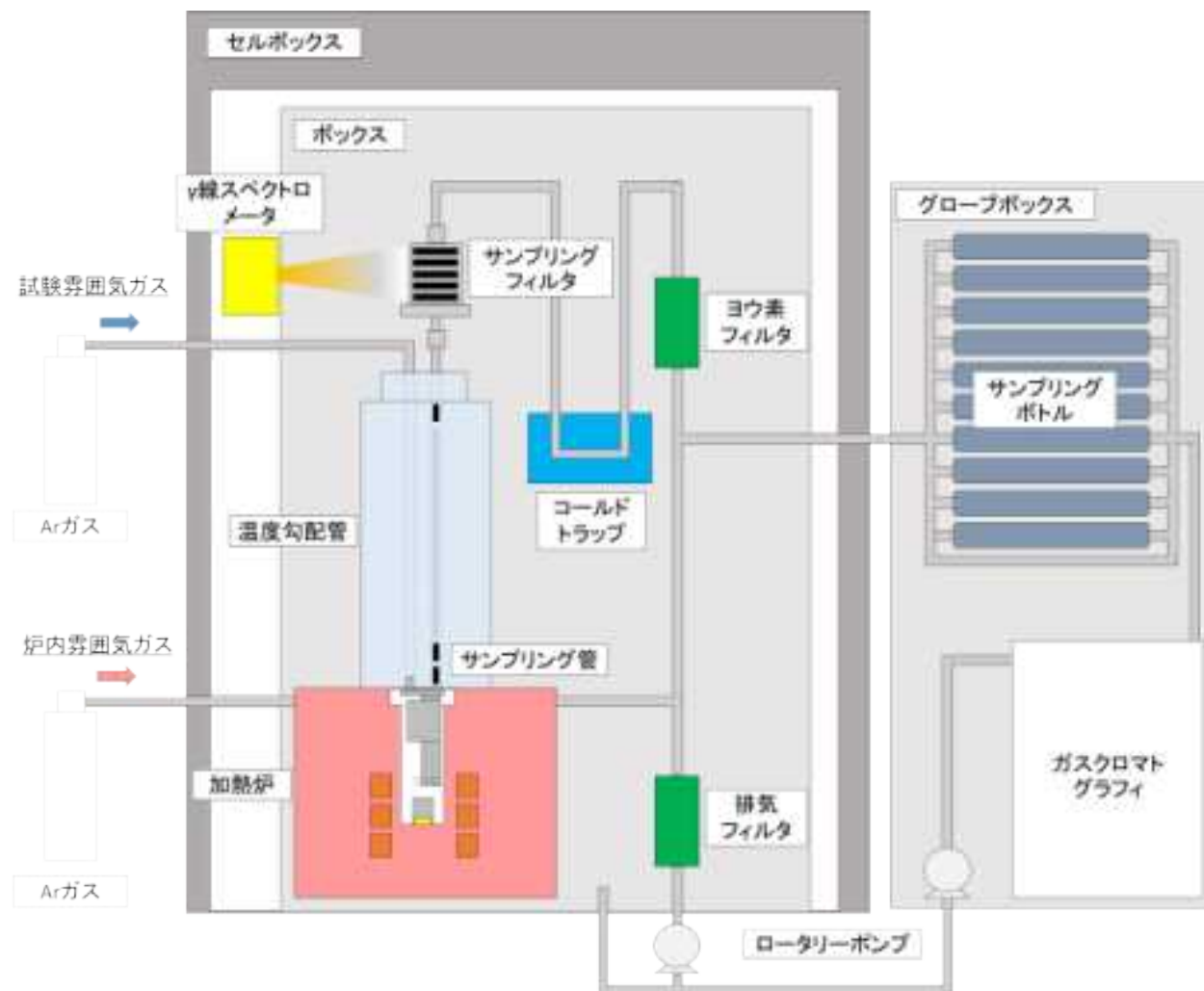


図 2.2.1 FP 放出移行試験装置模式図



図 2.2.2 FP 放出移行試験装置外観写真

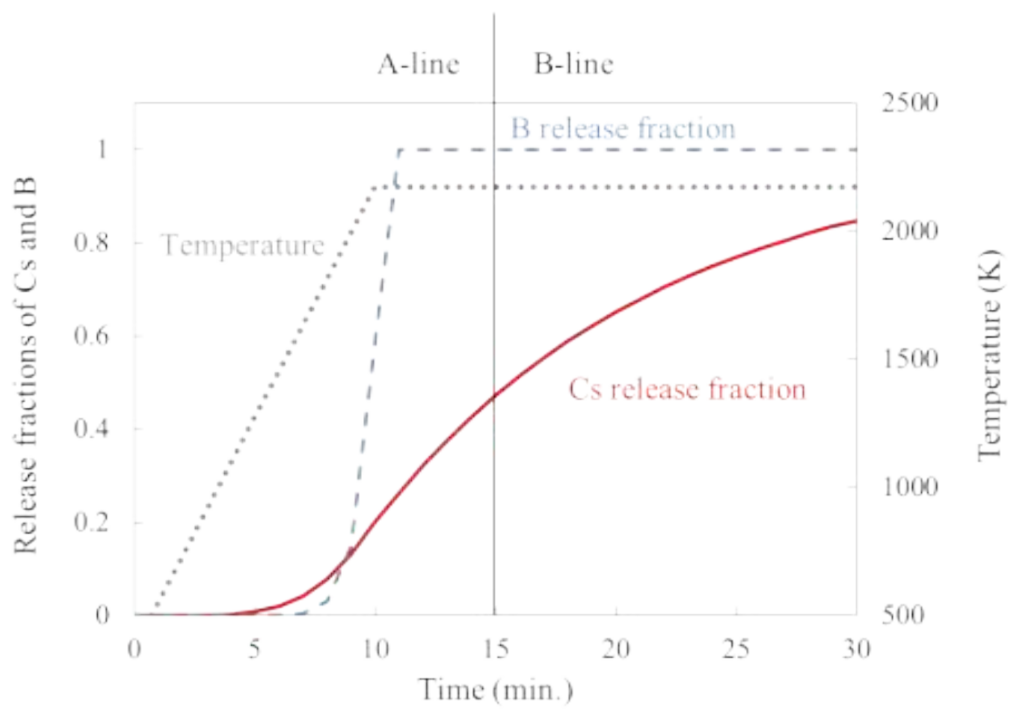


図 2.2.3 加熱履歴と想定されるセシウム及びホウ素の放出速度

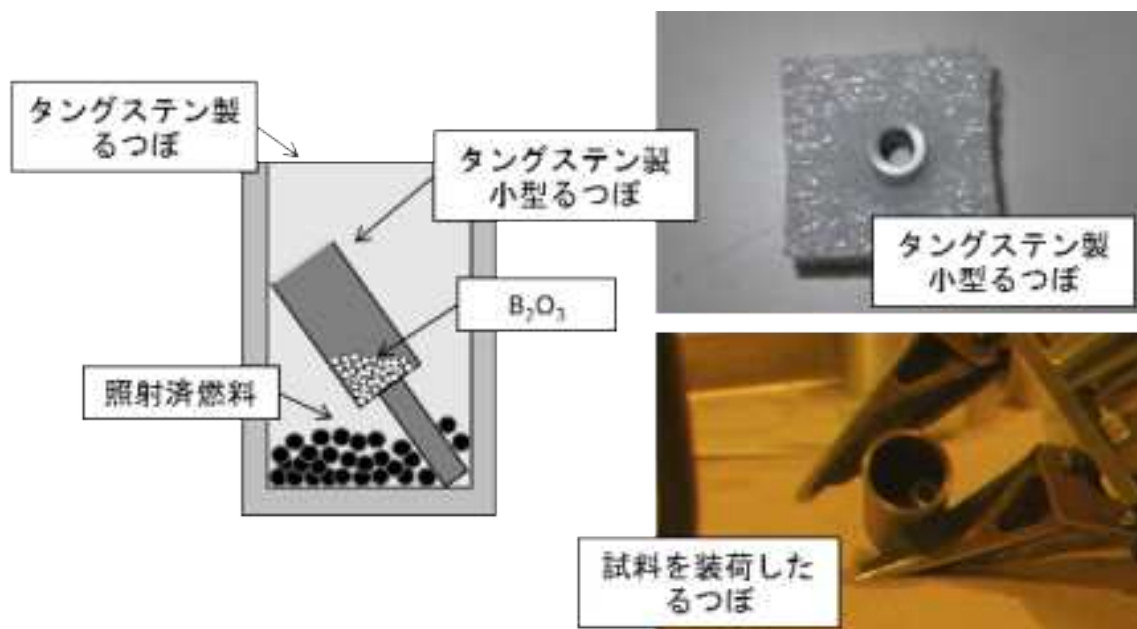


図 2.2.4 試料模式図

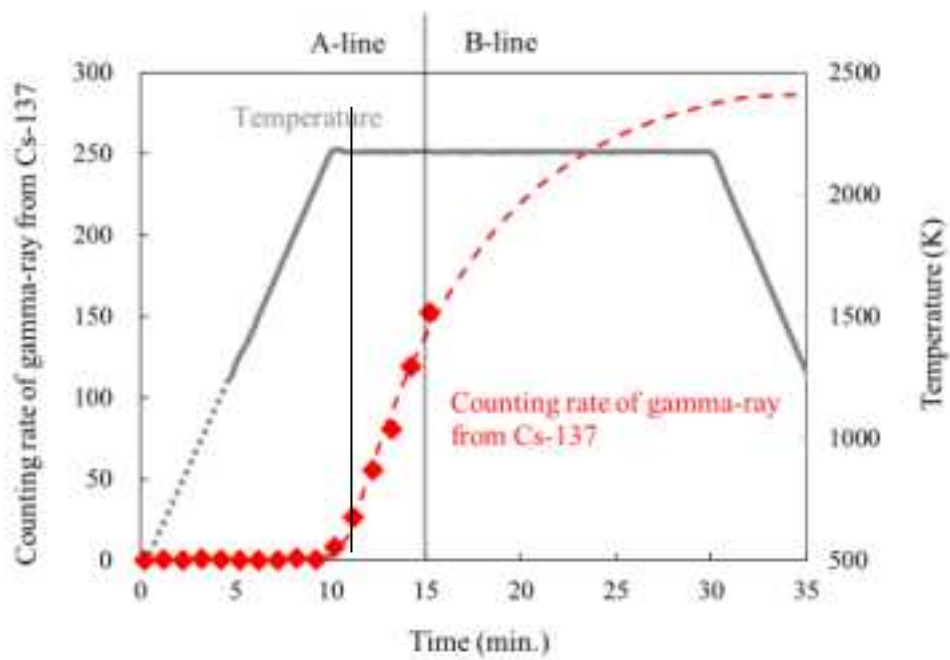


図 2.2.5 焼結金属フィルタにおける Cs-137 の計数率変化（変動係数 CV 値：3%）

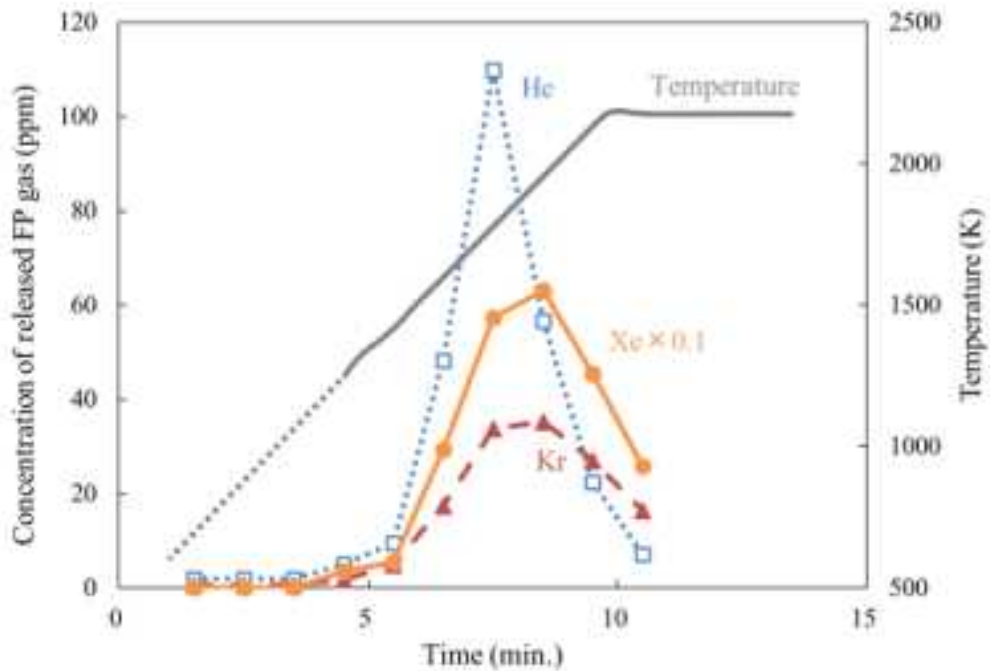


図 2.2.6 ヘリウム、クリプトン、キセノンの単位時間当たりのガス中の濃度
（最小検出濃度：He 0.5 ppm、Kr 10 ppm、Xe 10 ppm）

2.3 AGF におけるコールド実験

2.3.1 目的

シビアアクシデント解析コードに組み込まれる物理モデルの構築や改良に必要な基礎データを取得するために、非放射性のセシウム、ヨウ素、ホウ素等を含有する試料を用いて FP の炉内移行時における高温化学反応を想定した実験を行い、生成された化合物の化学形や結晶構造等に関する基礎データを取得する。平成 27 年度に引き続き、 H_2 を含む還元雰囲気において放出時のヨウ素の化学形として考えられている CsI[2.3.1]の原子炉構造材等表面等への沈着物と BWR 制御材 B_4C の酸化により生成する B_2O_3 の蒸気種との固相－気相反応に着目した加熱実験を実施した。実験は、シビアアクシデント時の一次冷却系の温度範囲を再現した FP 移行挙動模擬試験装置を用いて温度勾配管中のサンプリング管、焼結金属フィルタ等で CsI 沈着物と B_2O_3 蒸気種を反応させ、その生成物等を対象に化学分析、X 線回折、ラマン分光計測等を実施し、 B_2O_3 の有無による沈着物性状の比較によりホウ素の影響を検討した。

平成 27 年度においては、CsI 沈着物と B_2O_3 の蒸気種との固相－気相反応により有意な量のヨウ素が再蒸発したことを示唆する結果が得られた。しかしながら、平成 27 年度の実験条件では、CsI 沈着物が再蒸発して CsI 蒸気種と B_2O_3 蒸気種が気相中で反応した可能性があること、また再蒸発して低温部に移行したヨウ素が分析できていない（沈着物のヨウ素量の低下より再蒸発が生じたと評価）ことから、本年度はこれらを踏まえた実験条件にて加熱実験を実施することとした。

2.3.2 実験方法

(1) 実験装置

FP 移行挙動模擬試験装置の模式図及び外観をそれぞれ図 2.3.1 及び図 2.3.2 に示す。本装置は、主に試料を蒸発させる加熱炉と放出された FP 等を捕集する温度勾配管等から構成される。試料の加熱は、高周波誘導加熱により行い、最高温度は 2273 K、最高昇温速度は 15 K/s である。加熱炉上部に接続された温度勾配管は、1023 K（上流）～423 K（下流）の間で線形的に温度分布が付けられており、充填された SS304 製のサンプリング管（内径 4.2 mm × 30 mm : 14 本）により FP の化学形に応じた沈着物を捕集できる。この温度勾配管の他、温度勾配管の出口に配置されているメッシュの異なる SS 製焼結金属フィルタ（入口側からフィルタメッシュ : 43 μm 、30 μm 、10 μm 、5 μm 、1 μm ）、PTFE メンブレンフィルタ（0.1 μm ）によりエアロゾル状の試料を捕集する。また、これらの下流側で水酸化ナトリウム及びチオ硫酸ナトリウム溶液トラップ（0.2 mol/L NaOH + 0.02 mol/L $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ ）によりガス状の試料を捕集することが可能である。

(2) 実験条件

加熱実験には、高純度の CsI 粉末（高純度化学研究所製、99%）と B_2O_3 粉末（高純度化学研究所製、99.995%）を供した。表 2.3.1 及び図 2.3.3 にそれぞれ加熱条件及び実験フローを示す。 B_2O_3 の影響を評価するため、比較として CsI のみを蒸発・沈着させた場合（CsI 実験）と CsI を蒸発・沈着させた後に B_2O_3 を蒸発させ沈着物と作用させる場合（CsI+ B_2O_3 実

験)の2回の加熱実験を行った。

加熱実験においては、先ず約80 mgのCsIをタングステン製るつぼに入れ加熱炉に装荷し、加熱炉の温度2173 K(昇温速度3 K/s、保持時間150分)、温度勾配管の温度を1023 K(上流)~400 K(下流)(図2.3.4)でAr+4% H_2 ガスフロー(1 L/min)雰囲気下で全量を蒸発させ、温度勾配管に充填されているSS製のサンプリング管、焼結金属フィルタ等に沈着させた。CsI沈着物の再蒸発によるCsI蒸気種と B_2O_3 蒸気種との気相中反応を抑制するために、第3章の図3.1.3に示すVICTORIA2.0コードを用いた解析結果を踏まえ、平成27年度の条件よりもCsIの加熱保持時間を長くして再蒸発を生じさせることで B_2O_3 蒸発時のCsI再蒸発を抑制するようにした。加熱後、タングステン製るつぼ、サンプリング管、焼結金属フィルタの重量を電子天秤(メトラートレド社製MS205DU、最小表示0.01 mg、変動係数CV値:0.004%)により測定し、加熱前後の重量変化からCsIの蒸発量及び各箇所への沈着量を評価した。

重量測定の後、CsIが沈着したサンプリング管、焼結金属フィルタ等を再び装置内に戻し、再加熱を実施した。再加熱時の条件は、CsI実験ではタングステン製るつぼに試料は入れず、CsI+ B_2O_3 実験では160 mgの B_2O_3 をタングステン製るつぼに入れ、到達温度2108 K(昇温速度3 K/s、保持時間60分)、温度勾配管の温度を1023 K(上流)~423 K(下流)(図2.3.4)とし、最初の加熱雰囲気と同様にAr+4% H_2 フロー(1 L/min)雰囲気とした。加熱実験後、サンプリング管及び焼結金属フィルタの重量を電子天秤により測定し、沈着後再加熱でのCsI及び B_2O_3 の再蒸発及び沈着量を確認した。

重量測定の後、サンプリング管を二等分に輪切りし、一方は焼結金属フィルタとともにICP-MS分析に供し、沈着物中に含まれる元素量を定量した。さらに、焼結金属フィルタの下流側の配管内やメンブレンフィルタに沈着した試料やガス捕集液もICP-MS分析に供した。もう一方のサンプリング管は鉛直方向に二等分に縦割りし、それぞれX線回折測定及びラマン分光計測に供することにより、結晶構造や分子構造等に関するデータを取得し、元素分析の結果と合わせて化学形を評価した。

ICP-MS分析(パーキンエルマージャパン社製ELAN DRC-II)では、Cs-133、I-127、B-10及びB-11を対象とした。SS製サンプリング管等に沈着したCs、I、B化合物を溶解させるため、サンプリング管等をテフロン製ビーカーに入れ、0.04 mol/L水酸化ナトリウム溶液を20 ml添加後、18時間室温で静置した。沈着物の溶解後、50 mlメスフラスコに回収し、イオン交換水を添加しメスアップを行って分析サンプルとした。なお、本装置を用いたCs-133、I-127、B-10及びB-11測定の定量下限値はそれぞれ0.11230 μg 、1.5044 μg 、1.6583 μg 及び0.92080 μg であり、変動係数CV値は、それぞれ1.2%、3.5%、1.4%及び2.0%であった。

X線回折測定(リガク社製MiniFlex)は、Cu-K α 線を用いて、加速電圧30 kV、電流15 mAで実施した。ラマン分光計測(日本分光社製NRS-3100)は、不活性雰囲気において、レーザー波長532 nm、レーザー出力12 mWとした。測定温度はいずれも室温とした。

2.3.3 実験結果

(1) サンプリング管、焼結金属フィルタ等への沈着物外観

(a) CsI 実験

CsI 実験における温度勾配管内のサンプリング管及び焼結金属フィルタへの沈着物の外観をそれぞれ図 2.3.5 及び図 2.3.6 に示す。サンプリング管に関しては、高温領域 (970 K) において SS 表面で変色を観察されたものの沈着物はほとんど観察されなかった。中温 (724 K) 及び低温 (363 K) 領域においては、サンプリング管内表面において沈着物が観察されたが、沈着物の色は中温領域では黒色、低温領域では灰色であった。フィルタに関しては、各フィルタで白色の沈着物が観察され、特に最も上流側である 43 μm メッシュのフィルタにおいて多量の沈着物が観察された。

(b) CsI+B₂O₃ 実験

CsI+B₂O₃ 実験における温度勾配管内のサンプリング管及び焼結金属フィルタへの沈着物の外観をそれぞれ図 2.3.7 及び図 2.3.8 に示す。サンプリング管及び焼結金属フィルタへの沈着物の外観は、CsI 実験とほぼ同じであったが、サンプリング管の低温 (363 K) 領域において白色の沈着物が観察された。

(2) サンプリング管、焼結金属フィルタ等の付着物重量

(a) CsI 実験

電子天秤により測定した CsI 実験におけるサンプリング管及び焼結金属フィルタの加熱実験後の重量変化を図 2.3.9 及び図 2.3.10 に示す。重量測定の結果、1 回目の 2173 K での加熱において、タングステン製のつぼ内に装荷した CsI の全量が蒸発し、サンプリング管及び焼結金属フィルタにほぼ全量が沈着していることを確認した。サンプリング管への沈着物重量は、620 ~ 850 K 付近で高く、約 770 K で最も高くなった。フィルタへの沈着物重量は、上流側に配置されたメッシュサイズ 43 μm のフィルタで最も高くなった。

2 回目の 2108 K での再加熱後、サンプリング管への沈着物の重量は 720 ~ 850 K 付近で有意量変化した。770 ~ 850 K 近傍において重量が減少し、720 K 以下の温度で重量が僅かに増加するという結果となった。フィルタへの沈着物重量もメッシュサイズ 43 μm のフィルタで僅かに増加した。これは、770 ~ 850 K 近傍において沈着した CsI が気相中の CsI 濃度の低下等により再蒸発し、低温側 (770 K 以下のサンプリング管及び焼結金属フィルタ) に再沈着した可能性を示している。

平成 27 年度の結果も含めて、温度勾配管の重量変化と保持時間の関係を図 2.3.11 に示す。855 K においては、保持時間とともに重量増加は減少しており、一旦沈着した化合物等が再蒸発することが分かった。773 K においては、再沈着により 120 分までは増加しつつもその後は再蒸発により重量が低下していくことが分かった。以上の結果より図 3.1.3 に示した解析結果とは異なり、加熱時間を増やすことより再蒸発が生じる温度と再蒸発量を低下させることはできたものの再蒸発自体を抑制することはできなかった。

(b) CsI+B₂O₃ 実験

電子天秤により測定した CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管及び焼結金属フィルタの加熱実験後の重量変化を図 2.3.12 及び図 2.3.13 に示す。CsI 実験と同様に 1 回目の 2173 K での CsI の加熱においてタングステン製のつぼ内に装荷した CsI の全量が蒸発し、サンプリ

ング管及び焼結金属フィルタにほぼ全量沈着していることを確認した。サンプリング管への沈着物重量も CsI 実験と同様に、620 ~ 850 K 付近で高くなり、約 770 K で最も高くなった。またフィルタへの沈着物重量は、上流側に配置されたメッシュサイズ 43 μm のフィルタで最も高くなった。

B_2O_3 を装荷して 2 回目の 2108 K での加熱後、サンプリング管への沈着物の重量は 720 ~ 850 K 付近で有意な量で変化した。770 ~ 850 K 近傍において重量が減少し、720 K 以下の温度で重量が僅かに増加するという結果となった。サンプリング管の重量変化挙動は CsI 実験とほぼ同様であり、770 K 近傍において沈着した CsI が気相中の CsI 濃度の低下や B_2O_3 蒸気種／エアロゾルとの反応により再蒸発し、低温側（770 K 以下のサンプリング管及び焼結金属フィルタ）に再沈着した可能性を示している。フィルタへの沈着物の重量は、メッシュサイズ 43 μm のフィルタで増加し、30 μm 以下のフィルタでは変化しなかった。

(3) サンプリング管、焼結金属フィルタ等への付着物中の元素量

(a) CsI 実験

ICP-MS 分析により取得した CsI 実験におけるサンプリング管及び焼結金属フィルタの沈着物中のセシウム及びヨウ素の元素量をそれぞれ図 2.3.14 及び図 2.3.15 に示す。サンプリング管への沈着物について 670 ~ 770 K でセシウムの元素量に比べヨウ素の元素量が有意に減少した。また、フィルタへの沈着物についても、メッシュサイズ 43 μm 及び 30 μm のフィルタでセシウムの元素量に比べヨウ素の元素量が有意に減少した。装置流路内の付着物中の元素量の分析結果より算出した CsI 装荷量に対する沈着物の割合を表 2.3.2 に示す。これより、サンプリング管及び焼結金属フィルタにおいて減少したヨウ素はフィルタ下流の配管内に沈着していることが分かった。

平成 27 年度においてはセシウムとヨウ素はほぼ同じ割合だったのに対して、本年度においてはセシウムの元素量に比べヨウ素の元素量が有意に減少するという結果となり、加熱時の保持時間以外は同条件である平成 27 年度の結果を再現することはできなかった。

(b) CsI+B₂O₃ 実験

ICP-MS 分析により取得した CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管及び焼結金属フィルタの沈着物中のセシウム、ヨウ素及びホウ素の元素量をそれぞれ図 2.3.16 及び図 2.3.17 に示す。サンプリング管への沈着物についてホウ素の元素量は低温側ほど増加した。セシウム及びヨウ素に関しては、720 K 付近でセシウムの元素量に比べヨウ素の元素量が有意に減少していることが分かった。一方、フィルタへは、メッシュサイズ 43 μm のフィルタにおいては、ホウ素が多く沈着し、セシウムの元素量に比べヨウ素の元素量が少なくなっていることが分かった。サンプリング管及び焼結金属フィルタにおいて減少したヨウ素は表 2.3.2 に示すようにフィルタ下流の配管内に沈着していることが分かった。

平成 27 年度においてはサンプリング管においてもセシウムに比べヨウ素が有意に減少していたのに対し、本年度においてはヨウ素の有意な減少は見られず、加熱時の保持時間以外は同条件である平成 27 年度の結果を再現することはできなかった。

(4) サンプリング管、焼結金属フィルタ等への付着物の結晶構造及び分子構造

(a) CsI 実験

X 線回折測定により得られた CsI 実験におけるサンプリング管の沈着物の X 線回折ピークを図 2.3.18 に示す。サンプリング管材料である SS に起因するピークその他、770 K 以下において CsI に起因するピークが得られた。

ラマン分光測定により得られた CsI 実験における各サンプリング管における沈着物のラマンスペクトルピーク位置を図 2.3.19 に示す。CsI に起因するピークその他、 Cr_2O_3 、 NiCr_2O_3 等、SS の酸化に起因すると考えられるピークが得られた。

以上の結果より、770 K 以下における沈着物に CsI が含まれることが分かったが、それ以外のセシウム及びヨウ素を含む化合物の生成は確認できなかった。

(b) CsI+B₂O₃ 実験

X 線回折測定により得られた CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管の沈着物の X 線回折ピークを図 2.3.20 に示す。CsI と同様にサンプリング管材料である SS に起因するピークその他、770 K 以下において CsI に起因するピークが得られた。

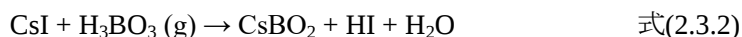
ラマン分光測定により得られた CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管の沈着物のラマンスペクトルピーク位置を図 2.3.21 に示す。CsI+B₂O₃ 実験では CsBO₂ に起因するピークは見られず、ホウ素化合物として H₃BO₃ に起因するピークが見られた。その他、 Cr_2O_3 、 NiCr_2O_3 等、SS の酸化に起因すると考えられるピークが得られた。

以上の結果より、770 K 以下における沈着物に CsI とホウ素化合物が含まれることが分かったが、それ以外のセシウム及びヨウ素を含む化合物の生成は確認できなかった。

2.3.4 まとめ

シビアアクシデント時の一次冷却系の温度範囲を再現した FP 移行挙動模擬試験装置を用いて温度勾配管中のサンプリング管、焼結金属フィルタ等に沈着した CsI 沈着物と B₂O₃ 蒸気種等の気相-固相間の高温化学反応実験を行い、反応生成物等を対象に化学分析、X 線回折、ラマン分光計測等を実施することにより、B₂O₃ の有無による沈着物性状の比較によりホウ素の影響を検討した。

平成 27 年度の実験においては、CsI の沈着物中に Cs-B-O 系化合物が生成してセシウムに対してヨウ素の元素量が低くなるという結果が得られ、気相中で生じるとされている以下の化学反応[2.3.2 - 2.3.4]が CsI 沈着物とホウ素蒸気種の気-固相間においても生じる可能性が示唆された。



これらの挙動を検証するために加熱保持時間を変えて、平成 27 年度と同様の体系にて高温化学反応実験を行ったが、CsI 実験において沈着物中のヨウ素が減少し、CsI+B₂O₃ 実験では沈着物中のヨウ素が減少しないという結果が得られ、平成 27 年度に示された傾向は再現されなかった。CsI+B₂O₃ 実験のラマン分光測定結果において Cs-B-O 系化合物が生成されていなかったこと、ホウ素の装置流路内における沈着量が少ない（平成 27 年度の約半分の元素量）ことから、CsI 沈着物と B₂O₃ 蒸気種の反応が十分に生じなかった可能性等が考えられるが、現段階においてそれらの違いの原因は不明であり、引き続きホウ素の影響を検討していく必要がある。

参考文献

- [2.3.1] Nuclear Energy Agency, “State of the Art Report on Iodine chemistry,” NEA/CSNI/R(2007)1, 2007.
- [2.3.2] K. Minato, “Thermodynamic analysis of cesium and iodine behavior in severe light water reactor accidents,” J. Nucl. Mater., 185, 154-758, 1991.
- [2.3.3] B.R. Bowsher et al., “High Temperature Studies of Simulant Fission Products: Part 4, Interaction of Cesium Iodide with Boric Acid over the Temperature Range 400 to 1000 °C,” AEEW-R 1973, 1985.
- [2.3.4] E.H.P. Cordfunke et al., “Recent Thermochemical Research on Reactor Materials and Fission Products,” J. Nucl. Mater., 167, 205-212, 1989.

表 2.3.1 加熱実験条件

		CsI 実験		CsI+B ₂ O ₃ 実験	
		1 回目	2 回目	1 回目	2 回目
試料	化合物	CsI	-	CsI	B ₂ O ₃
	装荷重量 (mg)	80	-	80	160
試料加熱	加熱温度 (K)	2173	2108	2173	2108
	昇温速度 (K/s)	3	3	3	3
	保持時間 (min)	150	60	150	60
	ガス雰囲気	Ar + 4%H ₂	Ar + 4%H ₂	Ar + 4%H ₂	Ar + 4%H ₂
	ガス流量 (L/min)	1	1	1	1
温度勾配管加熱	最高温度 (K)	1023	1023	1023	1023
	最低温度 (K)	423	423	423	423
	温度分布	線形	線形	線形	線形

表 2.3.2 元素量分析結果による初期装荷量に対する沈着割合

		CsI 実験		CsI+B ₂ O ₃ 実験	
		平成 27 年度	本年度	平成 27 年度	本年度
全保持時間		120 min	210 min	120 min	210 min
Cs	サンプリング管	0.48	0.49	0.47	0.48
	焼結金属フィルタ	0.57	0.65	0.53	0.65
	メンブレンフィルタ	0.00	0.01	0.01	0.01
	配管内	—	0.00	—	0.00
	ガス捕集瓶	0.00	0.02	0.00	0.01
I	サンプリング管	0.44	0.33	0.33	0.45
	焼結金属フィルタ	0.57	0.50	0.36	0.42
	メンブレンフィルタ	0.00	0.00	0.00	0.00
	配管内	—	0.14	—	0.08
	ガス捕集瓶	0.00	0.00	0.00	0.00

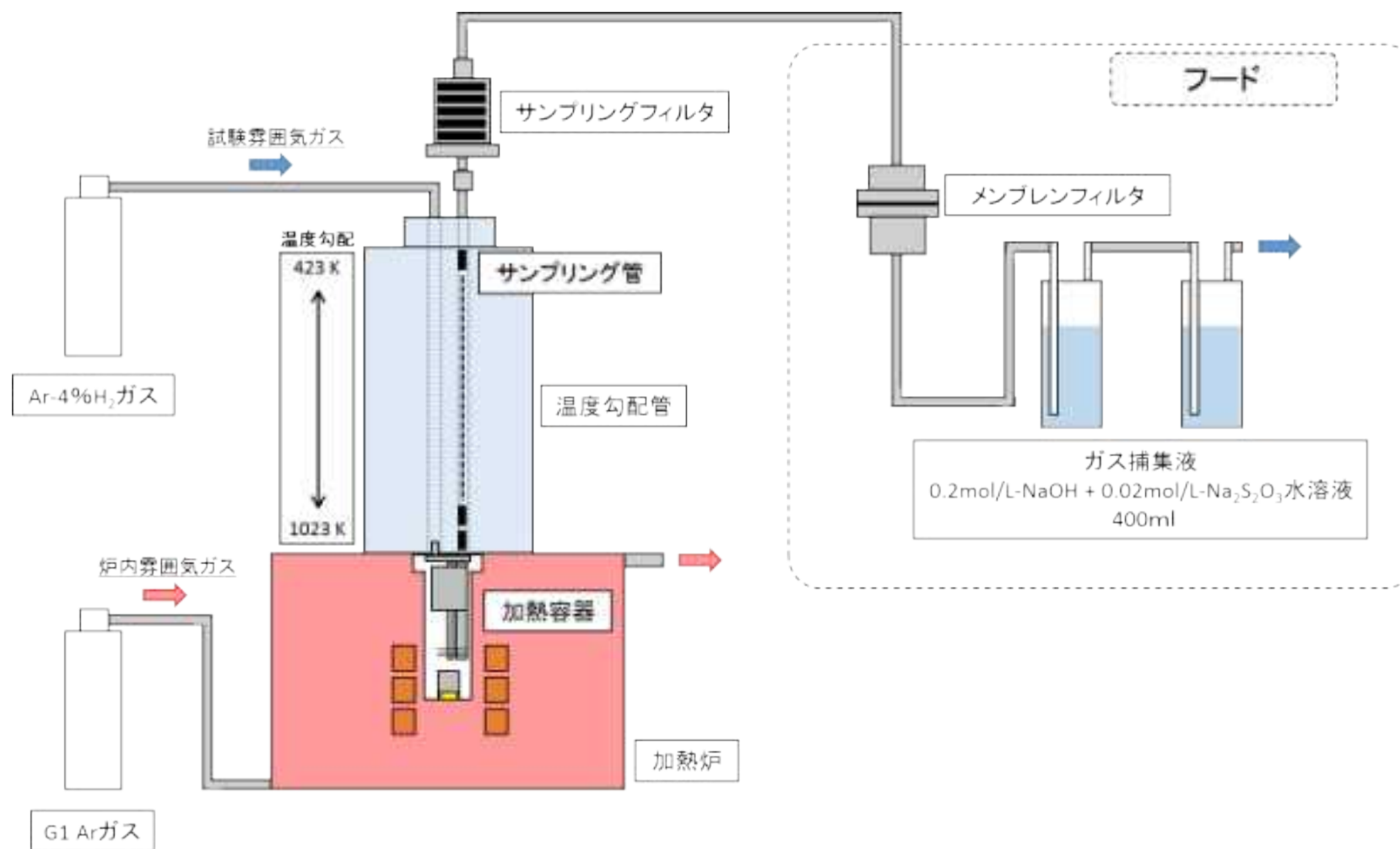


図 2.3.1 FP 移行挙動模擬試験装置模式図



図 2.3.2 FP 移行挙動模擬試験装置外観写真

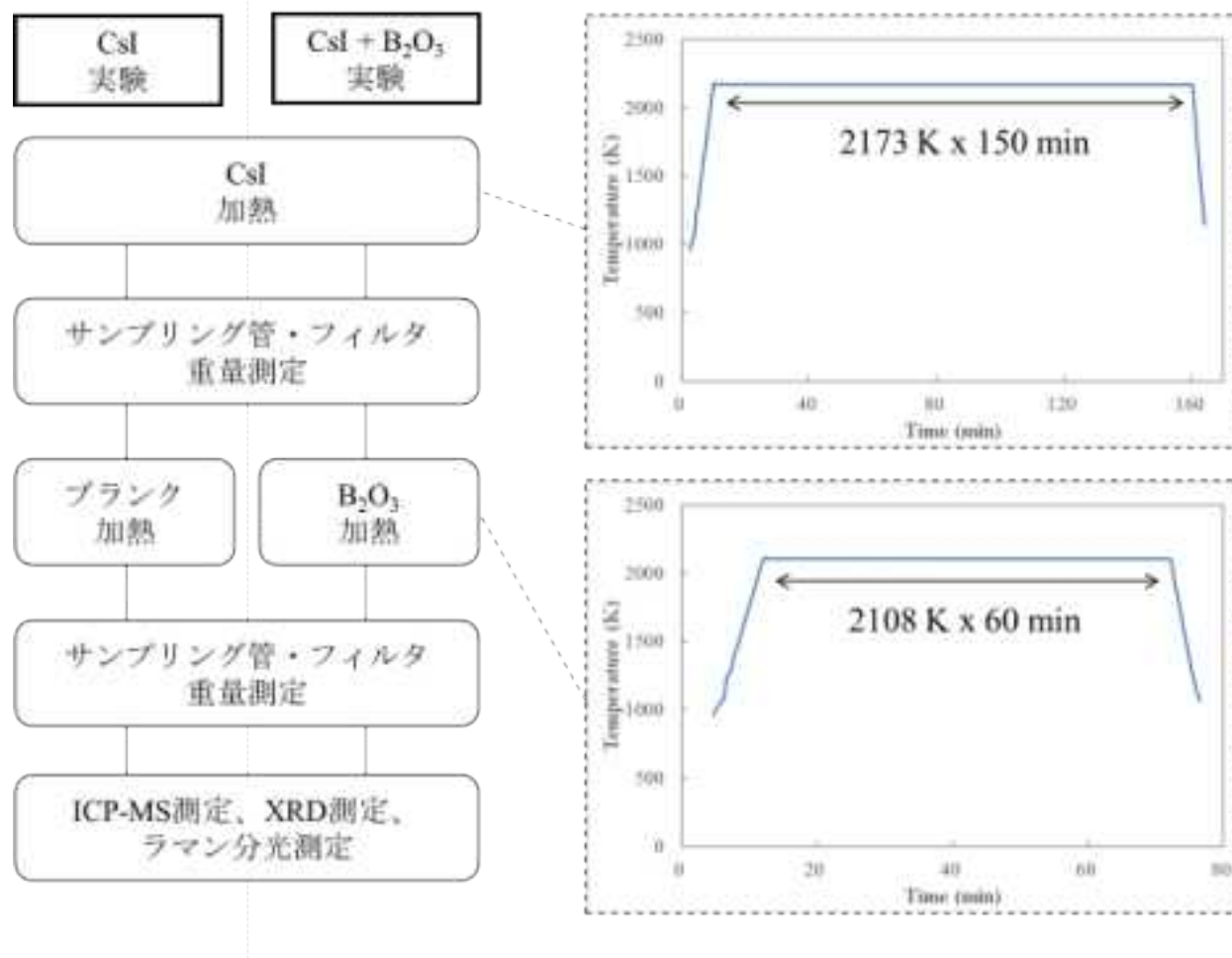


図 2.3.3 加熱実験フロー及び加熱履歴

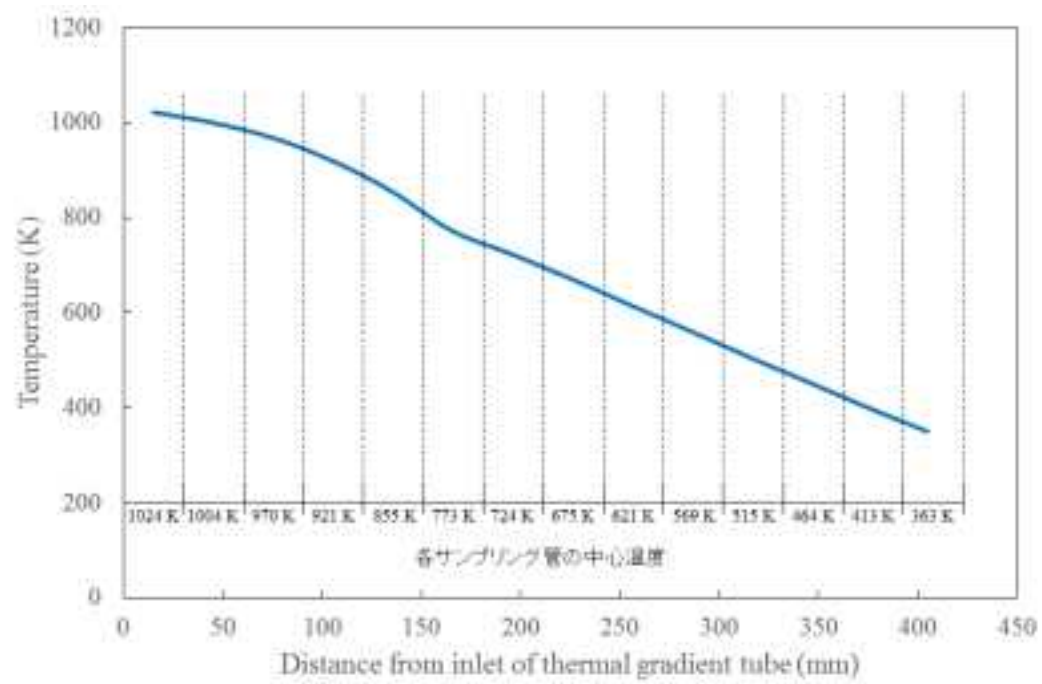


図 2.3.4 温度勾配管の温度分布

加熱試験前			
CsI実験			
	363 K	724 K	970 K
	温度勾配管温度		

図 2.3.5 CsI 実験におけるサンプリング管沈着物の外観写真

加熱実験前					
CsI加熱					
ブランク加熱					
	43 μm	30 μm	10 μm	5 μm	1 μm
	フィルタ メッシュ寸法				

図 2.3.6 CsI 実験における焼結金属フィルタ沈着物の外観写真

加熱試験前			
CsI+B ₂ O ₃ 実験			
	363 K	724 K	970 K
	温度勾配管温度		

図 2.3.7 CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管沈着物の外観写真

加熱実験前					
CsI加熱					
B ₂ O ₃ 加熱					
	43μm	30μm	10μm	5μm	1μm
	フィルタ メッシュ寸法				

図 2.3.8 CsI+B₂O₃ 実験における焼結金属フィルタ沈着物の外観写真

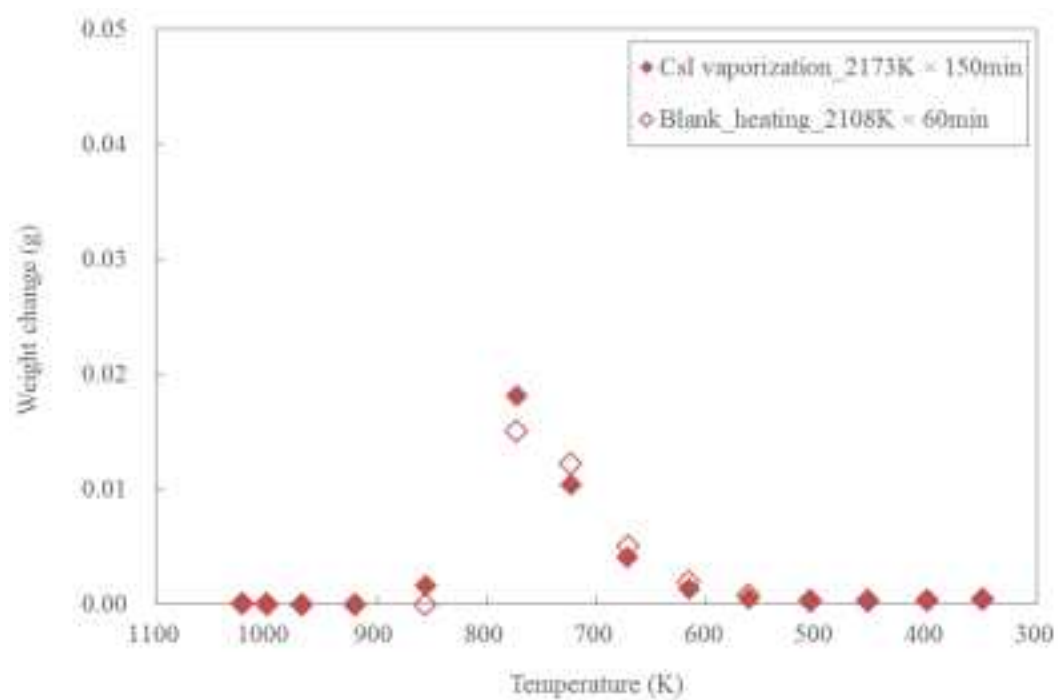


図 2.3.9 CsI 実験におけるサンプリング管の重量変化（変動係数 CV 値：0.004%）

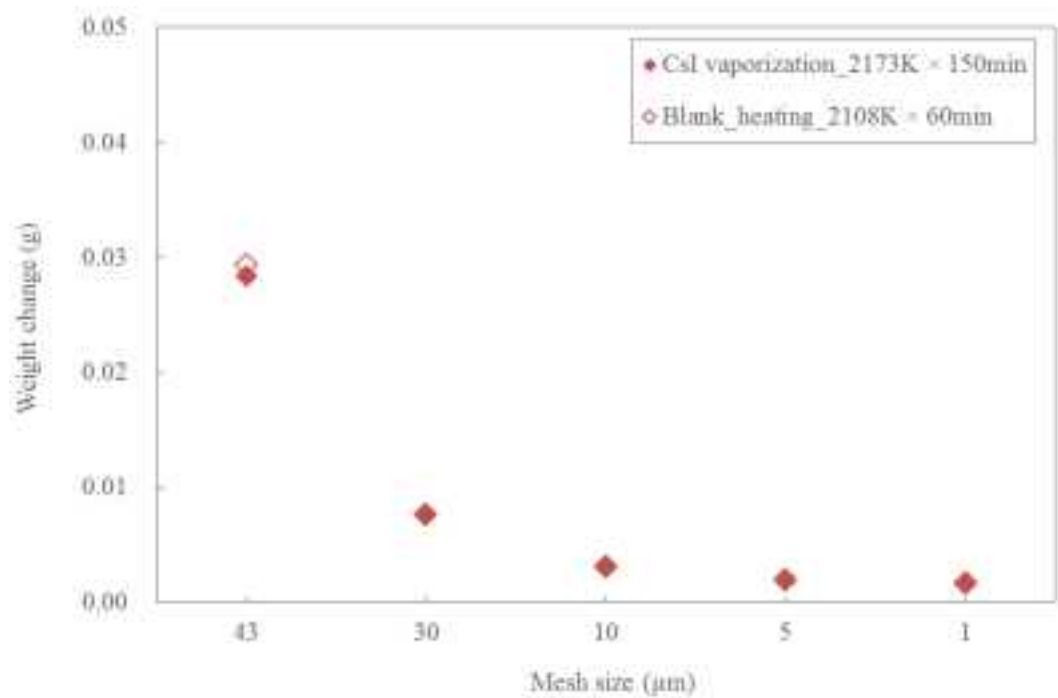


図 2.3.10 CsI 実験における焼結金属フィルタの重量変化（変動係数 CV 値：0.004%）

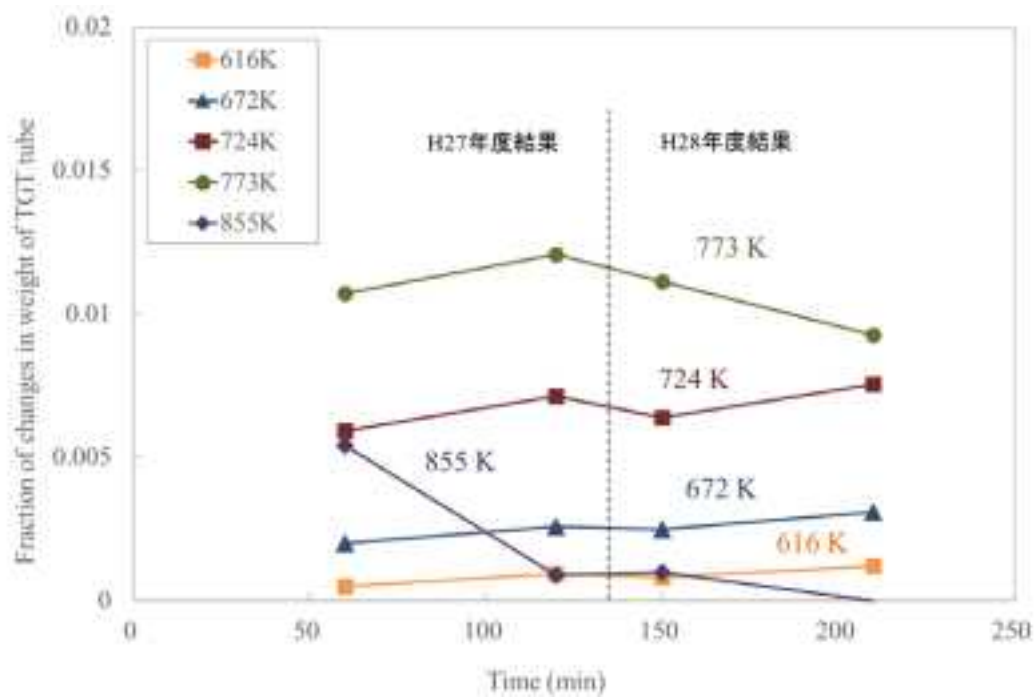


図 2.3.11 CsI 実験における各温度でのサンプリング管の重量変化
(変動係数 CV 値 : 0.004%)

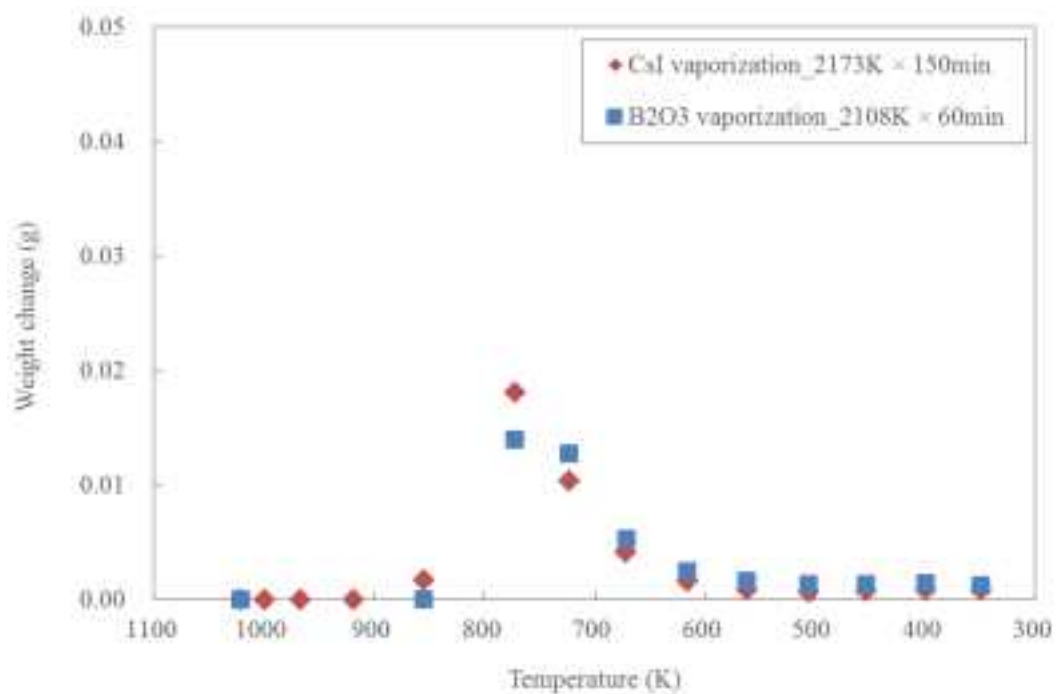


図 2.3.12 CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管の重量変化 (変動係数 CV 値 : 0.004%)

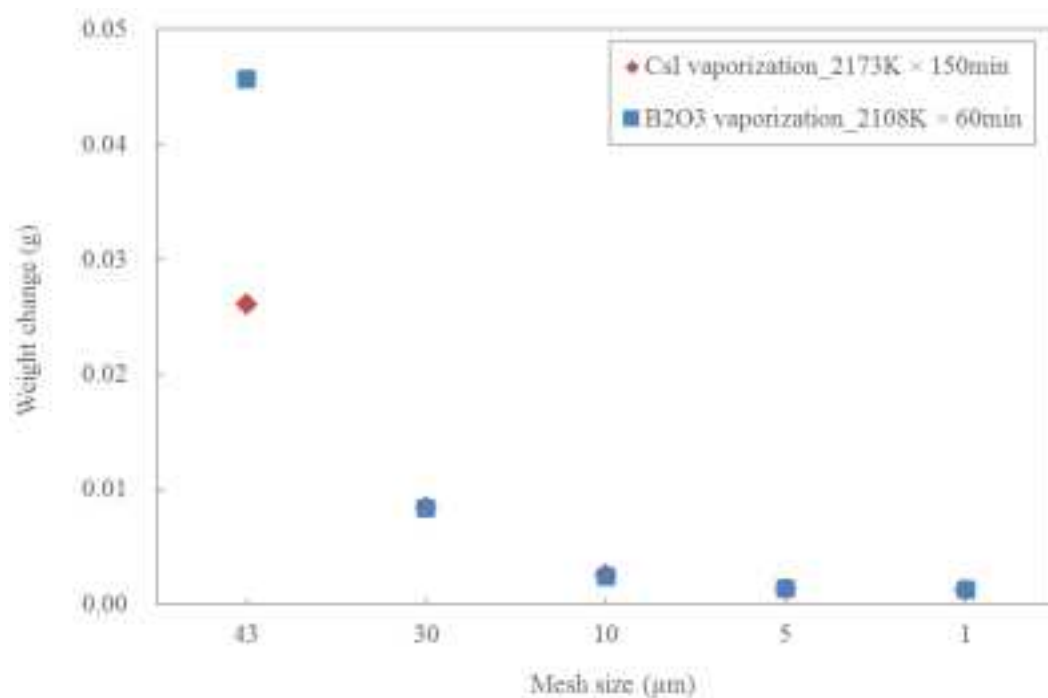


図 2.3.13 CsI+B₂O₃ 実験における焼結金属フィルタの重量変化（変動係数 CV 値：0.004%）

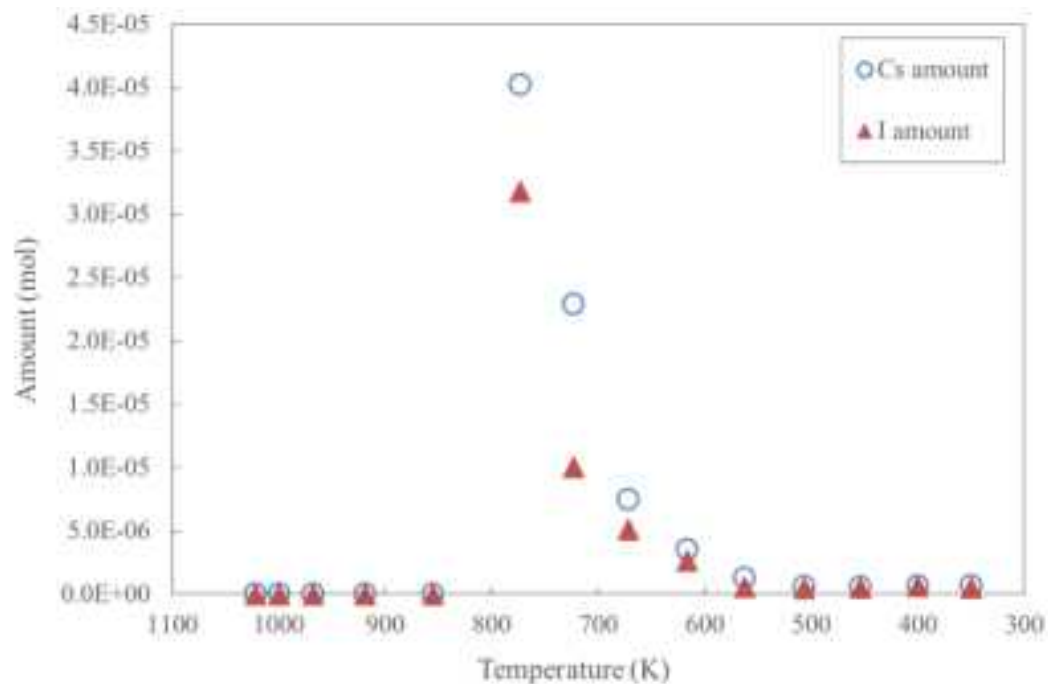


図 2.3.14 CsI 実験におけるサンプリング管沈着物中のセシウム及びヨウ素の元素量（変動計数 CV 値：Cs-133 1.2%、I-127 3.5%）

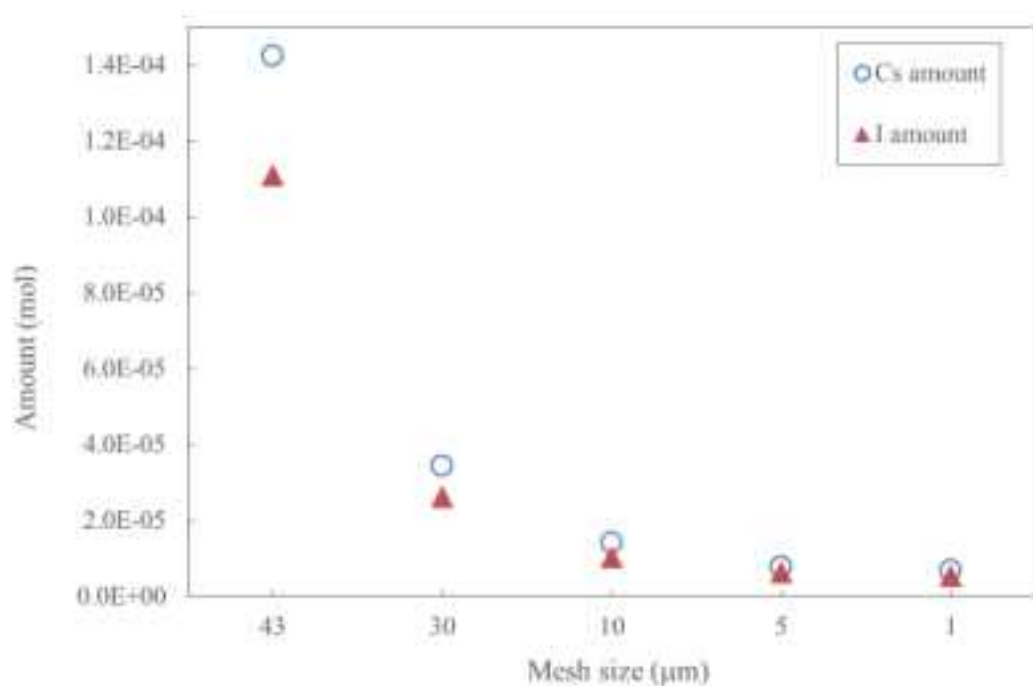


図 2.3.15 CsI 実験における焼結金属フィルタ沈着物中のセシウム及びヨウ素の元素量
(変動計数 CV 値 : Cs-133 1.2%、I-127 3.5%)

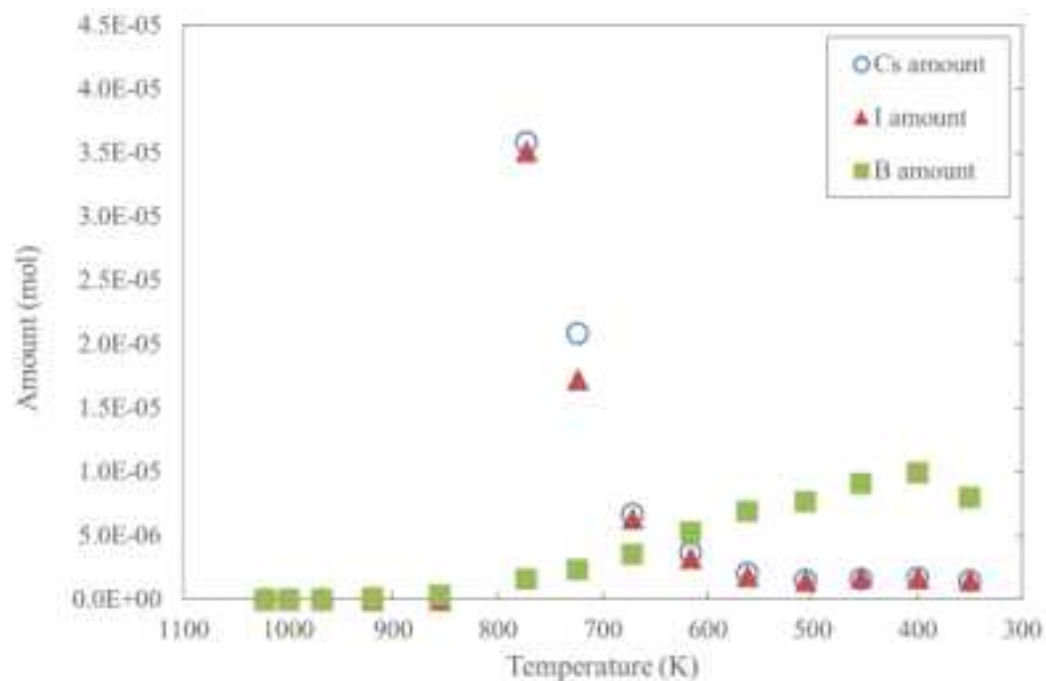


図 2.3.16 CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管沈着物中のセシウム、ヨウ素及びホウ素の
元素量 (変動計数 CV 値 : Cs-133 1.2%、I-127 3.5%、B-10 1.4%、B-11 2.0%)

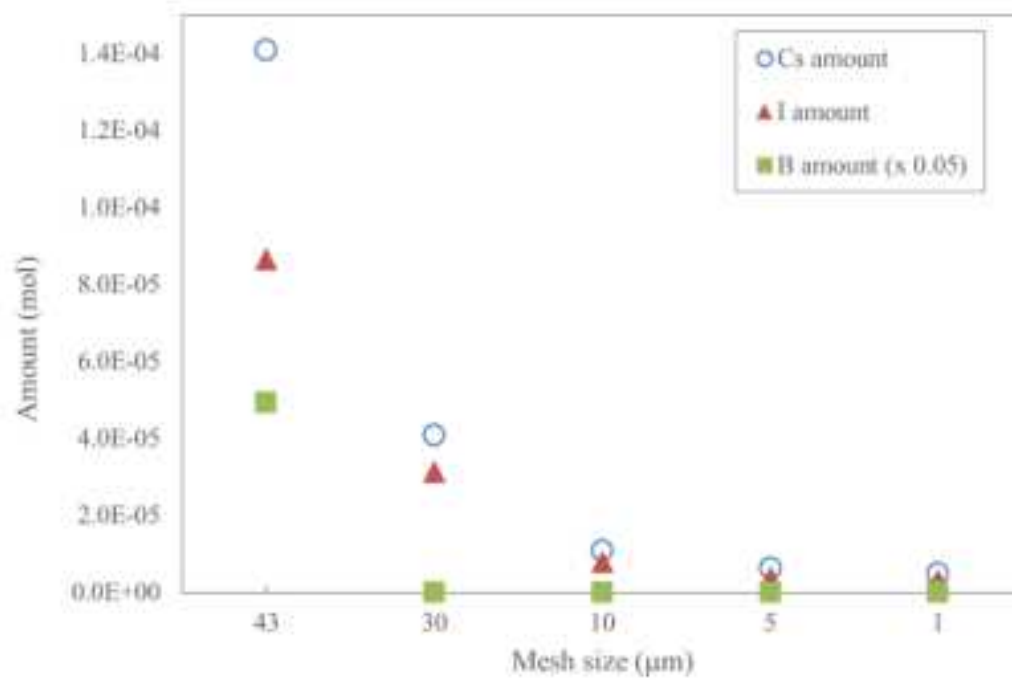


図 2.3.17 CsI+B₂O₃ 実験における焼結金属フィルタ沈着物中のセシウム、ヨウ素及びホウ素の元素量（変動計数 CV 値：Cs-133 1.2%、I-127 3.5%、B-10 1.4%、B-11 2.0%）

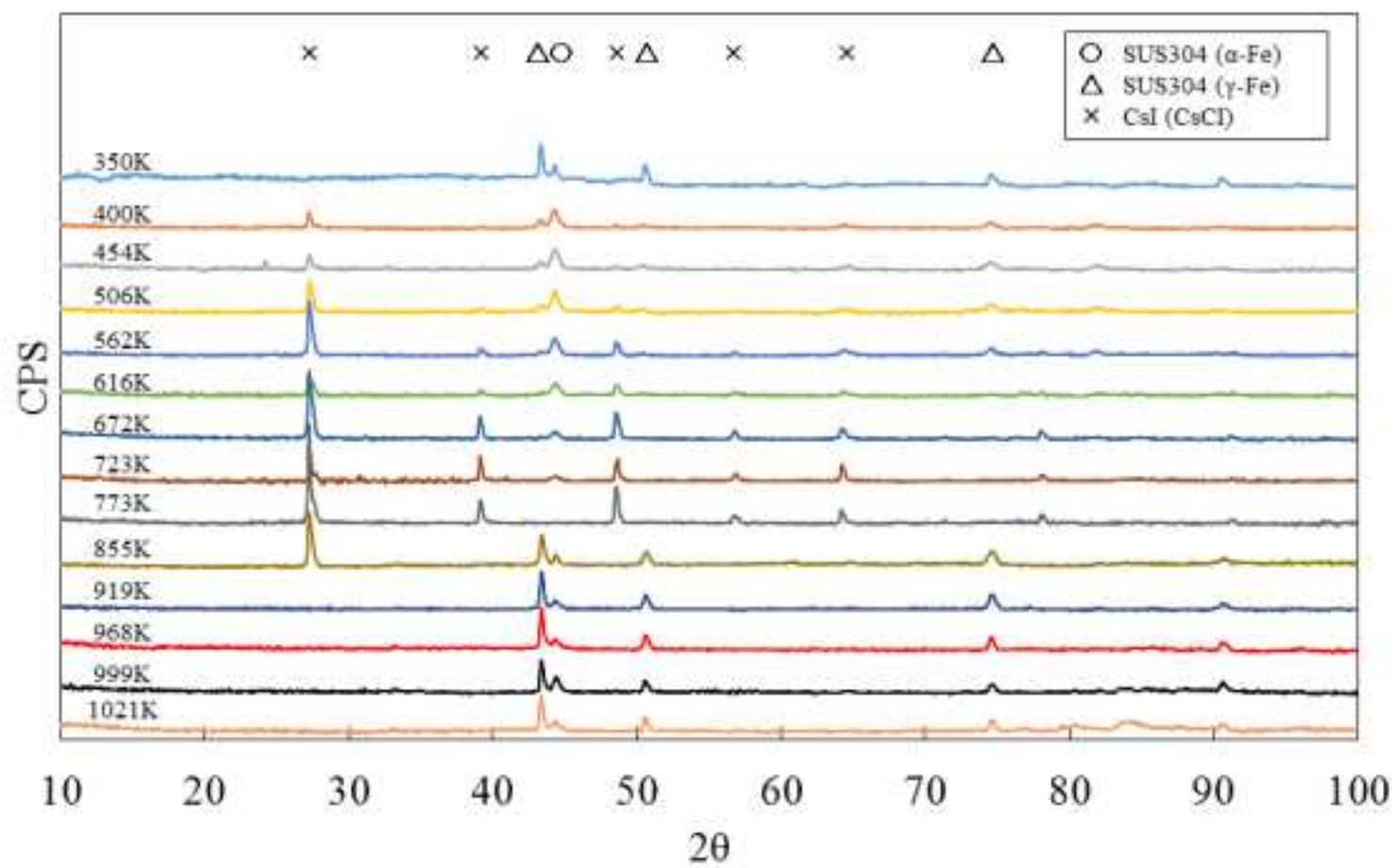


図 2.3.18 CsI 実験におけるサンプリング管沈着物の X 線回折ピーク

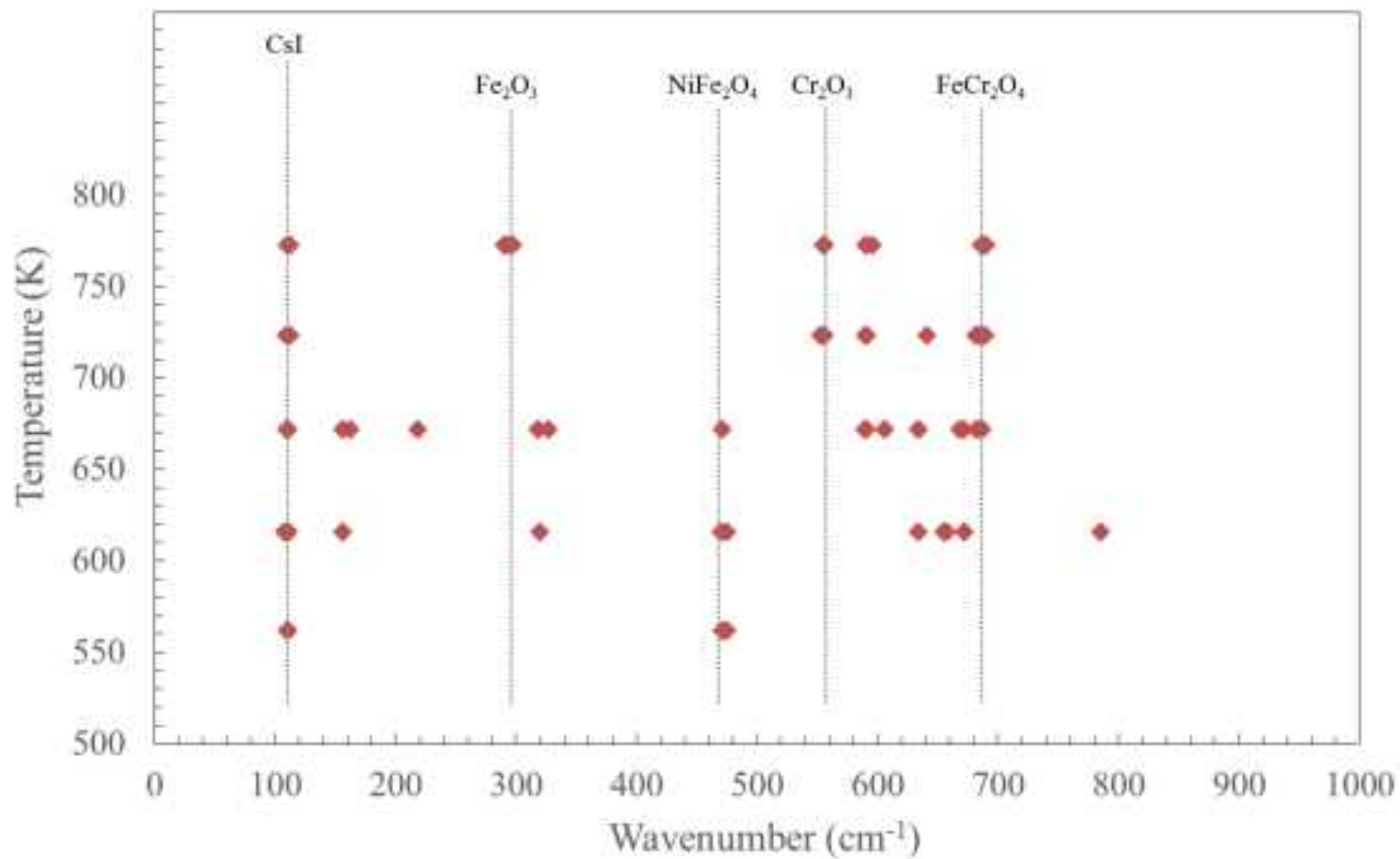


図 2.3.19 CsI 実験におけるサンプリング管沈着物のラマンスペクトルピーク位置

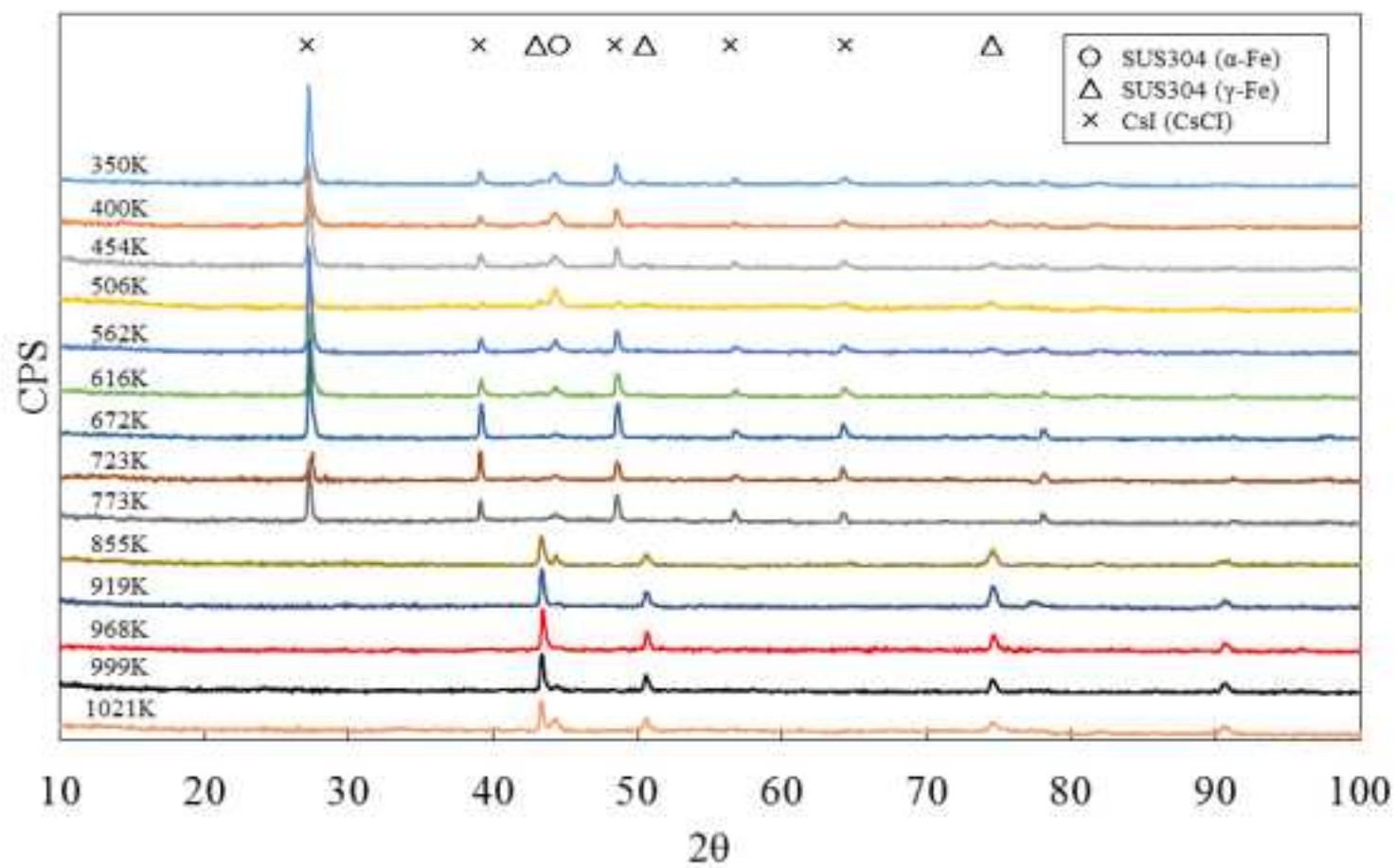


図 2.3.20 CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管沈着物の X 線回折ピーク

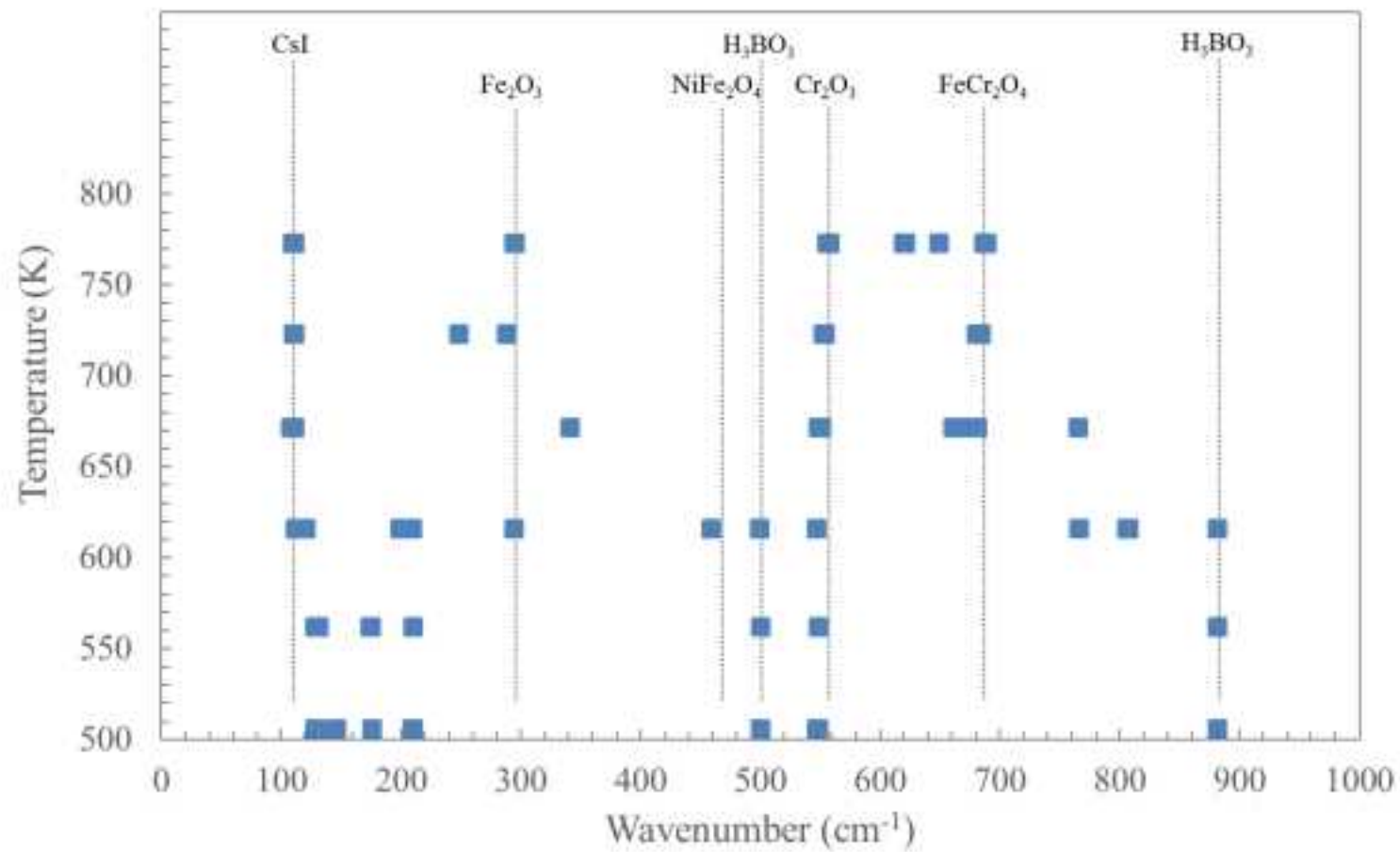


図 2.3.21 CsI+B₂O₃ 実験におけるサンプリング管沈着物のラマンスペクトルピーク位置

3. FP 化学及び移行に係わる解析

3.1 AGF におけるコールド実験の解析

3.1.1 目的

平成27年度に実施されたCsI+B₂O₃実験を対象に熱力学平衡計算手法を用いた数値解析を実施し、熱力学平衡計算によるFP移行挙動に関する予測性能の妥当性評価を行った。解析にはサンディア国立研究所で開発されたVICTORIA2.0コード[3.1.1]を用いた。

3.1.2 CsI+B₂O₃ 実験における解析条件

解析では、熱力学平衡計算による化学的な相互作用を考慮可能なVICTORIA2.0コードを用いた。なお本熱力学平衡計算に使用する各化合物のギブズ自由エネルギーは、平成27年度の事業である商用熱力学データベースSSUB4 (SGTE Substances Database) [3.1.3]に基づくデータベース更新を反映させたものである。

解析体系は、実試験装置のるつぼから温度勾配管の末端までを全18分割した(図3.1.1(a))。各装置の分割数は、加熱炉を4分割(るつぼを含む)、温度勾配管を12分割、環境ボリュームを1分割とした。沈着物の詳細な化学分析が行われた温度勾配管に関しては、温度勾配の実測値を近似できるよう細分化している。各分割ボリュームの構造材は不活性素材と仮定し、CsIおよびB₂O₃の化学的な相互作用のみに注目した。また各ボリュームは、気体温度に支配されるバルク層と構造材温度をもつ構造物境界層から構成されている。

各ボリューム内の構造材温度は、実験と同様の値を用いた。また、各ボリュームの雰囲気温度及び流速は、実験より得られた構造材温度とキャリアガス流量を用いた簡易的な熱伝達計算(層流を仮定、Nu=3.66)により決定した。キャリアガス流量は、1.0 L/minの4% H₂を含むアルゴンガスとした。また、実験で使用したガス純度(G1規格)に合わせて不純物である0.1 vol.ppm O₂も考慮した。VICTORIA2.0内のその他解析パラメータは、エアロゾル粒径50 nm~50 μm (13分割)、解析のタイムステップ 3.2×10^{-3} sとした。

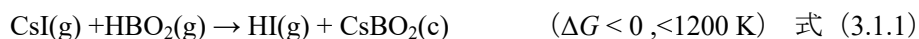
解析で模擬した試験手順に関する温度履歴を図3.1.1(b)に示す。試験手順は、CsI蒸発及び沈着に寄与する期間AとB₂O₃の蒸発及び沈着CsIとの相互作用に寄与する期間Bの2期間で構成される。期間Aでは、るつぼボリュームの温度を2173 Kまで昇温(3.0 K/s)し、60分間温度を保持した。この際、CsI蒸発速度に関する実験相関式[3.1.4]を参考に算出した蒸発量に相当するガス状CsI量をるつぼボリュームに導入し、るつぼからのCsI蒸発を模擬した。最終的なCsI総量は、実験と同様の80 mgである。また期間Bでは、期間Aと同様の昇温操作(3.0 K/s)を行い、2108 Kに到達後60分間温度を保持した。なお、期間BでのB₂O₃蒸発は、類似条件での蒸発速度に関するデータが不足していたため、VICTORIA2.0解析内の熱力学平衡計算により決定した。VICTORIA2.0解析でのB₂O₃蒸発現象の模擬にあたっては、流動のないるつぼボリュームにB₂O₃のエアロゾルのみを注入し、その全量を構造材表面へ沈着させた後、加熱により徐々に蒸発させる手法をとった。

3.1.3 CsI+B₂O₃ 実験に関する VICTORIA2.0 解析結果

図 3.1.2 に CsI 蒸発/沈着に関する期間 A での各装置部位におけるセシウム及びホウ素物質量の経時変化を示した。セシウム元素に関して、CsI 蒸発に伴う加熱炉および環境ボリュウムでのセシウム物質量の増加がみられた。また、期間 A 初期における加熱炉でのセシウム物質量の増加は一時的であり、40 分後にはほぼ全てのセシウムが下流ボリュウムへと移行した。これは、CsI の比較的高い蒸気圧により、構造材壁面へ凝縮した CsI がアルゴンガス中へ再蒸発し下流へ移行するためである。ホウ素は、約 1800 K 以上でその蒸発が顕著となり、加熱炉や温度勾配管への沈着が見られた。しかしながら、セシウムのような装置内部でのゆっくりとした下流への移行は確認されなかった。これは、B₂O₃ の蒸気圧が比較的低く、構造物上のホウ素凝縮物からアルゴンガス中への再蒸発がほとんどないためだと考えられる。

温度勾配管内でのセシウム沈着量の経時変化を図 3.1.3 に示す。図 3.1.2 (a) に示した装置内セシウム移行挙動と同様に、温度勾配管内上流のボリュウム（壁面温度 908 K）から沈着し始め、徐々に下流の低温ボリュウムへと沈着ピークが移行した（861→815→769 K）。また B₂O₃ 蒸発時（期間 B）では、815 K の温度勾配管ボリュウムでの沈着セシウムが再蒸発した。一方で、セシウムの蒸発挙動に関する本年度の実験結果では、約 120 分まで 855 K ボリュウムでの沈着物が緩やかに蒸発することが示されている（図 2.3.11）。したがって、本解析では温度勾配管でのセシウム移行速度を過大評価する傾向にあることが明らかになった。VICTORIA2.0 における構造物上での凝縮/蒸発は、構造材温度で支配される構造物境界層での各化学種の気液平衡により決定される。そのため、構造物境界層の厚さ（体積）が蒸発/凝縮量を決定する重要な因子であり、セシウム移行速度に影響を及ぼしたと考えられる。

解析および実試験で得られた各元素の温度勾配管内沈着分布およびそれら化学種を図 3.1.4 に示す。セシウム元素に関する VICTORIA2.0 解析結果は、実験で得られた約 800 K での沈着ピークと定量的な一致が見られた。また、この沈着ピークは CsI に由来するものであることから（図 3.1.4 (d)）、実験でのセシウム移行挙動を精度よく再現できることが示された。しかしながら、図 3.1.4(b)に示す通り解析結果では沈着物中の I/Cs 比がほぼ 1 であり、実験で見られたホウ素による沈着物からのヨウ素離脱促進現象は再現されなかった。これは、VICTORIA2.0 解析において期間 A で温度勾配管内へ沈着した CsI がホウ素化学種とほとんど相互作用を示さなかったためである。また、VICTORIA2.0 解析では少量の CsBO₂ 沈着物の生成（図 3.1.4 (d)）と等量の気体状 HI 化学種の装置系外への移行が示されており、下記化学反応の進行が考えられる。



式 (3.1.1) に示した通り本反応では、CsI からのヨウ素離脱とともに等量の CsBO₂ が生成される。しかしながら、実験結果では沈着物中の I/Cs 比が減少したボリュームでの I/Cs 比減少量に相当するホウ素の沈着は確認されていない。

またホウ素についても実験結果との定性的な沈着傾向の一致は見られなかった。本解析では、装置内の高温領域に多くのホウ素が B₂O₃ 化学種として沈着した。

2.3 節に示した本年度のコールド実験では、沈着物中の有意な I/Cs 比減少が確認されておらず、CsI からのヨウ素離脱現象に対する何らかのパラメータの存在が懸念されている。そのため、ホウ素による CsI からの離脱促進現象については、今後の実験結果に留意した機構解明および移行挙動評価機能の高度化に慎重に取り組む必要があると考えられる。特に VICTORIA2.0 解析によるホウ素移行の過小評価は、平成 27 年度及び本年度の 2 回のコールド実験に対して確認されており、ホウ素移行挙動評価の高度化は優先度が高いと考えられる。

参考文献

- [3.1.1] N. E. Bixler, "VICTORIA2.0, A Mechanical Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions," NUREG/CR-6131, 1998.
- [3.1.2] M. Uchida and H. Saito, "HORN: A computer code to analyze the gas-phase transport of fission products in reactor cooling system under severe accidents," JAERI-M 86-158, 1986.
- [3.1.3] Thermo-Calc Software, SSUB SGTE Substances Database version 4 (Accessed 1 Apr. 2014).
- [3.1.4] I. Sato et al., "Influence of boron vapor on transport behavior of deposited CsI during heating test simulating a BWR severe accident condition," J. Nucl. Mater. 461, 22-28, 2015.

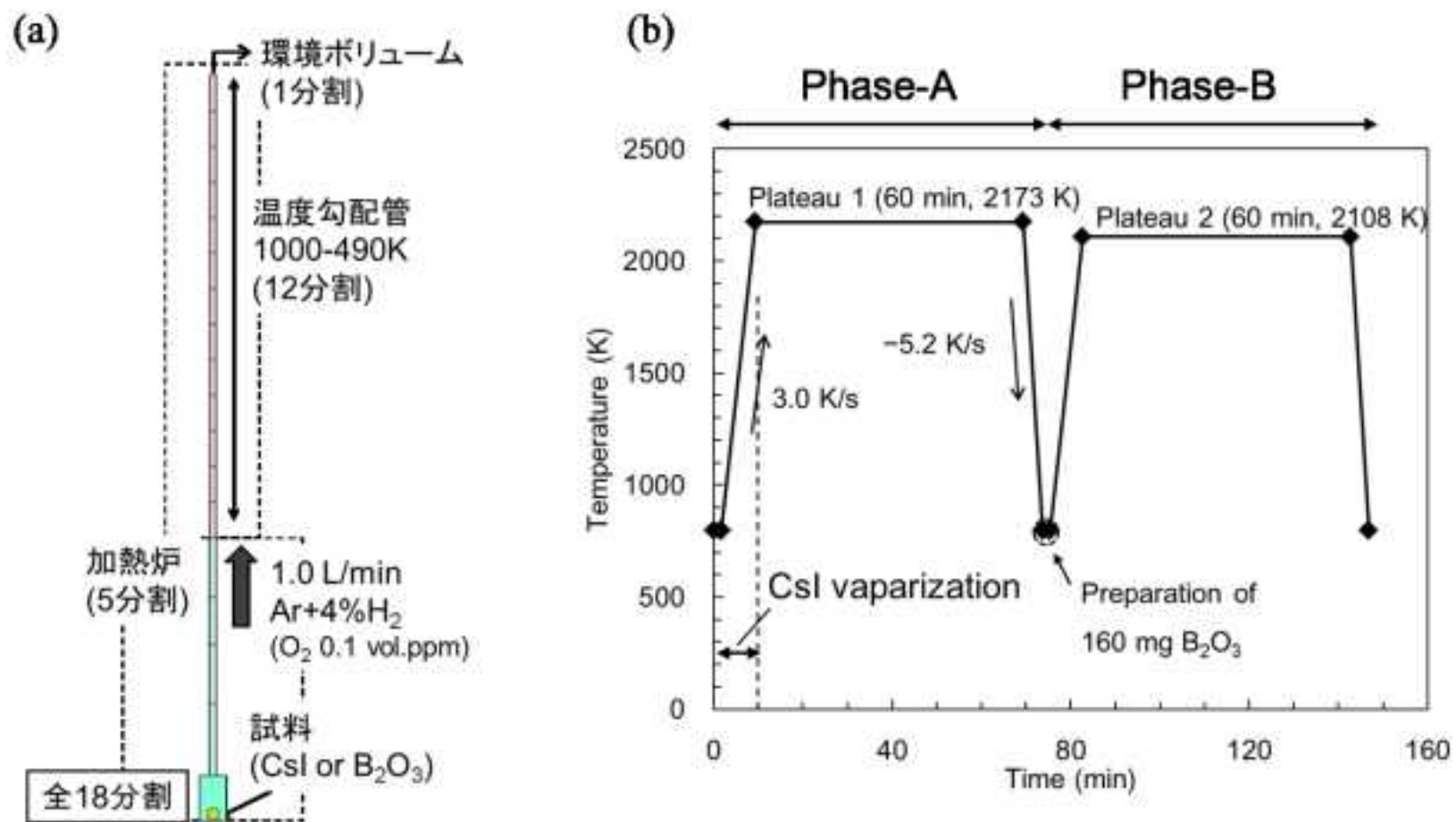


図 3.1.1 VICTORIA2.0 解析における装置体系 (a) および試験過程 (b)

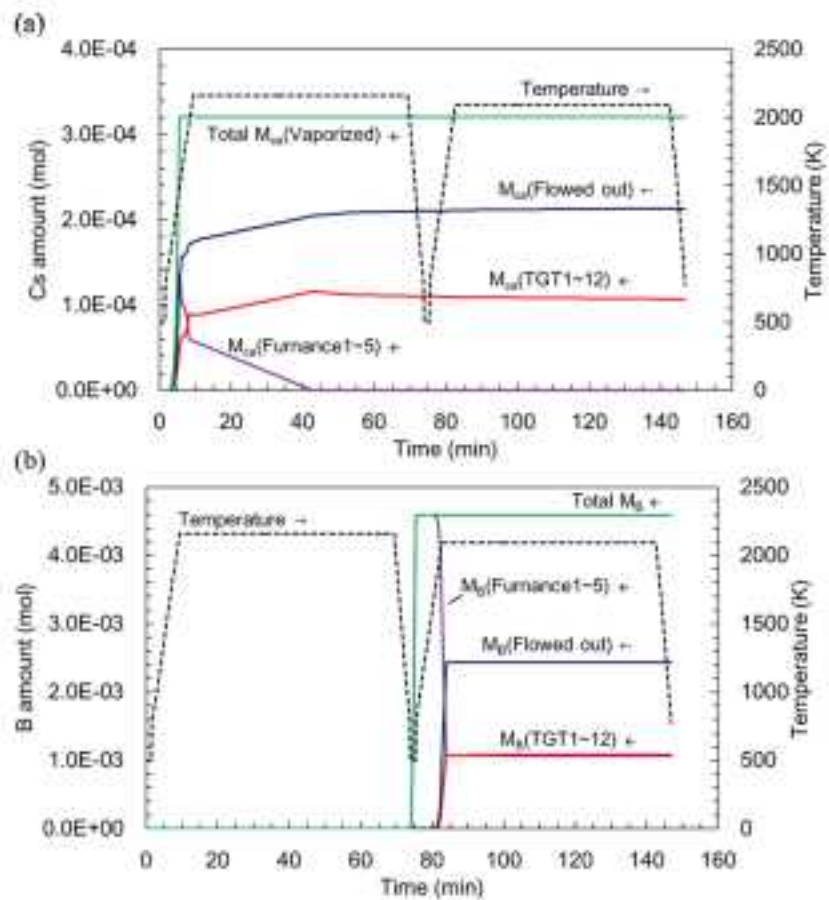


図 3.1.2 各装置部位におけるセシウム (a) およびホウ素 (b) 重量の経時変化

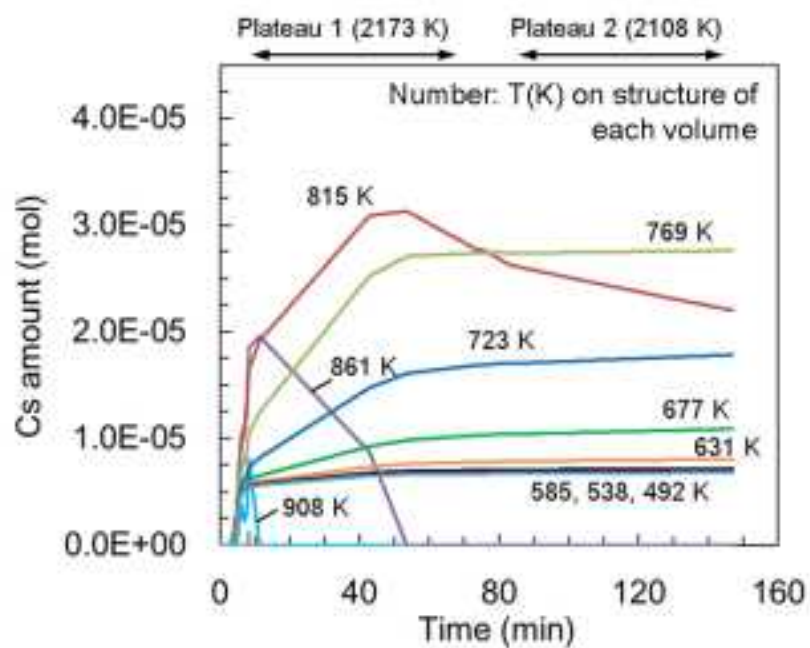


図 3.1.3 温度勾配管の各温度域でのセシウム重量の経時変化

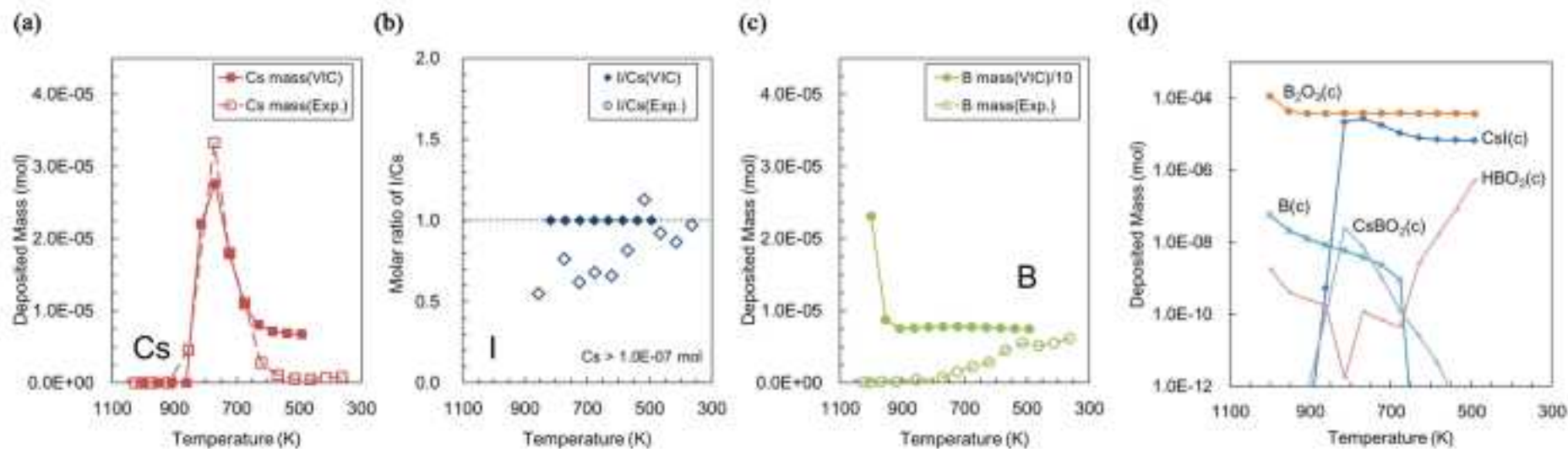


図 3.1.4 解析終了時での温度勾配管内のセシウム物質質量 (a)、I/Cs モル比 (b)、ホウ素物質質量 (c)、沈着した各化学種重量 (d)

3.2 熱力学平衡計算機能を有する数値解析コードの比較検討

熱力学平衡計算機能を有する VICTORIA2.0 コード[3.2.1]および原子力機構が開発した HORN コード[3.2.2]の比較検討を行った。本解析では、HORN コードと VICTORIA2.0 コードの熱力学データベースを同等とし、データベース依存性を排除した。なお、VICTORIA2.0 コードは、3.1.2 および 3.1.3 項と同様に商用熱力学データベース SSUB4 に基づいた更新を実施したものである。比較検討に使用した解析ケースは、平成 27 年度に実施した VICTORIA2.0 コード内熱力学データベース更新における検証計算（実施項目 4.1.3）と同様の条件とした。対象とする系は、Cs-I-Mo-B-C-H-O 系である（モル比 1.85 : 0.15 : 1.14 : 331 : 151 : 2.34 : 0.583）。

セシウム化学種に関する各コードの解析結果を図 3.2.1 に示す。なお、図 3.2.1 には、参考データとして同条件での ThermoCalc コード（SSUB4）[3.2.3, 3.2.4]による解析結果も記載した。全てのコードにおいて、低温で安定な $\text{Cs}_2\text{MoO}_4(\text{c})$ および高温で安定な $\text{CsBO}_2(\text{g})$ 化学種が確認されており、セシウム化学種の温度依存の定性的な一致が見られた。特に、HORN コードおよび ThermoCalc コードでは、定量的な傾向も一致した。しかしながら、VICTORIA2.0 コードの解析結果は、同一のデータベースを使用しているにも関わらず評価値が数 10%程度異なった。したがって、同一データベースを用いた解析でも、コード内での平衡計算の取り扱い方法で数 10%程度の差異を生じさせる可能性がある。実際に、HORN および ThermoCalc コードでは、純粋に系のギブズエネルギーを最小化するのに対し、VICTORIA コードでは平衡定数を用い系内の化学種変化を収束させている。

参考文献

- [3.2.1] N. E. Bixler, "VICTORIA2.0, A Mechanical Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions," NUREG/CR-6131, 1998.
- [3.2.2] M. Uchida and H. Saito, "HORN: A computer code to analyze the gas-phase transport of fission products in reactor cooling system under severe accidents," JAERI-M 86-158, 1986.
- [3.2.3] Thermo-Calc Software, SSUB SGTE Substances Database version 4 (Accessed 1 Apr. 2014).
- [3.2.4] B. Sundman, B. Jansson and J.-O. Andersson, "The Thermo-Calc databank system," CALPHAD 9, 153-190, 1985.

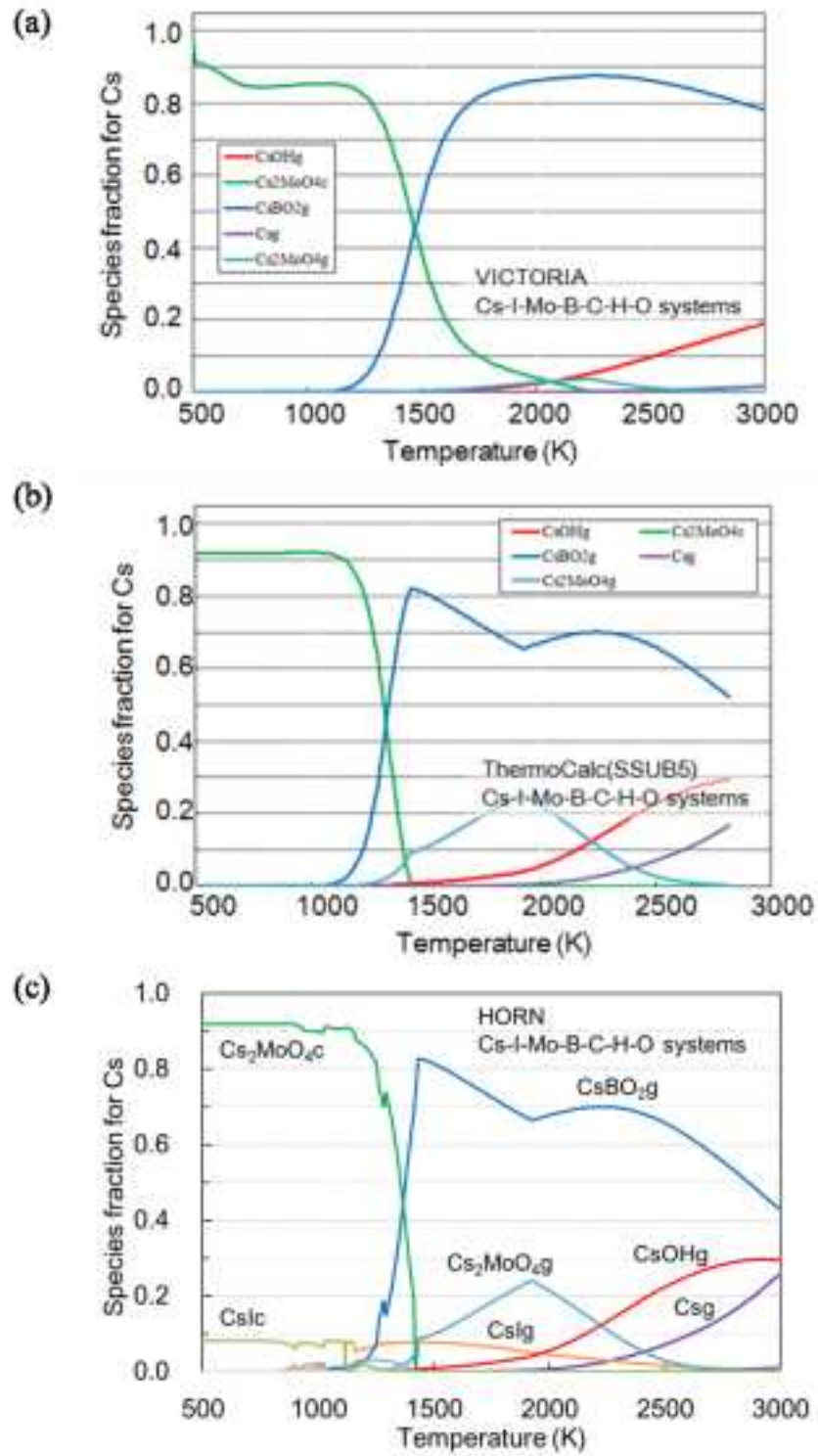


図3.2.1 各熱力学平衡計算コードによるCs-I-Mo-B-C-H-O系でのセシウム化学種に関する温度依存性 (a) VICTORIA2.0 コード、(b) ThermoCalc コード、(c) HORN コード

3.3 雰囲気条件が FP 化学及び FP 挙動に与える影響

3.3.1 目的

VERDON-5 実験に対する数値解析に先立ち、VERDON-2 実験の VICTORIA2.0 コード [3.3.1]による数値解析を行うと共に熱力学平衡手法の妥当性評価を行った。VERDON-2 実験は、ホウ素を含まない水蒸気雰囲気の FP 移行挙動試験であり、VERDON-5 実験と類似の温度履歴が用いられている。

3.3.2 解析条件

解析に用いた装置体系を図 3.3.1 に示す。上流より加熱炉を 1 分割、700℃加熱部位を 1 分割、温度勾配管を 16 分割した。ここで、解析上で仮定した温度勾配管は、系の単純化のため実装置体系での 2 系統温度勾配管を 1 配管で模擬した[3.3.2]。また実装置体系と同様の軸方向を設定し、重力沈降の影響を考慮した。700℃加熱部位では VICTORIA2.0 コード内の 90° 曲管オプションを設定し、慣性沈着を考慮した。また FP—構造材の相互作用を含めた FP 移行挙動評価のために、温度勾配管の構造材を Inconel-600 と仮定した。Inconel-600 の組成は、77%ニッケル、16%クロム、7%鉄であり、反応に寄与し得る構造材深さを 5 nm とした。本構造材の相互作用は、構造物との境界層における熱力学平衡計算により評価される。

各構造材温度は、実験データを参考に決定した。また、加熱炉での構造材温度は、各試験過程での昇温/加熱操作に対応して変化するが、その他装置部位の構造材温度は、解析中常に一定とした。各ボリュームでの気体温度および流速は、3.1 節の AGF におけるコールド実験解析と同様に、層流を仮定した簡易熱伝達計算により決定した。

VICTORIA2.0 解析における試験過程[3.3.2]を図 3.3.2 に示す。試験過程は、VERDON-2 実験での温度勾配管 1 (Tube 1) への沈着へ寄与する phase-1～phase-3 を対象とした。各 phase では、主に加熱炉の雰囲気温度と雰囲気条件が異なる。Phase-1、2、3 では、それぞれヘリウムガスを用いた不活性雰囲気（約 550℃）、水蒸気雰囲気（550～1100℃）および不活性雰囲気（1100～1350℃）である。また、phase-2 での燃料被覆管の酸化による H₂ 生成も考慮した。

燃料からの FP 放出傾向は、VERDON 実験より得られたオンラインでのガンマ線測定結果を参考に各 FP の放出速度を決定した。VICTORIA2.0 コードでは、燃料中での拡散モデルを基に燃料からの FP 放出速度を計算可能であるが、本解析では、主に FP の化学的な挙動に注目するために FP 放出速度は入力値として与えている。なお、本解析で対象とする FP は、phase-1～3 での放出量が顕著なセシウム、ヨウ素、モリブデン、バリウムである。各 FP の放出傾向を図 3.3.3 に示した。解析時間での約 3500～10000 秒に該当する Phase-2 では、高揮発性 FP であるセシウム、中揮発性 FP であるモリブデンが放出される。Phase-3 では、高揮発性 FP の燃料からの放出が継続し、中・低揮発性 FP の放出が開始される。

3.3.3 VERDON-2 実験の解析結果

各装置部位における各 FP 重量の経時変化を図 3.3.4 に示す。セシウムは、放出が開始される約 7000 秒から約 9000 秒の期間とそれ以降で移行挙動が大きく異なる。燃料から放出

されたセシウムは、約 9000 秒まで主に温度勾配管に沈着するが、それ以降では、温度勾配管に加えて、700℃加熱炉部位への沈着や温度勾配管外への移行が増加した。またヨウ素は、phase-2 が終了する(約 10000 秒)まで、温度勾配管への沈着と装置系外への移行が生じた。約 10000 秒以降では、phase-2 で温度勾配管に沈着したヨウ素が減少し、装置系外への移行が増大した。一方、モリブデンは、約 9000 秒での放出開始から解析終了まで移行傾向の変化は見られず、温度勾配管や 700℃加熱部位、装置系外での物質量が単調に増加した。またバリウムの移行挙動は、高温ボリュームである加熱炉内での沈着が最も多く、下流ボリュームへの移行に伴って沈着量が減少した。

図 3.3.5 に本解析および実験で得られた温度勾配管内の FP 沈着傾向を示す。本解析では、約 700℃以上での温度勾配管位置でセシウムおよびモリブデンに由来する沈着ピークが見られた。さらにセシウムに関しては、約 350℃でも沈着ピークが生じた。また、ヨウ素は約 500℃の温度勾配管で沈着することが示された。本解析で対象とした温度勾配管 Tube-1 の実験での沈着傾向を図 3.3.5 (b、c) 内の青線で示した。実験結果との比較において、VICTORIA2.0 解析でのセシウム沈着分布は、約 300℃以上の領域で定性的に一致した。一方で、ヨウ素に関しては、VICTORIA2.0 による解析は、実験での沈着ピーク位置よりも上流(高温側)で多く沈着する結果となった。

セシウム元素の温度勾配管内の沈着傾向の経時変化および主要な温度勾配管ボリュームでの沈着物化学種を図 3.3.6 に示す。図 3.3.6 (a) は、各 phase 終了時の温度勾配管内のセシウム沈着分布である。各 phase においてセシウム沈着が生じる温度領域が異なることが分かる。Phase-2 では約 400℃(温度勾配管 TGT-9 ボリューム)への沈着が支配的であるのに対して、phase-3 では約 700℃(温度勾配管 TGT-1 ボリューム)の沈着が増加することが示された。Phase-2 で多くの沈着が見られた約 400℃の温度勾配管 TGT-9 ボリュームの化学種変化に注目すると、phase-2 におけるセシウム化学種は、大部分が CsOH として沈着していることが判る(図 3.3.6 (c))。さらに、10000 秒以降では沈着した CsOH が減少し Cs₂MoO₄ や Cs₂CrO₄ の沈着が増加した。これは、CsOH が試験後期に放出された反応性の高い中揮発性化学種と反応したためである。また phase-3 での沈着が多く見られた約 700℃の温度勾配管 TGT-1 ボリュームでは、Cs₂MoO₄が主要な沈着物であった(図 3.3.6 (b))。Phase-3 では、Phase-2 と異なり、温度勾配管へ移行する以前にセシウム元素が Cs₂MoO₄に変換されることが予測された。

ヨウ素元素の温度勾配管内の沈着傾向の経時変化および主要な温度勾配管ボリュームでの沈着物化学種より(図 3.3.7)、CsI+B₂O₃ 実験解析結果(3.1.2 および 3.1.3 項)と同様に、ヨウ素は主に CsI として移行し徐々に下流へと沈着ピークが移行することが示された。前述したようにヨウ素元素の沈着分布は実験での実測値と異なっており、CsI 以外の化学種として移行した可能性が高い。また、実験では最下流において有意な量のガス状ヨウ素が確認されているが、本解析ではエアロゾル状 CsI のみが確認された。ヨウ素の移行挙動に関しては、HI 分解に係る律速反応[3.3.3]や、ポリモリブデン酸塩生成によりヨウ素が CsI から離脱する反応[3.3.4]が報告されており、それら影響の考慮が必要であると考えられる。

モリブデン元素の温度勾配管内の沈着傾向の経時変化および主要な温度勾配管ボリュームでの沈着物化学種を図 3.3.8 に示す。図 3.3.8 (a) は、各 phase 終了時の温度勾配管内の

モリブデン沈着分布である。モリブデンは揮発性が低く燃料からの放出が遅いため、各 phase による沈着分布の違いは確認できなかった。沈着の最も多い上流ボリュームである TGT-1 におけるモリブデン沈着物は、 MoO_2 、 Cs_2MoO_4 、 BaMoO_4 であった。また、下流ボリューム TGT-9 での沈着物は、 Cs_2MoO_4 のみであることが示された。

以上より、熱力学平衡計算を用いた FP 移行挙動評価では、約 300°C 以上の温度領域におけるセシウム移行挙動を精度よく評価できる可能性が示された。しかしながら、ヨウ素の移行挙動については熱力学平衡計算を用いた評価が難しく、熱力学平衡計算手法または解析条件の再検討、速度論の導入などが必要と考えられる。

参考文献

- [3.3.1] N. E. Bixler, “VICTORIA2.0, A Mechanical Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions,” NUREG/CR-6131, 1998.
- [3.3.2] A. Gallais-During et al., “Overview of the VERDON-ISTP Program and main insights from the VERDON-2 air ingress test,” Ann. Nucl. Energy, 101, 109-117, 2017.
- [3.3.3] B. Xerri et al., “Ab initio calculation and iodine kinetic modeling in the reactor coolant system of a pressurized water reactor in case of severe nuclear accident,” Comput. Theor. Chem.; 990, 194-208, 2012.
- [3.3.4] A. -C. Gregoire et al., “Studies on the role of molybdenum on iodine transport in the RCS in nuclear severe accident conditions,” Ann. Nucl. Energy, 78, 117-129, 2015.

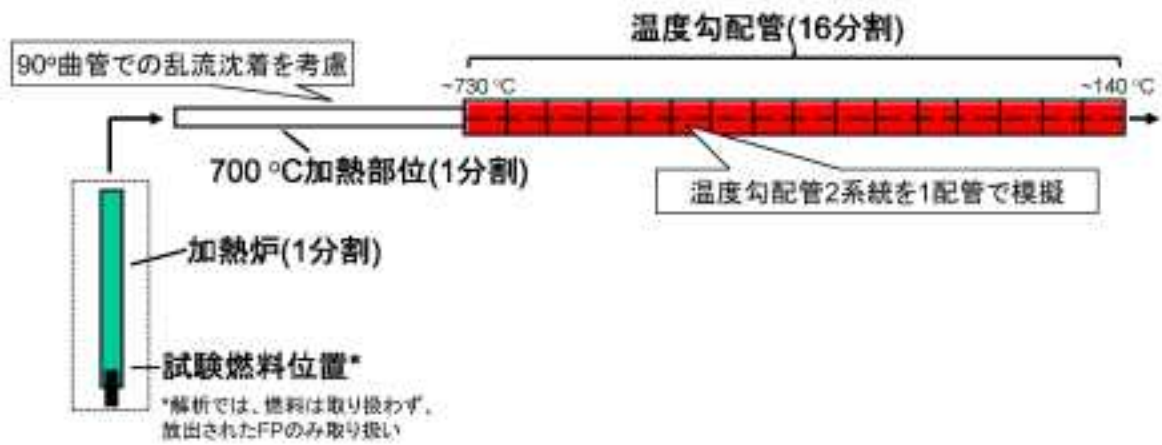


図 3.3.1 VICTORIA2.0 解析における VERDON-2 実験体系

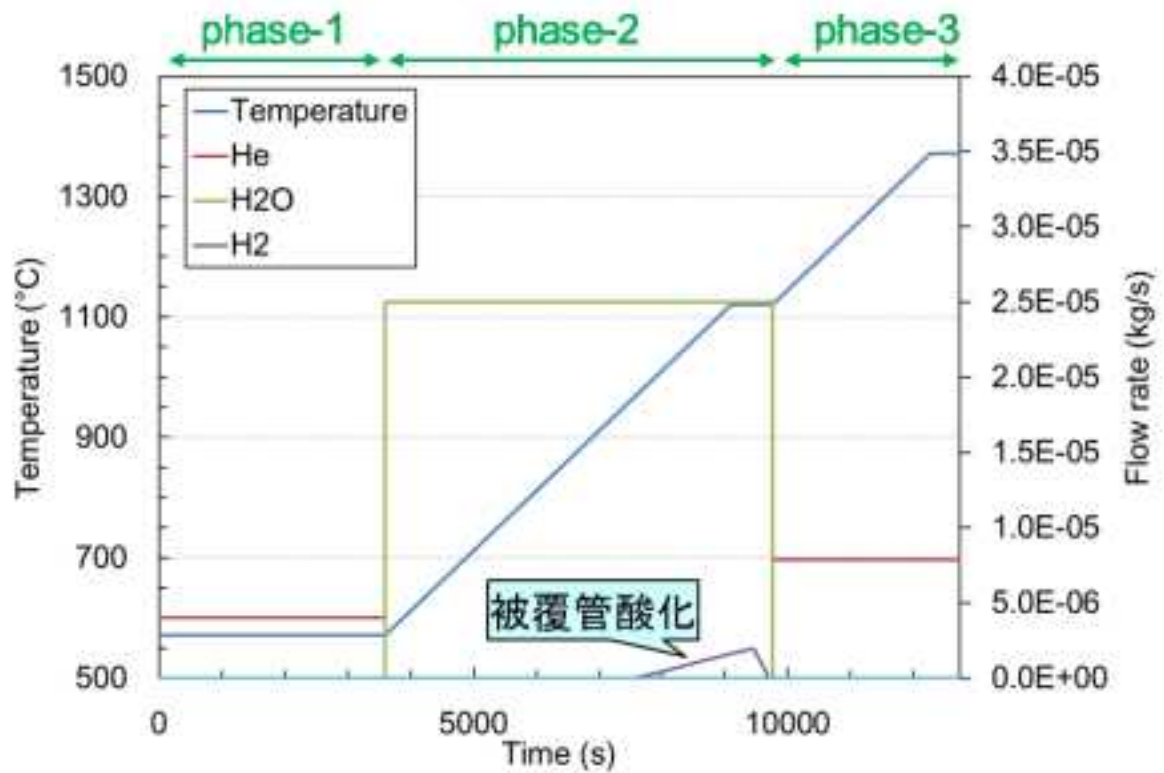


図 3.3.2 VICTORIA2.0 解析における VERDON-2 実験手順[3.2.2]

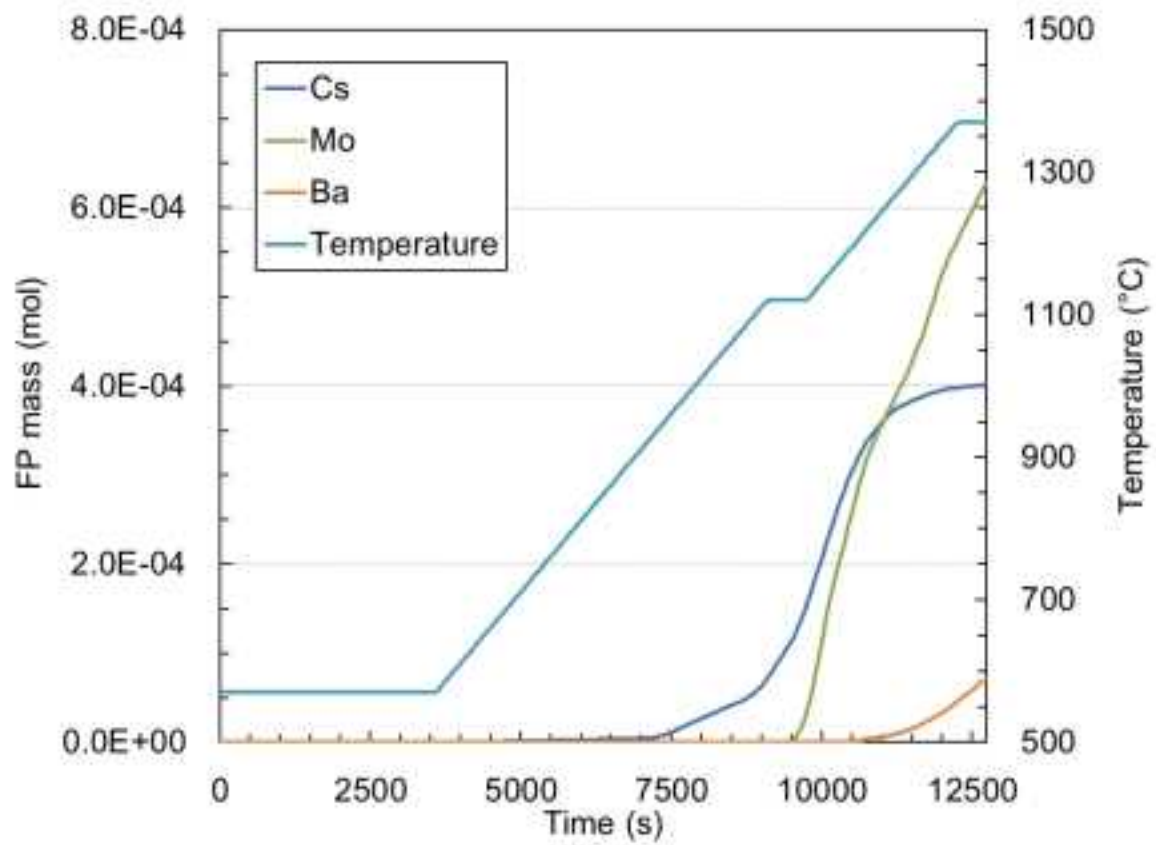


図 3.3.3 VICTORIA2.0 解析で用いた各 FP 放出傾向[3.2.2]

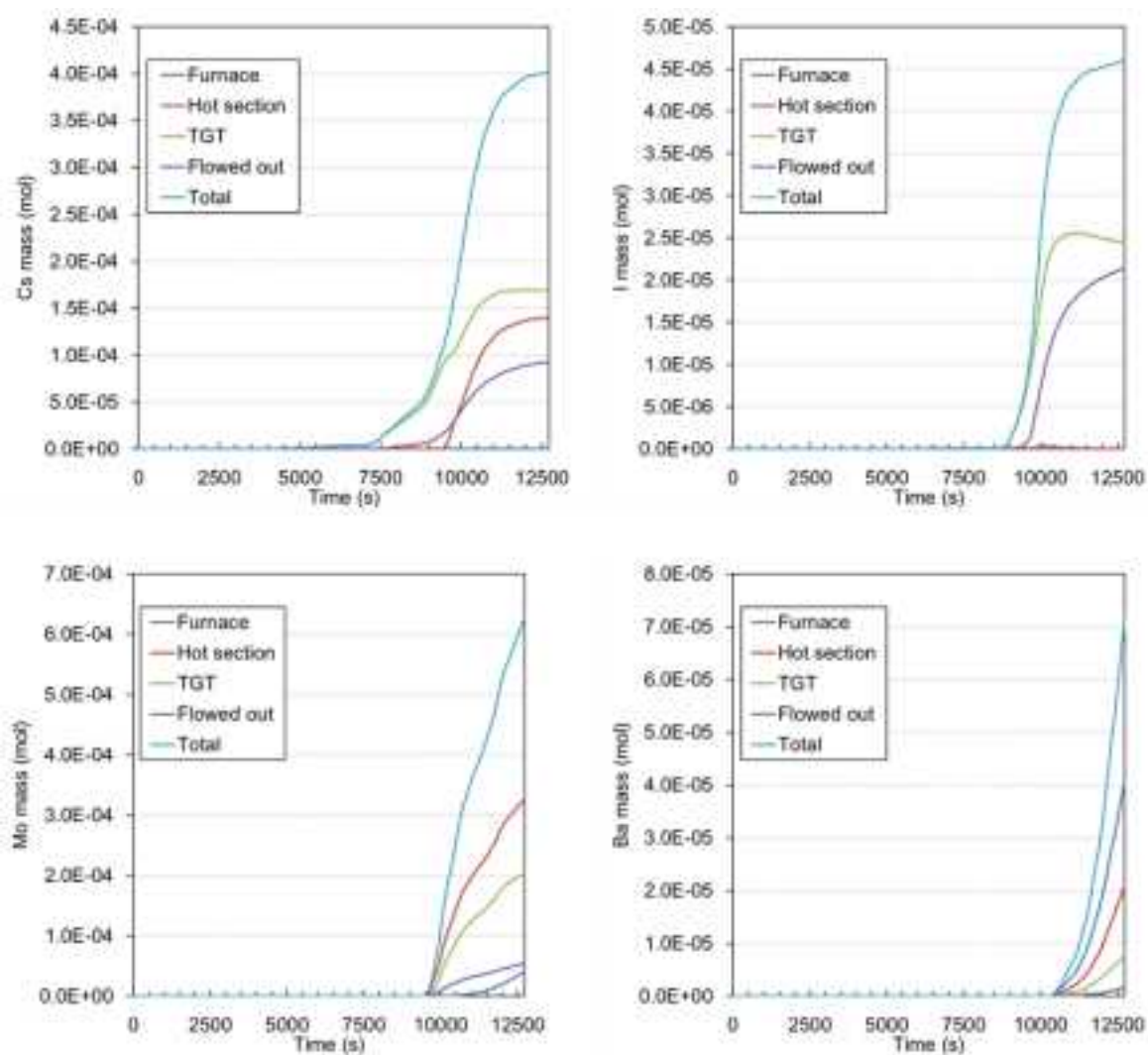


図 3.3.4 試験装置での各 FP 物質量の経時変化

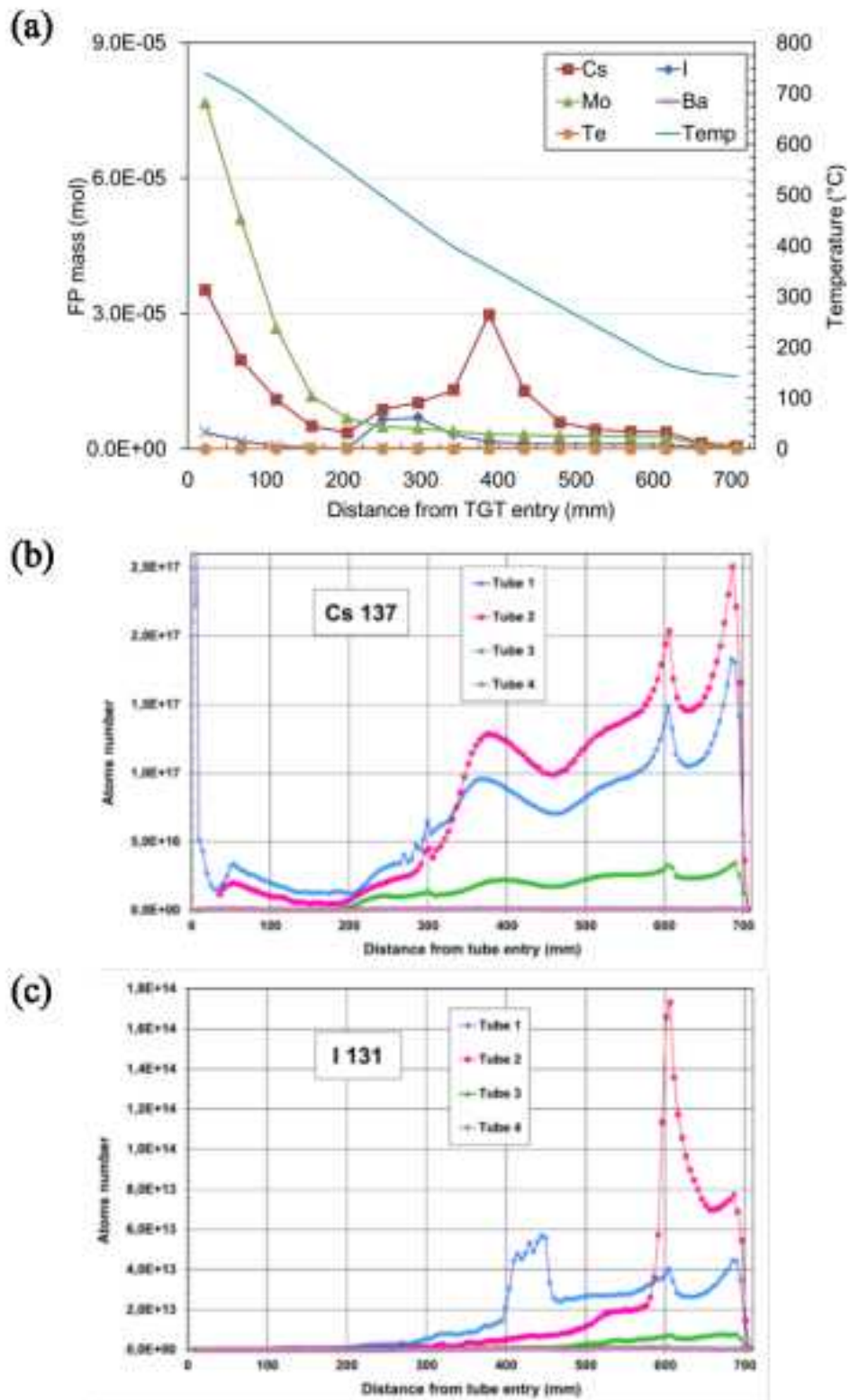


図 3.3.5 VICTORIA2.0 解析 (a) および実験 (b、c) [3.2.2]での温度勾配管内 FP 沈着分布

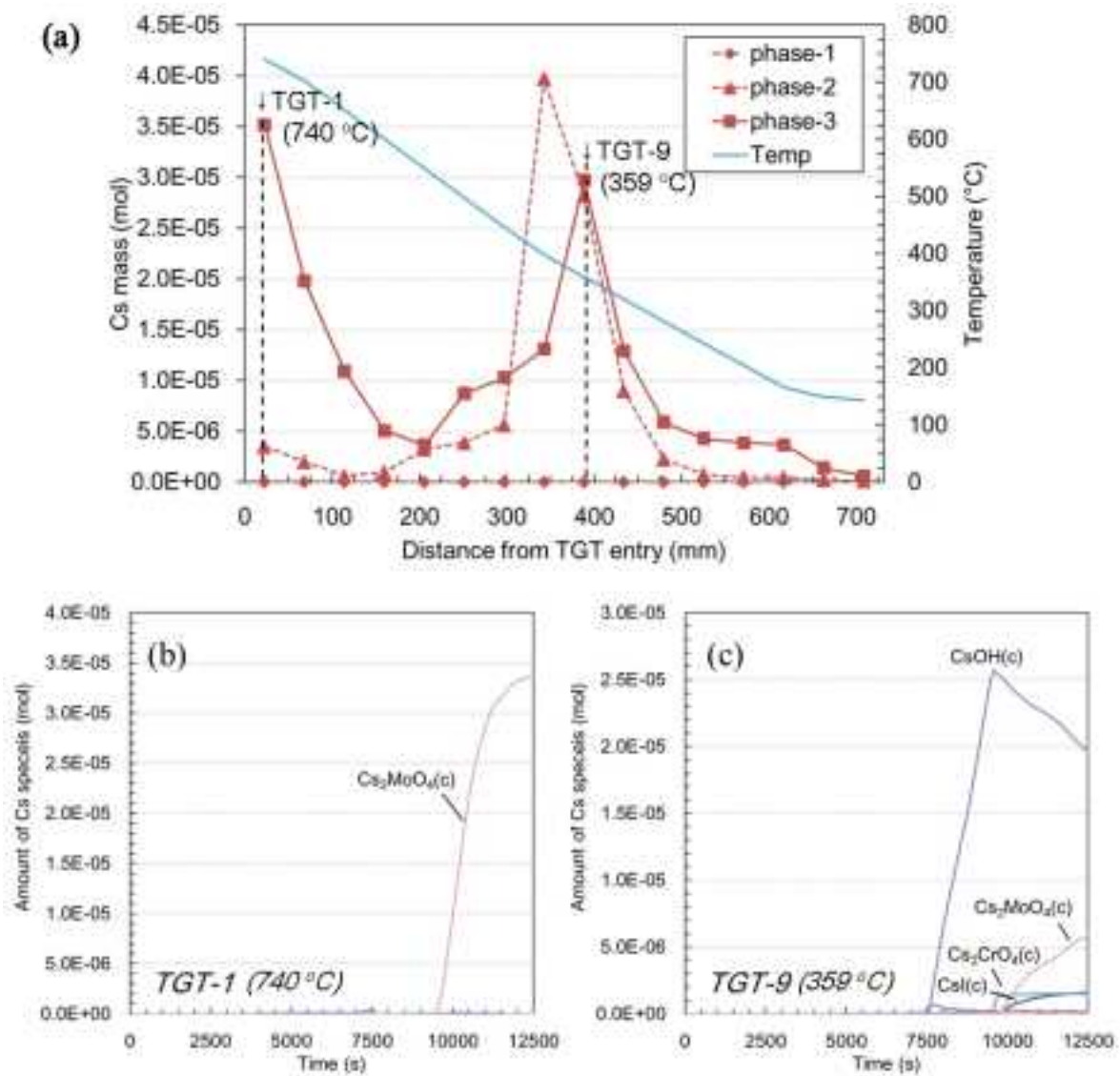


図 3.3.6 各試験過程での温度勾配管内のセシウム沈着分布 (a) と沈着化学種 (b、c)

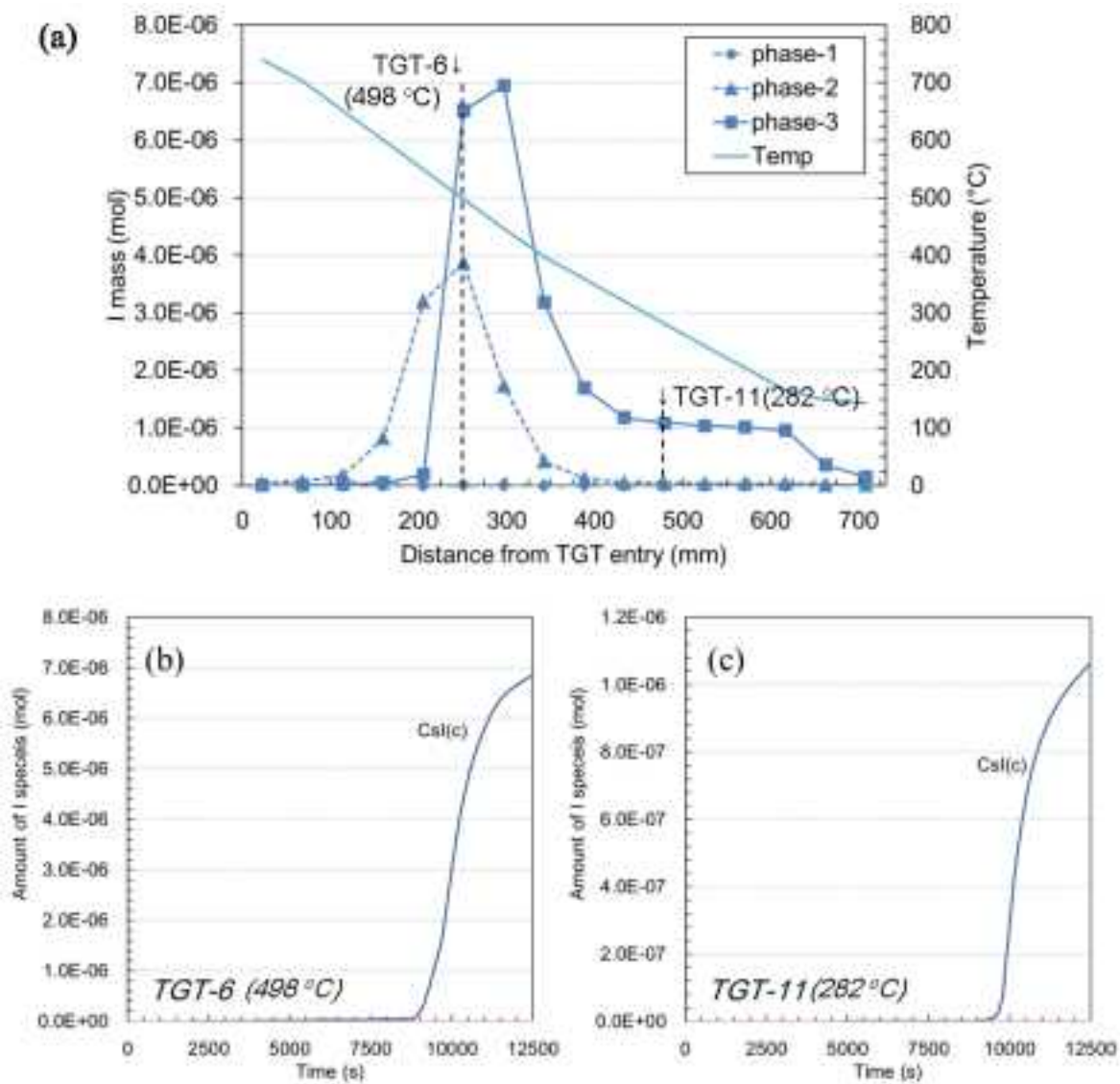


図 3.3.7 各試験過程での温度勾配管内のヨウ素沈着分布 (a) と沈着化学種 (b、c)

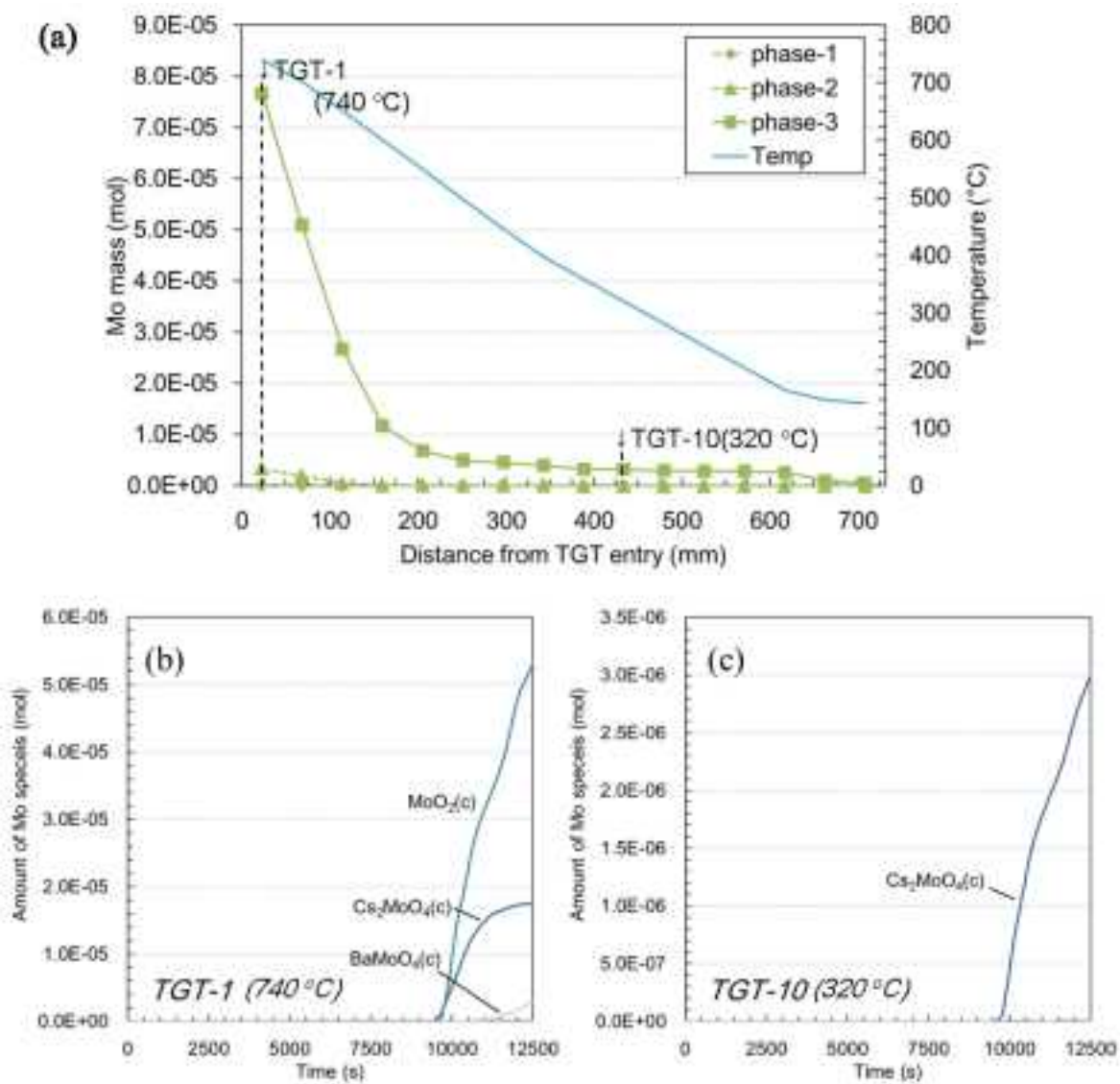


図 3.3.8 各試験過程での温度勾配管内のモリブデン沈着分布 (a) と沈着化学種 (b、c)

3.4 FP 化学形予測のための代替統計モデルの構築

3.4.1 目的

ソースターム評価において原子炉冷却系内の FP 化学形を考慮するための方法として VICTORIA2.0 コード[3.4.1]等が備える熱力学平衡計算機能をシビアアクシデント (SA) 総合解析コードに導入することが考えられる。しかし、この方法は計算時間の大幅な増大を伴うため、不確かさ評価を含めたソースターム評価を行う際に膨大な回数の SA 解析が必要となることを見据えた場合、好ましくない。そこで、熱力学平衡計算と等価な結果を得られ、かつ、SA 総合解析コード THALES2 が有する高速な計算機能を維持することが可能な代替統計モデルを構築した。

3.4.2 FP 化学平衡組成データベースの作成

(1) 概要

代替統計モデル構築へ向けた FP 化学平衡組成データベースの作成のため、熱力学平衡計算機能を有する VICTORIA2.0 コードを用いて多様な雰囲気条件下での多ケース解析 (1000 ケース) を実施した。

(2) VICTORIA2.0 を用いた多ケース解析

多ケース解析でのパラメータは、ソースターム評価上重要なセシウム (Cs) 及びヨウ素 (I) の化学種に影響を及ぼす元素濃度 (Mo、B、C)、雰囲気組成 (H_2O 、 H_2)、雰囲気温度を選定した。各 VICTORIA2.0 解析で指定するパラメータ値 (元素濃度及び雰囲気組成) は、切断正規分布を仮定した確率分布で乱数を発生させ決定した。各パラメータの上下限值、平均値、標準偏差を表 3.4.1 に示す。なお、雰囲気温度範囲は 500~2500 K とし、10 K ごとの化学平衡組成を取得している。また、元素濃度の上限値及び雰囲気組成の解析範囲を決定する上で以下の仮定を設けた。

- FP 濃度(Cs、I、Mo) :
一次冷却系内の最小ボリュームである主蒸気配管($\approx 10 \text{ m}^3$)内に、60 GWd- UO_2 燃料の FP 炉内インベントリが全て存在した場合の濃度を最大濃度とした。なお炉内インベントリは、ウラン重量が 94t とし、化学組成(g/tHM)より計算した [3.4.2]。
- B_4C 濃度 :
最大の B_4C 重量を 1.5t 相当とし、 B_4C 酸化によって生成する代表的な化学形を HBO_2 、及び CO とした。
- 雰囲気組成 :
 H_2O 分圧 $1.0 \times 10^3 \sim 1.0 \times 10^7 \text{ Pa}$ 及び H_2 分圧 $1.0 \times 10^1 \sim 1.0 \times 10^7 \text{ Pa}$ 相当の濃度を範囲とした。
また解析における全圧は、 H_2O と H_2 分圧の和とした。

多ケース解析の実施手順の概要を図 3.4.1 に示す。まず、表 3.4.1 に示す条件でランダム

に生成した 1000 ケースのパラメータ値の組み合わせから、VICTORIA2.0 解析用の入力データを作成した。次に、作成された入力データを基に、1 ボリュームの閉鎖系を対象とした VICTORIA2.0 解析を実施した。VICTORIA2.0 解析に関するエラーチェックの後、セシウム及びヨウ素に関する化学種を抽出し、それら化学種のモル割合を計算した。さらに、本多ケース解析において 10%以上のモル割合をとり得る化学種を抽出した。

主要な化学種抽出の結果、CsI(g, c)、I(g)、HI(g)、MoI₂(c)、Cs₂I₂(g)、CsBO₂(c, g)、CsOH(c, g)、Cs₂MoO₄(g, c)、Cs(g, c) の 9 化学種が該当することが明らかになった。VICTORIA2.0 解析では、各化学種の化学状態（気体状もしくは凝縮相）の区別がされているが、化学組成データベースの簡素化のため気体状及び凝縮相を統合した。さらに CsI の 2 量体である Cs₂I₂ 化学種は、CsI 化学種に含めることとした。また、本年度の代替統計モデル構築では、限られた条件で生成する MoI₂(c)および Cs(c, g)化学種は棄却することとした。本年度の代替統計モデル構築で対象とする入力パラメータ及び化学種を表 3.4.2 に示す。ここで、対象化学種に対して CO 濃度パラメータは影響しないと考えられるため、本年度の代替統計モデル構築時に考慮するパラメータから除外することとした。

3.4.2 代替統計モデルの構築

(1) 概要

SA 総合解析コード THALES2 における FP 化学計算機能の拡張に向けて、3.4.1 項で作成した FP 化学平衡組成データベースを活用した簡易的な FP 化学形予測モデルを構築した(図 3.4.2)。この予測モデルは、複雑かつ膨大な計算コストを要する化学平衡計算に比べ、非線形統計回帰に基づく簡易なモデルであり、低計算コストであることが期待できる。そのため、THALES2 の特長である実行速度の速さを維持できると考えられる。

(2) ノンパラメトリック・ベイズ法を用いた代替統計モデルの構築

代替統計モデルとは、従属変数(出力)と独立変数(入力)の間の定量的な関係($y = f(x)$)を統計的手法によって推計するモデルである。本代替統計モデルでは、ノンパラメトリック・ベイズ法を適用した。

ノンパラメトリック・ベイズ法は、ベイズ統計の新しい統計モデルであり、「利用できるデータの複雑さに応じてモデル自体の複雑さも自動的に学習する」ことのできる統計モデルである[3.4.3]。さらに、本統計モデルは回帰モデルのような自由度を事前に設定する必要がなく、ベイズ更新を用いた最適なモデルの推定が可能である。ノンパラメトリック・ベイズ法の最も基本となる統計モデルとして、ディリクレ過程 (Dirichlet process) が挙げられる。

ディリクレ過程を説明する前に、ガウス混合回帰モデルから説明する。データ y を生成するガウス混合回帰モデルは式 (3.4.1) で表される。

$$p(y|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \pi_k N(y|\mu_k, \sigma_k^2) = \sum_{k=1}^K \pi_k N(y|\beta_{k0} + \boldsymbol{\beta}_k^T \cdot \mathbf{x}, \sigma_k^2) \quad \text{式 (3.4.1)}$$

ここで、 $\mathbf{x}$ は入力変数のベクトル、 y は出力変数、 β_{k0} と $\boldsymbol{\beta}_k$ は各サブモデル(ガウス分布)の回帰係数、 σ_k^2 は各サブモデルの分散である。出力は入力の K 個のガウス回帰モデルを混合比 ($\boldsymbol{\pi}$) で混合したモデルである。混合比は K 次元のディリクレ分布に従う。

$$\boldsymbol{\pi} \sim \text{Dir}(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \quad \text{式 (3.4.2)}$$

ガウス混合回帰モデルの予測性能は必ず混合数 K で制約される。混合数 K を事前に設定する必要がないモデルは、ディリクレ過程無限混合モデルと呼ばれ、最適な混合数 K と回帰係数をベイズ推定で計算する [3.4.4] [3.4.5]。

$$p(y|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^{\infty} \pi_k(\mathbf{x}) N(y|\mu_k, \sigma_k^2) = \sum_{k=1}^{\infty} \pi_k N(y|\beta_{k0} + \boldsymbol{\beta}_k^T \cdot \mathbf{x}, \sigma_k^2) \quad \text{式 (3.4.3)}$$

図 3.4.3～3.4.5 に、入力と出力が非線形な関係にある一次元のデータセット (図 3.4.3) を対象としたディリクレ過程混合モデルによる簡単な推定例を示す。本データセットは、ディリクレ過程を用いたクラスタリングにより、統計的に類似した 3 つのグループ (クラスター) に大別される (図 3.4.4)。さらに、各グループにおいて線形回帰モデルフィッティングを行い、各サブモデルを作成する (図 3.4.5)。最終的な予測では、与えられた入力値が各サブモデルに所属する確率を計算し、その中で一番確率が高いサブモデルにおける回帰モデルの値とする。ここで、高次元のデータセットは可視化が困難であるため、ディリクレ過程の利用がさらに有効である。

(3) 代替統計モデルによる予測結果

代替統計モデルを SA 総合解析コード THALES2 へ導入するには、統計モデルの複雑さを抑えなければならない。そこで、セシウム及びヨウ素の化学種に大きな影響を与え、モデルを複雑化するパラメータである雰囲気温度に着目した。本モデル構築では、選定した温度毎に温度一定のモデルを構築することで、雰囲気温度を変数として含めない方針とした。任意の温度に対してはその温度を挟む 2 温度の結果を用いて内挿する。選定した雰囲気温度は、500 K, 700 K, ..., 2300 K, 2490 K (ほぼ 200 K 間隔) の計 11 点である。さらに、モデルの複雑さを抑えるため、クラスタ数の上限値を 5 に設定した。解析には、Python 言語のオープンソース機械学習ライブラリ `scikit-learn` を利用した [3.4.6]。

代替統計モデルの構築結果およびその予測性能について、500 K での CsI 化学種を例として以下に示す。前節で作成した 1000 ケースの化学組成データベースをディリクレ過程でク

ラスタリングした。各クラスタに対するサブモデルを線形回帰でフィッティングした結果を表 3.4.3 に示した。本代替統計モデルを用いて、表 3.4.4 に示す入力条件に対する CsI 化学系割合の推定を行った。各サブモデルの予測値及び確率密度関数で推定された重みを表 3.4.5 に示した。ここで、多変量正規分布の確率密度関数を式 (3.4.4) に示し、入力に対するクラスタ i の重み関数は式 (3.4.5) に示した。なお、 $Num_of_data_i$ は 1000 ケースのデータポイントの中にあるクラスタ i に所属するデータの数である。表 3.4.5 より、重みが一番大きいクラスタ 2 の予測値 9.99E-01 が最終的な結果であることが分かる。この結果は、同様な入力条件で計算した VICTORIA2.0 の解析結果 (1.0) と良い一致を示している。対象とするすべての化学種に対して得られた代替統計モデルのパラメータを表 3.4.6～3.4.10 に示す。ここでは、例として温度 500K の結果のみを示し、その他の温度の結果は付録 A に掲載する。

$$p(\mathbf{x}) = MVN(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = \frac{1}{\sqrt{|2\pi \cdot \boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\right) \quad \text{式 (3.4.4)}$$

$$\pi_i(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}) \times Num_of_data_i \quad \text{式 (3.4.5)}$$

(4) 代替統計モデルの検証

図 3.4.6 に示す手法で、構築した代替統計モデルの妥当性を検証した。100 ケースの入力を VICTORIA2.0 と代替統計モデルで独立に計算して検証した。温度 500 K、1500 K 及び 2490 K における検証結果の例を、ヨウ素については図 3.4.7～3.4.9 に、また、セシウムについては図 3.4.10～図 3.4.12 に示す。ヨウ素に比べると、セシウムの予測性が低いことが明示された。今後、クラスタ数の適正化等を考慮して、予測モデルの改良を図る予定である。

参考文献

- [3.4.1] N. E. Bixler, “VICTORIA 2.0: A Mechanistic Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System Under Severe Accident Conditions”, NUREG/CR-6131, 1998.
- [3.4.2] 安藤良平, 高野秀機, “使用済軽水炉燃料の各種組成評価”, JAERI-Research 99-004, 1999.
- [3.4.3] S.J. Gershman and D.M. Blei, “A tutorial on Bayesian nonparametric models”, J. Math. Psychol., 56, 1-12, 2012.
- [3.4.4] J.E. Griffin and M.F.J. Steel, “Order-based dependent Dirichlet processes”, J. Am. Stat. Assoc., 101(473), 179-194, 2012.
- [3.4.5] S.N. MacEachern, “Dependent nonparametric processes”, In: ASA proceedings of the

section on Bayesian statistical science, Virginia, U.S., 1999.

- [3.4.6] F. Pedregosa, et al., “Scikit-learn: machine learning in Python”, J. Mach. Learn. Res., 12, 2825-2830, 2011.

表 3.4.1 多ケース解析のパラメータ(切断正規分布)

パラメータ		上限値	下限値	平均値	標準偏差
元素濃度 (kg/m ³)	Cs	1.60E+00	1.00E-05	4.90E-01	3.80E-01
	I	1.20E-01	1.00E-05	7.50E-02	2.80E-02
	Mo	1.80E+00	1.00E-05	5.20E-01	4.00E-01
	HBO ₂	1.40E+01	1.00E-05	1.10E+00	1.70E+00
	CO	5.90E-01	1.00E-05	1.10E+00	1.70E+00
雰囲気組成 (kg/ m ³)	H ₂ O	9.60E+00	1.00E-05	1.10E+00	2.10E+00
	H ₂	1.00E+00	1.00E-05	9.40E-02	2.10E-01
雰囲気温度(K)		2.50E+03	5.00E+02		

表 3.4.2 代替統計モデル構築で対象とする入力パラメータ及び化学種

パラメータ	対象化学種
元素濃度 (Cs、I、Mo、HBO ₂)	CsBO ₂ 、CsOH、
雰囲気組成 (H ₂ O、H ₂)	Cs ₂ MoO ₄ 、CsI、
雰囲気温度	HI、I

表 3.4.3 温度 500K において得られた CsI の各サブモデルの回帰係数

クラス	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
1	9.99E-01	1.00E-03	-8.49E-05	1.25E-05	-3.04E-04	-2.00E-03	2.65E-04
2	9.99E-01	2.50E-03	-9.89E-03	7.10E-04	-9.85E-04	9.86E-03	-4.59E-04
3	9.34E-01	2.01E-01	-1.11E+00	-1.78E-01	-9.68E-03	1.34E-01	-4.67E-02
4	1.04E+00	1.95E-01	-1.17E+00	-5.99E-02	-6.02E-02	5.82E-01	-1.72E-02
5	9.21E-01	3.24E-01	-1.68E+00	2.35E-02	-3.28E-02	-1.30E-01	-1.02E-02

表 3.4.4 VICTORA2.0 の入力値 (例)

変量	Cs(kg/m3)	I(kg/m3)	Mo(kg/m3)	H ₂ O(kg/m3)	H ₂ (kg/m3)	HBO ₂ (kg/m3)
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
値	3.55E-01	2.15E-02	3.82E-01	9.30E-02	3.94E-05	7.59E-01

表 3.4.5 温度 500K において得られた CsI の各サブモデルの予測値と重み

クラス	1	2	3	4	5
予測値	1.00E+00	9.99E-01	8.77E-01	1.04E+00	9.98E-01
重み	6.26E-03	9.53E-01	2.30E-05	4.09E-02	1.19E-04

表 3.4.6 温度 500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	6.927E-04	-1.004E-03	8.492E-05	-1.250E-05	3.039E-04	2.001E-03	-2.647E-04
CsI	9.993E-01	1.004E-03	-8.490E-05	1.250E-05	-3.039E-04	-2.001E-03	2.647E-04
CsBO ₂	6.173E-01	1.575E-01	3.143E-01	1.612E-02	-1.302E+00	-6.243E-02	3.264E-01
CsOH	3.594E-02	7.081E-02	1.830E-02	-3.116E-03	-7.756E-02	-2.746E-02	-8.916E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.467E-01	-2.283E-01	-3.323E-01	-1.300E-02	1.379E+00	8.989E-02	-2.372E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.514E-01	7.308E-02	5.399E-01	1.565E-01	2.092E-01	3.037E-01
共分散行列		1.598E-01	2.555E-03	2.753E-03	-5.361E-03	-8.982E-03	1.723E-02
		2.555E-03	8.402E-04	2.033E-03	-6.697E-04	-8.833E-06	-3.930E-04
		2.753E-03	2.033E-03	1.732E-01	6.748E-03	2.672E-03	-1.047E-02
		-5.361E-03	-6.697E-04	6.748E-03	4.576E-02	-2.594E-03	8.830E-03
		-8.982E-03	-8.833E-06	2.672E-03	-2.594E-03	8.349E-02	1.904E-02
		1.723E-02	-3.930E-04	-1.047E-02	8.830E-03	1.904E-02	7.590E-02
データ数	183						

表 3.4.7 温度 500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	1.064E-03	-2.504E-03	9.892E-03	-7.103E-04	9.848E-04	-9.862E-03	4.593E-04
CsI	9.989E-01	2.504E-03	-9.892E-03	7.103E-04	-9.848E-04	9.862E-03	-4.593E-04
CsBO ₂	8.563E-01	-3.306E-02	1.395E-01	8.228E-02	-6.745E-01	1.271E+00	1.235E-02
CsOH	1.971E-04	1.728E-04	-1.649E-03	-1.107E-04	-2.922E-05	-5.081E-04	-3.953E-05
Cs ₂ MoO ₄	1.435E-01	3.289E-02	-1.379E-01	-8.217E-02	6.745E-01	-1.270E+00	-1.231E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.866E-01	7.468E-02	5.068E-01	5.380E-02	5.661E-03	1.158E+00
共分散行列		1.324E-01	6.381E-04	-4.202E-03	5.239E-03	6.533E-05	8.922E-02
		6.381E-04	7.541E-04	1.271E-04	1.645E-04	-1.740E-05	-2.230E-03
		-4.202E-03	1.271E-04	1.530E-01	2.254E-03	1.645E-04	2.257E-02
		5.239E-03	1.645E-04	2.254E-03	8.678E-03	5.040E-05	1.732E-02
		6.533E-05	-1.740E-05	1.645E-04	5.040E-05	1.614E-04	4.170E-04
		8.922E-02	-2.230E-03	2.257E-02	1.732E-02	4.170E-04	1.700E+00
データ数	370						

表 3.4.8 温度 500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	6.558E-02	-2.007E-01	1.110E+00	1.784E-01	9.676E-03	-1.345E-01	4.672E-02
CsI	9.344E-01	2.007E-01	-1.110E+00	-1.784E-01	-9.676E-03	1.345E-01	-4.671E-02
CsBO ₂	5.766E-01	-1.103E-01	-6.125E-01	-1.211E-01	-3.571E-02	-2.423E-01	6.385E-02
CsOH	3.361E-01	1.235E-02	1.669E+00	-4.731E-02	-1.831E-02	-3.056E-01	-6.255E-02
Cs ₂ MoO ₄	8.696E-02	9.801E-02	-1.053E+00	1.684E-01	5.403E-02	5.480E-01	-1.291E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		8.242E-01	7.091E-02	3.583E-01	4.392E+00	2.014E-01	4.929E-01
共分散行列		1.774E-01	1.107E-04	-3.005E-02	-6.116E-01	-5.645E-02	-6.081E-02
		1.107E-04	8.801E-04	9.777E-04	4.053E-03	-1.694E-03	-3.642E-04
		-3.005E-02	9.777E-04	1.144E-01	9.223E-02	2.129E-02	-2.468E-02
		-6.116E-01	4.053E-03	9.223E-02	1.005E+01	3.096E-01	9.280E-01
		-5.645E-02	-1.694E-03	2.129E-02	3.096E-01	8.305E-02	1.988E-02
		-6.081E-02	-3.642E-04	-2.468E-02	9.280E-01	1.988E-02	4.522E-01
データ数	60						

表 3.4.9 温度 500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	-3.826E-02	-1.953E-01	1.167E+00	5.993E-02	6.019E-02	-5.822E-01	1.723E-02
CsI	1.038E+00	1.953E-01	-1.167E+00	-5.993E-02	-6.019E-02	5.822E-01	-1.723E-02
CsBO ₂	2.878E-02	5.296E-03	-1.029E-01	-1.061E-02	-3.196E-03	1.890E-01	5.405E-03
CsOH	-1.457E-04	1.422E-03	7.852E-04	-1.264E-03	1.267E-04	1.882E-02	6.878E-05
Cs ₂ MoO ₄	9.714E-01	-6.718E-03	1.021E-01	1.187E-02	3.069E-03	-2.078E-01	-5.474E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.120E-01	7.459E-02	5.469E-01	2.960E+00	8.258E-03	6.158E-01
共分散行列		8.392E-02	4.778E-04	2.787E-02	6.445E-02	-8.884E-05	2.577E-02
		4.778E-04	8.773E-04	9.877E-04	5.866E-03	-7.440E-06	-1.183E-03
		2.787E-02	9.877E-04	1.611E-01	2.287E-01	-1.463E-04	1.165E-03
		6.445E-02	5.866E-03	2.287E-01	6.653E+00	4.784E-03	-1.481E-02
		-8.884E-05	-7.440E-06	-1.463E-04	4.784E-03	3.434E-04	-5.843E-04
		2.577E-02	-1.183E-03	1.165E-03	-1.481E-02	-5.843E-04	4.263E-01
データ数	219						

表 3.4.10 温度 500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	7.920E-02	-3.239E-01	1.684E+00	-2.353E-02	3.285E-02	1.298E-01	1.025E-02
CsI	9.208E-01	3.239E-01	-1.684E+00	2.353E-02	-3.285E-02	-1.297E-01	-1.025E-02
CsBO ₂	7.050E-01	-8.860E-02	1.211E+00	1.004E-01	-2.209E-01	-1.861E-01	2.413E-02
CsOH	3.990E-04	1.517E-05	6.812E-03	-5.689E-04	2.422E-04	-9.037E-04	-1.012E-04
Cs ₂ MoO ₄	2.945E-01	8.859E-02	-1.217E+00	-9.979E-02	2.206E-01	1.870E-01	-2.403E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		2.885E-01	8.256E-02	5.387E-01	7.008E-01	2.392E-01	2.441E+00
共分散行列		1.020E-01	-9.611E-04	9.935E-03	9.508E-02	1.397E-02	4.128E-01
		-9.611E-04	7.131E-04	4.587E-04	-5.494E-03	-5.390E-04	-1.380E-02
		9.935E-03	4.587E-04	1.596E-01	5.947E-02	1.108E-02	-9.642E-02
		9.508E-02	-5.494E-03	5.947E-02	1.758E+00	9.550E-03	7.564E-01
		1.397E-02	-5.390E-04	1.108E-02	9.550E-03	8.497E-02	-1.412E-01
		4.128E-01	-1.380E-02	-9.642E-02	7.564E-01	-1.412E-01	9.877E+00
データ数	168						

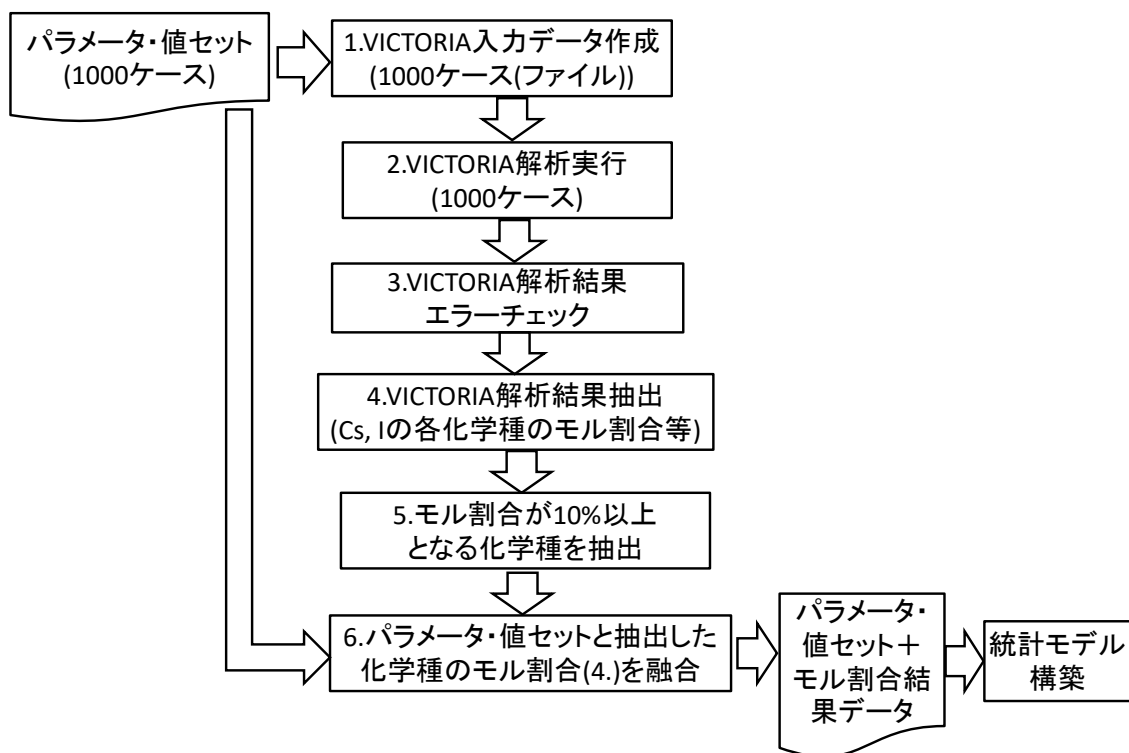


図 3.4.1 多ケース解析の手順概要

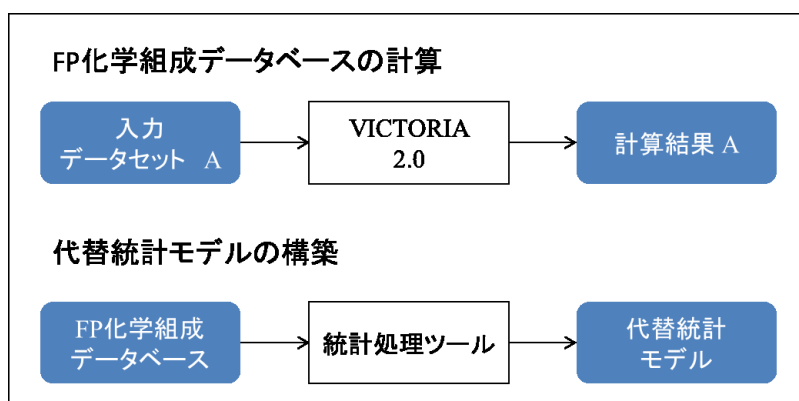


図 3.4.2 FP 化学組成データベースに基づく代替統計モデルの構築

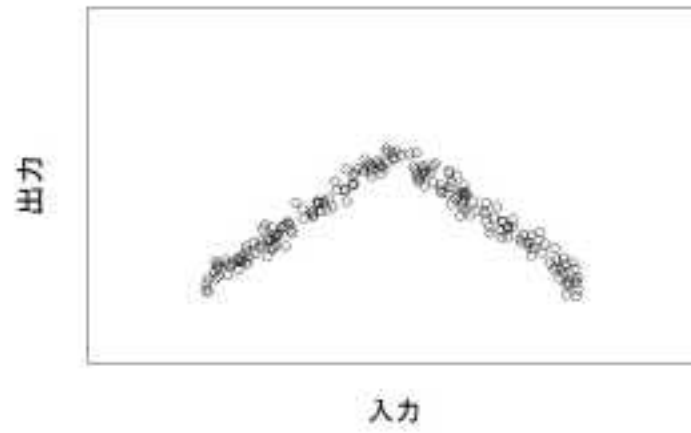


図 3.4.3 クラスタリングする前の生データ（入力と出力の関係が非線形）

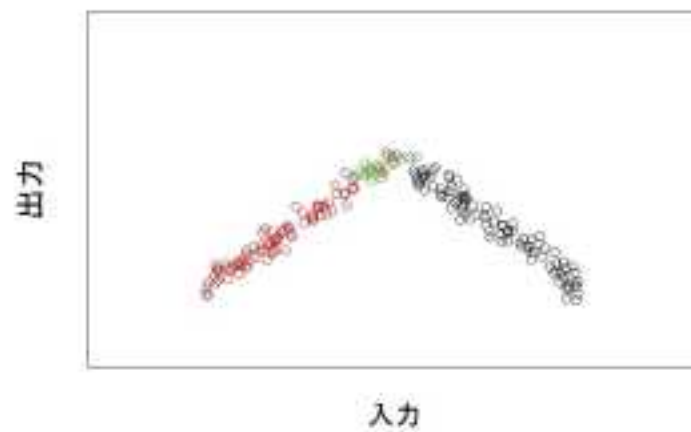


図 3.4.4 ディリクレ過程を用いたクラスタリングで処理したデータ

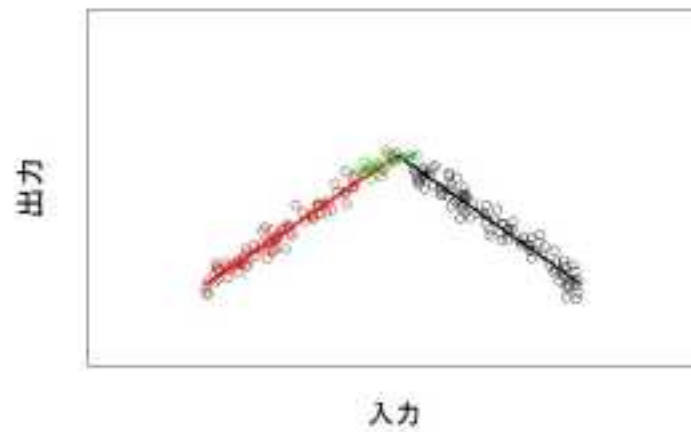


図 3.4.5 各サブモデルを線形回帰でフィッティングした予測モデル

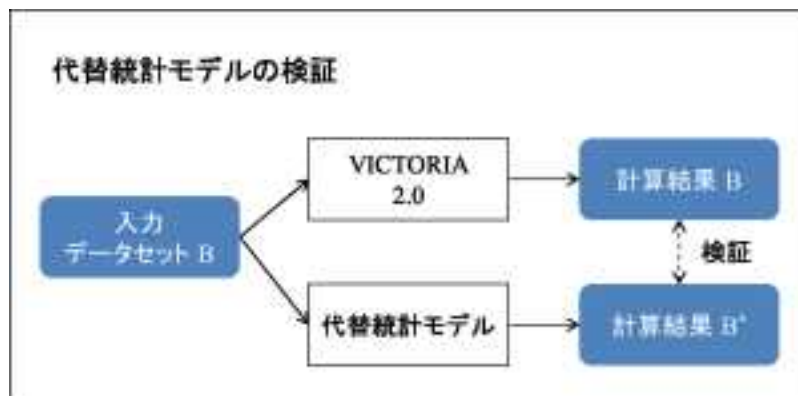


図 3.4.6 代替統計モデルの検証の手法

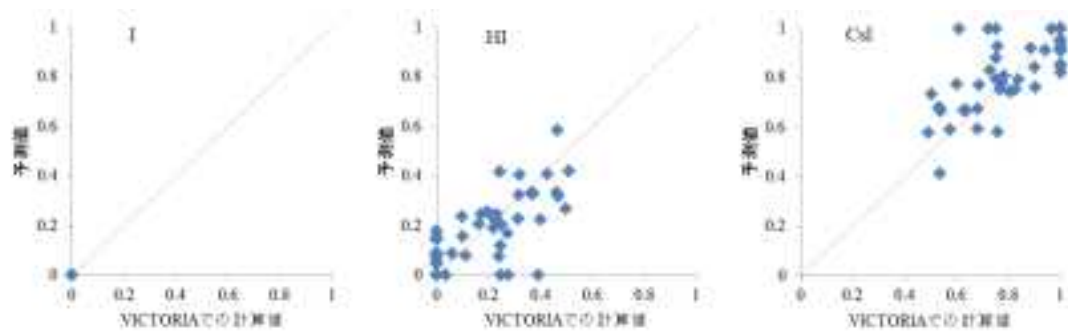


図 3.4.7 温度 500K におけるヨウ素の代替統計モデルの検証

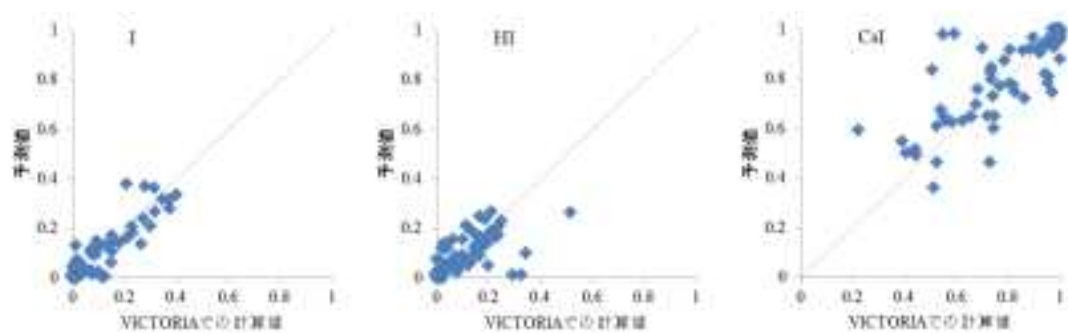


図 3.4.8 温度 1500K におけるヨウ素の代替統計モデルの検証

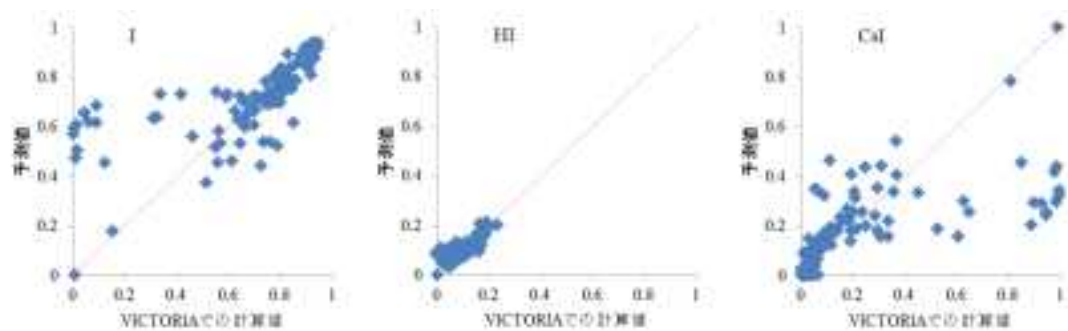


図 3.4.9 温度 2490K におけるヨウ素の代替統計モデルの検証

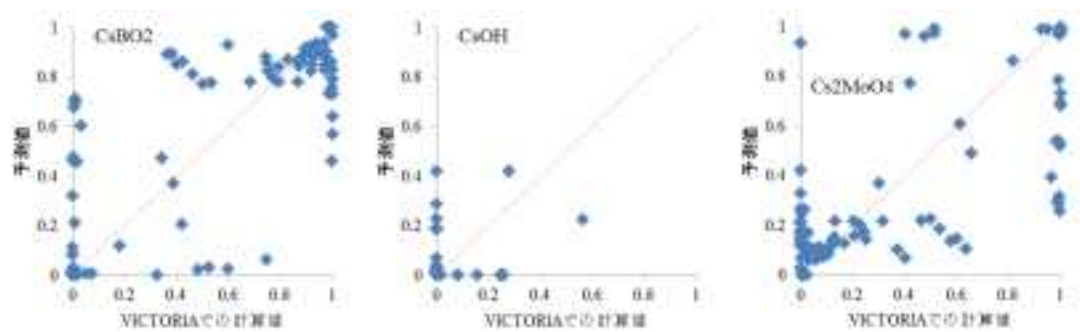


図 3.4.10 温度 500K におけるセシウムの代替統計モデルの検証

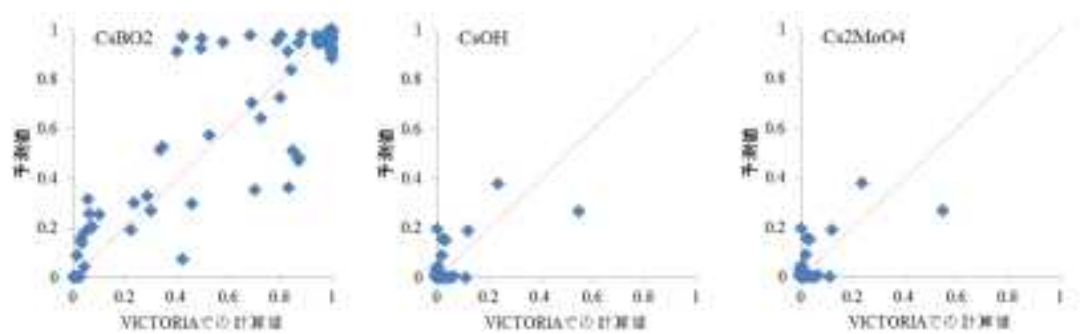


図 3.4.11 温度 1500K におけるセシウムの代替統計モデルの検証

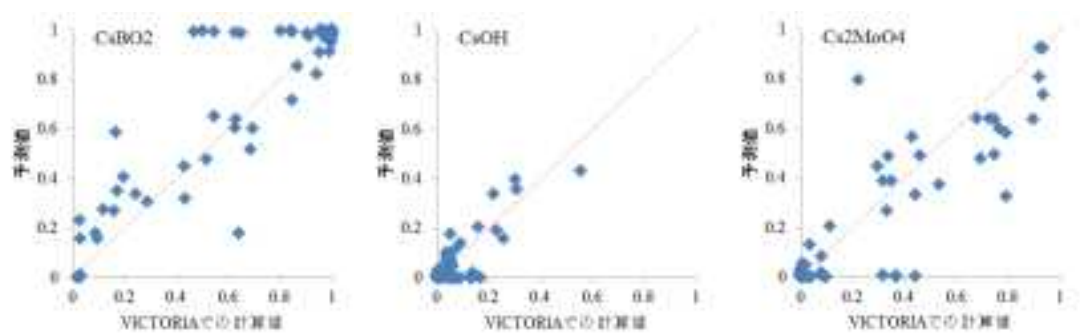


図 3.4.12 温度 2490K におけるセシウムの代替統計モデルの検証

3.5 THALES2 コードの改造及び試解析

軽水炉シビアアクシデント時の原子炉冷却系内の放射性物質の化学的挙動において、 B_4C 制御材を有する BWR プラントでは、ヨウ素及びセシウム化学種として、従来、想定してきた CsI や $CsOH$ とは異なる化学形で存在する可能性がある。格納容器に移行する際の化学形が異なることにより格納容器内のヨウ素化学反応において支配的なパラメータである pH が変化し、その結果、特にヨウ素のソースタームに影響を及ぼす。例えば、格納容器に移行する際のセシウムの化学形は $CsOH$ が支配的であると考えられているが、 Cs_2MoO_4 が支配的であった場合、強塩基からほぼ中性の化学種での移行となることで格納容器液相内 pH の増加が抑制され、ヨウ素化学反応により液相中のガス状ヨウ素(分子状ヨウ素及び有機ヨウ素)の生成と気相への放出が促進され得る。このような状況で格納容器の健全性が喪失した場合、環境へのヨウ素の放出が増大する可能性がある。しかしながら、THALES2 [3.5.1] や MELCOR [3.5.2] など一般的に利用されているシビアアクシデント総合解析コードでは、原子炉冷却系内 FP 化学を十分には考慮しておらずソースターム評価上の課題となっている。

本節では、原子炉冷却系内の放射性物質の化学を検討するために本年度の実施した改造内容(3.5.1 原子炉冷却系内 FP 化学計算機能の導入、3.5.2 格納容器内 pH 計算機能の高度化)と 3.5.3 原子炉冷却系内 FP 化学に関わる試解析について述べる。

3.5.1 原子炉冷却系内 FP 化学計算機能の導入

シビアアクシデント総合解析コード THALES2/KICHE [3.5.1, 3.5.3]への原子炉冷却系内 FP 化学計算機能の導入を実施した。THALES2/KICHE に熱化学平衡理論を直接導入するのではなく、同コードが有する高速な計算機能を維持するために、VICTORIA2.0 コード[3.5.4]による化学組成データベースに基づいた代替統計モデルを用いた。本節ではその概要について述べる。

THALES2/KICHE コードの取り扱い化学種を表 3.5.1 に示す。FP 計算オプション(ヨウ素化学、セシウム化学)により取り扱い化学種は異なるが、本表では原子炉冷却系内 FP 化学から格納容器内ヨウ素化学計算を含めたソースターム解析での取り扱い化学種を示した。 CsI 、 HI 、 $CsOH$ 、 Cs_2MoO_4 、 $CsBO_2$ が原子炉冷却系内 FP 化学計算に必要な化学種、 I_2 、有機ヨウ素 Org-I、イオン(Cs^+ 、 I^-)が格納容器内ヨウ素化学計算で必要な化学種である。また、BWR 制御棒の酸化により生成されるホウ素化学種(HBO_2)及び CO_2 を格納容器内 pH への影響する化学種として考慮する。

原子炉冷却系内 FP 化学計算では、表 3.5.1 で示した取り扱い化学種のうち、ヨウ素 (CsI 、 HI 、 I_2 、Org-I)、セシウム(CsI 、 $CsOH$ 、 Cs_2MoO_4 、 $CsBO_2$)、モリブデン(Cs_2MoO_4 、単体 Mo)、ホウ素($CsBO_2$ 、 HBO_2)の合計 9 つ化学種を想定する。

THALES2 における FP 化学計算の流れ(代替統計モデルの適用方法)を図 3.5.1 に示す。

まず、(1) 化学種の元素質量(I, Cs, Mo, B)を集計する。燃料から放出された FP は、原子炉冷却系内 FP 移行挙動の計算により、各化学種の存在量が表 3.5.2 に示す状態別に計算され

る。元素質量を集計する際には、雰囲気中のガスとエアロゾル(状態 1 及び状態 2)のみを対象とする。

次に、(2) FP 化学に関わる境界条件の整理において、代替統計モデルの入力となる元素(I, Cs, Mo, B)濃度、雰囲気(H₂O 及び H₂)濃度、雰囲気温度を整理し、(3)及び(4)において、代替統計モデルを用いた FP 化学によるヨウ素、セシウム化学種とその他(Org-I, HBO₂, Mo)の化学種組成の計算を行う。化学反応の前後では、ヨウ素、セシウム、モリブデン、ホウ素元素の総量 M_I^{tot} 、 M_{Cs}^{tot} 、 M_{Mo}^{tot} 、 M_B^{tot} は、(式 3.5.1)～(式 3.5.4)に示すように保存される。この総量に対して、FP 化学計算後の元素の化学種への振り分け比(ヨウ素の場合、 $F_I^{CsI} + F_I^{HI} + F_I^{I_2} + F_I^{Org-I} = 1$) を代替統計モデルの結果に基づいて決定することで、(式 3.5.5)及び(式 3.5.6)により、(5)FP 化学による化学種質量を更新する (表 3.5.3 参照)。

$$\text{ヨウ素 I} \quad M_I^{tot} = M_I^{CsI} + M_I^{HI} + M_I^{I_2} + M_I^{Org-I} \quad (\text{式 3.5.1})$$

$$\text{セシウム Cs} \quad M_{Cs}^{tot} = M_{Cs}^{CsI} + M_{Cs}^{CsOH} + M_{Cs}^{Cs_2MoO_4} + M_{Cs}^{CsBO_2} \quad (\text{式 3.5.2})$$

$$\text{モリブデン Mo} \quad M_{Mo}^{tot} = M_{Mo}^{Cs_2MoO_4} + M_{Mo}^{単体Mo} \quad (\text{式 3.5.3})$$

$$\text{ホウ素 B} \quad M_B^{tot} = M_B^{CsBO_2} + M_B^{HBO_2} \quad (\text{式 3.5.4})$$

FP 化学計算後の質量 (例：ガス状の CsI の場合)

$$\text{CsI 質量} = \text{I 元素合計} (M_I^{tot}) \times \text{CsI 振り分け比} (F_I^{CsI}) \times \text{質量換算} (I \rightarrow \text{CsI}) \quad (\text{式 3.5.5})$$

FP 化学計算後の質量 (例：粒径分布を有するエアロゾル状 CsI の場合)

$$\text{CsI 質量} = \text{粒径区分への振り分け比} \times M_I^{tot} \times F_I^{CsI} \times \text{質量換算} (I \rightarrow \text{CsI}) \quad (\text{式 3.5.6})$$

FP 化学計算は、代替統計モデルの適用範囲(VICTORIA2.0 解析条件)及び解析結果に基づき、以下を場合に実施するとした。

- 原子炉冷却系内のボリュームを対象
- 雰囲気中のガス状及びエアロゾル状に属する以下の化学種を対象
CsI、HI、I₂、有機ヨウ素、CsOH、Cs₂MoO₄、CsBO₂、HBO₂、Mo
- 気相体積が有意となるボリュームを対象(ボリュームが水で満たされる場合には、そのボリュームを除外)
- 気相温度 > 500°C (VICTORIA 解析条件の温度下限値)
- ヨウ素及びセシウムの濃度 > 1E-5 kg/m³ (VICTORIA2.0 解析条件の濃度下限)

表 3.5.1 THALES2 コードにおける取り扱い化学種

FP グループ	代表化学種
1	Xe
2	CsI、HI、I ₂ 、Org-I、I ⁻
3	CsOH、Cs ₂ MoO ₄ 、CsBO ₂ 、Cs ⁺
4	Te
5	Sr
6	Ba
7	Ru
8	Mo
9	Ce
10	La
11	HBO ₂ *
12	CO ₂ *
13	その他のエアロゾル**

*: B₄C 酸化による生成物

**: 代表化学種として選定しなかった Fe,Ni,Zr,U 等の炉内構造材は、その他のエアロゾルとしての扱う

表 3.5.2 THALES2 コードでの FP の存在形態

状態	代表化学種
1	雰囲気中のガス
2	雰囲気中のエアロゾル(8 個の粒径区分別)
3	床沈着又は液相中に溶解
4	壁凝縮
5	壁へのエアロゾル沈着(8 個の粒径区分別)
6	壁への化学吸着

表 3.5.3 原子炉冷却系内 FP 化学計算部での処理

(a) 代替統計モデル入力パラメータ関連	
THALES2 インターフェース部での処理	
H ₂ O、H ₂ 濃度 (kg/ m ³)	熱水力計算結果から算出
雰囲気温度(K)	同上
元素濃度 (kg/m ³)	原子炉冷却系内のボリューム毎に雰囲気中の化学種質量を表 3.5.2 の状態別(ガス状及びエアロゾル状)に集計し算出 ヨウ素 : CsI、HI、I ₂ 、Org-I 質量から算出 セシウム : CsI、Cs ₂ MoO ₄ 、CsOH、CsBO ₂ 質量から算出 モリブデン : Cs ₂ MoO ₄ 、単体 Mo 質量から算出 ホウ素 : CsBO ₂ 及び HBO ₂ 質量から算出
(b) 代替統計モデル出力パラメータ関連	
THALES2 インターフェース部での処理	
化学種の振り分け比	➤ I、Cs、B、Mo 元素のマスバランスを考え、以下の条件を満たす化学種の振り分け比 F を算出 ヨウ素 : $F_I^{CsI} + F_I^{HI} + F_I^{I_2} + F_I^{Org-I} = 1$ セシウム : $F_{Cs}^{CsI} + F_{Cs}^{CsOH} + F_{Cs}^{Cs_2MoO_4} + F_{Cs}^{CsBO_2} = 1$ モリブデン : $F_{Mo}^{Cs_2MoO_4} + F_{Mo}^{単体Mo} = 1$ ホウ素 : $F_B^{CsBO_2} + F_B^{HBO_2} = 1$ (VICTORIA2.0 解析結果に基づき $F_I^{Org-I} = 0.0$ を設定) ➤ 振り分け比 F に基づき、各化学種の質量を更新 ➤ 計算前後での元素質量バランスの確認

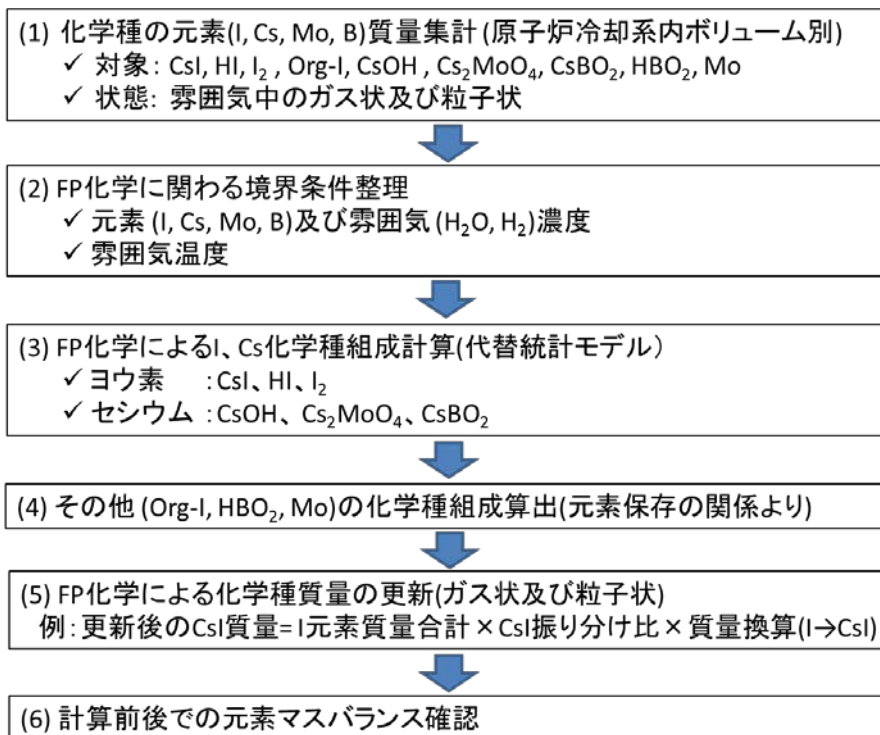


図 3.5.1 THALES2 コードにおける FP 化学計算の流れ

3.5.2 格納容器内 pH 計算機能の高度化

格納容器内 pH は、ヨウ素化学計算モジュールである KICHE の化学反応データベースを用いて計算される。原子炉冷却系内 FP 化学で取り扱う化学種の液相内解離とその後の化学変化及び平衡定数の算出に必要な標準反応エンタルピー ΔH と標準反応エントロピー ΔS を表 3.5.4 に示す。本表に示すように、 Cs_2MoO_4 、 CsBO_2 及び炭酸関連の反応を追加し、KICHE の既存 pH 計算機能を高度化した。

表 3.5.4 格納容器内液相移行時の化学変化

化学種	化学反応
CsI (既存)	$\text{CsI} \rightarrow \text{Cs}^+ + \text{I}^-$ (解離)
HI (既存)	$\text{HI} \rightarrow \text{H}^+ + \text{I}^-$ (解離)
CsOH (既存)	$\text{CsOH} \rightarrow \text{Cs}^+ + \text{OH}^-$ (解離)
Cs_2MoO_4 (追加)	$\text{Cs}_2\text{MoO}_4 \rightarrow 2 \text{Cs}^+ + \text{MoO}_4^{2-}$ (解離) $\text{H}^+ + \text{MoO}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{HMoO}_4^-$ $2\text{H}^+ + \text{MoO}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{MoO}_4$
CsBO_2 (追加)	$\text{CsBO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Cs}^+ + \text{B(OH)}_4^-$ (解離) $\text{B(OH)}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{B(OH)}_4^-$
メタホウ酸(HBO_2) (既存)	$\text{HBO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{B(OH)}_3$ $\text{B(OH)}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{B(OH)}_4^-$
炭酸関連(追加)	$\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$ $\text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$

化学反応	ΔH [kJmol ⁻¹]	ΔS [Jmol ⁻¹ K ⁻¹]	文献
$\text{H}^+ + \text{MoO}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{HMoO}_4^-$	21	105	[3.5.5], [3.5.6]
$2\text{H}^+ + \text{MoO}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{MoO}_4$	-27	-33	[3.5.5], [3.5.6]
$\text{B(OH)}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{B(OH)}_4^-$	14.12	-129.7	[3.5.7]

3.5.3 試解析

BWR4/Mark-I プラントの炉心冷却機能喪失シーケンス(TQUV)を対象に試解析を実施した。本解析では格納容器へ移行する化学種の違いを確認するため、格納容器内のヨウ素化学計算は考慮しないこととした。

計算結果の一例として、蒸気ドームの雰囲気温度及び元素濃度を図 3.5.2 に示す。これら条件に基づいた代替統計モデルにより、図 3.5.3 に示すヨウ素及びセシウム化学種の振り分けが計算される。化学変化後のボリュウム内及び他ボリュウムへの FP 挙動は、生成化学種の物理的性質(蒸気圧、拡散係数、溶解度など)に基づき実施される。

FP 化学を考慮しない場合、図 3.5.4(a)及び図 3.5.5(a)に示すように、格納容器内のサプレッションチャンバ(S/C)に移行するヨウ素及びセシウム化学種は CsI、CsOH であるが、FP 化学を考慮することで図 3.5.4(b)及び図 3.5.5(b)に示すように化学種が変化する。本解析では、S/C に移行したヨウ素及びセシウム化学種は、CsI 及び Cs₂MoO₄ が支配的となった。

格納容器に移行するヨウ素及びセシウム化学種は、原子炉冷却系内の雰囲気条件 (温度及び酸化・還元雰囲気)やヨウ素、セシウム、モリブデン、ホウ素元素の濃度が係わるため、事故シーケンスに強く依存すると予想される。今後、代替統計モデルの予測精度向上を図るとともに、主要な事故シーケンスに対する評価を通じて、ソースタームへの影響について検討する必要がある。

なお、本解析(全計算時間:約 5 時間)に対する FP 化学計算の寄与は僅か 1 秒程度であり、原子炉冷却系内 FP 化学計算に代替統計モデルを利用することで解析時間を殆ど増加させることなくソースターム解析を行なうことができた。

参考文献

- [3.5.1] 石川 他, “THALES-2 コードによる BWR Mark-II を対象としたレベル 3PSA のための系統的なソースターム解析”, JAERI-Research 2005-021, 2005.
- [3.5.2] R. O. Gauntt, et al., MELCOR Computer Code Manuals, Vol. 1: Primer and User's Guide, Version 1.8.6. NUREG/CR-6119, Vol. 1, Rev. 3, Sandia National Laboratory, 2005.
- [3.5.3] K. Moriyama, et al., A Simulation Tool for Kinetics of Iodine Chemistry in the Containment of Light Water Reactors under Severe Accident Conditions, JAEA-Data/Code 2010-034,2010.
- [3.5.4] N. E. Bixler, "VICTORIA2.0, A Mechanical Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions," NUREG/CR-6131, 1998.
- [3.5.5] H.Shiotzu et. al., Parametric Study for Impact of In-Vessel Chemical Forms of Cesium and Iodine on Source Term and pH of Aqueous Phase, ICON23-2085, 2015.
- [3.5.6] Kitamura, A., et al., “JAEA Thermodynamic Database for Performance Assessment

of Geological Disposal of High-level and TRU Wastes: Selection of Thermodynamic Data of Molybdenum,” JAEA-Review 2010-010, 2010.

- [3.5.7] Wagman, D. D., et al., “The NBS tables of chemical thermodynamic properties Selected values for inorganic and C1 and C2 organic substances in SI units,” J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 11, 1982.

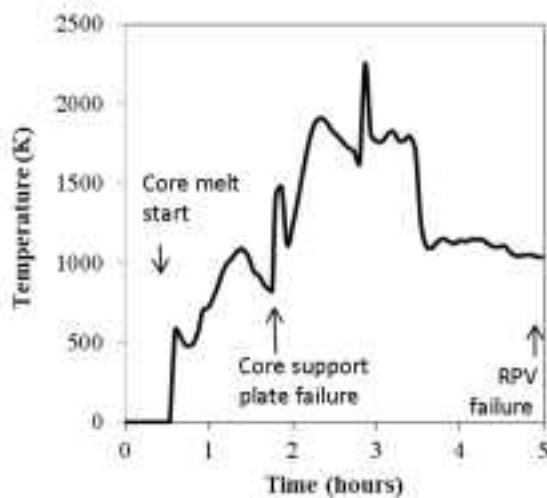


図 3.5.2(a) 蒸気ドーム温度
(代替統計モデル入力変数)

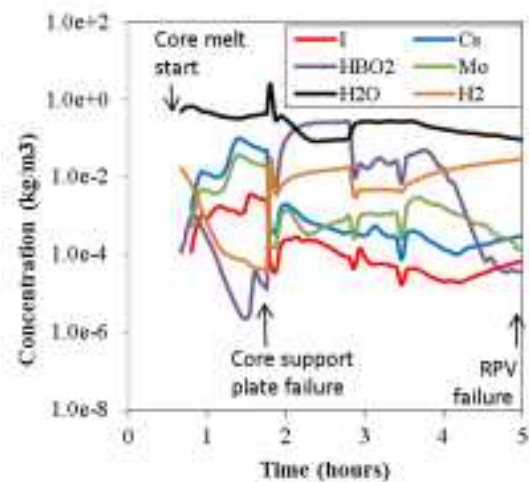


図 3.5.2(b) 蒸気ドームにおける元素濃度
(代替統計モデル入力変数)

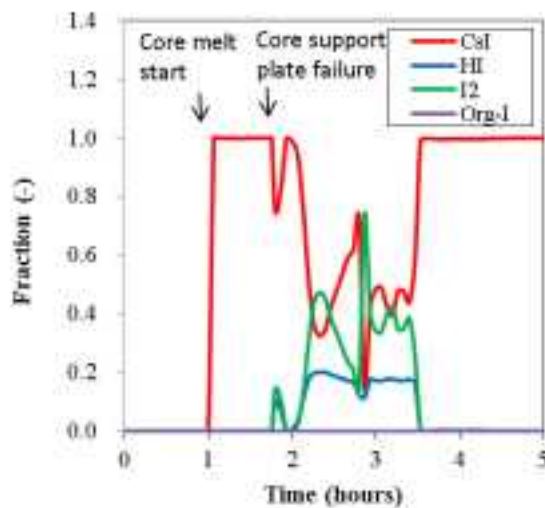


図 3.5.3(a) 代替統計モデルから計算された
FP 振り分け (ヨウ素化学種、蒸気ドーム)

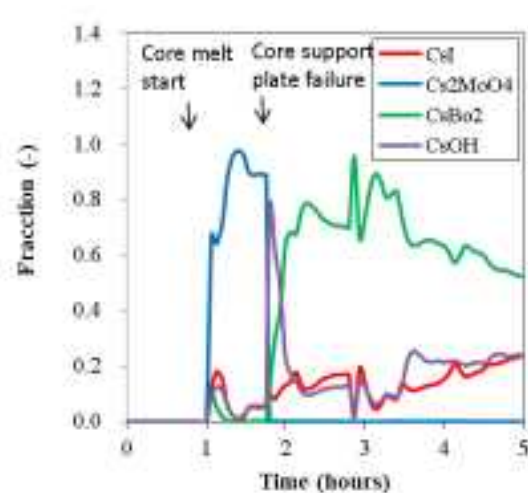


図 3.5.3(b) 代替統計モデルから計算された
FP 振り分け (セシウム化学種、蒸気ドーム)

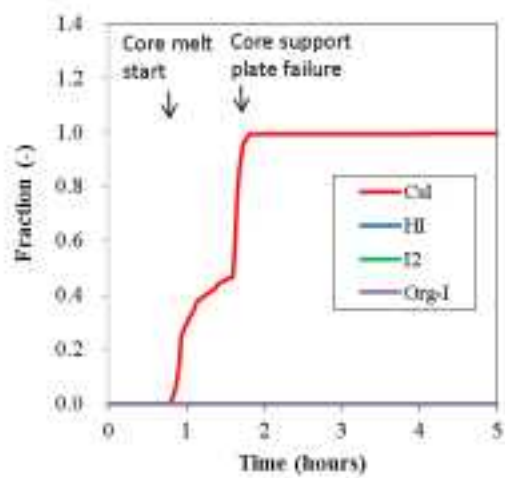


図 3.5.4 (a) S/C 内ヨウ素分布
(FP 化学なし)

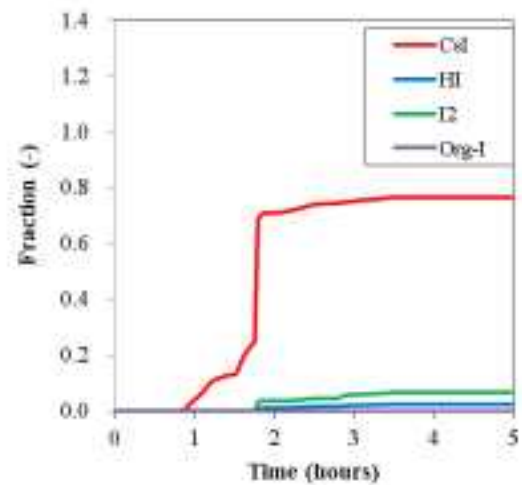


図 3.5.4 (b) S/C 内ヨウ素分布
(FP 化学あり)

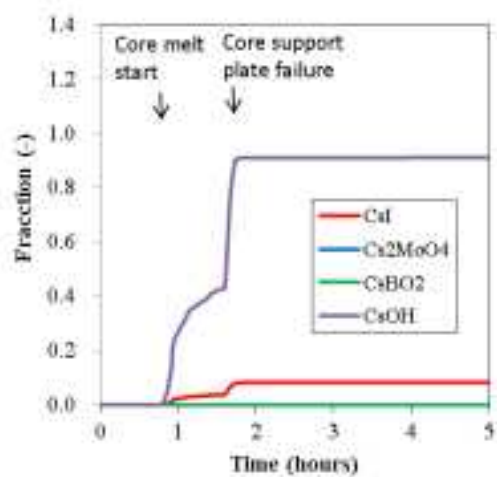


図 3.5.5 (a) S/C 内セシウム分布
(FP 化学なし)

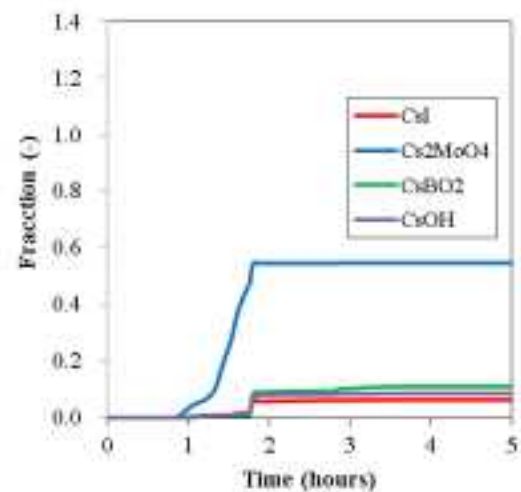


図 3.5.5 (b) S/C 内セシウム分布
(FP 化学あり)

4. おわりに

本事業においては、シビアアクシデント時ソースターム評価手法の高度化を図り、規制判断等に活用できる技術的知見を取得することを目的に、BWRの原子炉冷却系内におけるFP（主にヨウ素及びセシウム）化学に及ぼす B_4C 制御材の影響や生成された化合物の移行挙動に着目した実験及び解析を実施する。今年度の事業では、照射済み燃料から放出されるFPの化学形や移行挙動に関する総合的な実験のデータを入手し、これを補完する基礎実験を実施するとともに、原子炉冷却系内のFP化学計算機能をTHALES2コードに導入して試解析を行った。主な成果は以下のとおりである。

4.1 FP化学及び移行に係わる実験

シビアアクシデント条件におけるFP放出・移行を再現することが可能なフランス原子力・代替エネルギー庁（CEA）のVERDON装置を用いて、FP放出・移行に係わる総合的な実験（VERDON-5実験）を平成27年度に実施した。この実験では、ホウ酸水を添加した水蒸気雰囲気下における高燃焼度 UO_2 燃料の加熱実験により、BWR制御材の酸化により生成されるホウ素化合物がFPの化学的挙動や気体状ヨウ素の生成挙動に与える影響に係わるデータが取得された。本年度はCEAが取りまとめたデータ速報を入手し、実験結果の解釈を進めるとともに解析に必要となる情報を整理した。なお、試験の最終報告書は2017年12月に入手する予定である。VERDON-2及びVERDON-5実験で得られたFP及びホウ素の沈着試料に対するX線回折測定、ラマン分光測定、化学分析計画を検討した。

シビアアクシデント解析コードに組み込む物理モデルの構築や改良に必要な基礎データを取得するために、日本原子力研究開発機構大洗研究開発センターの照射燃料試験施設（AGF）ホットセル内において、不活性雰囲気条件下での照射済み燃料からのFP放出及び移行挙動に関する実験を実施した。オンライン γ 線スペクトル測定及びガスクロマトグラフ分析より、セシウム等のFPの放出速度に関するデータを取得した。また、化学分析等に供するFP沈着試料等を準備した。

還元雰囲気におけるCsIの沈着物と B_2O_3 の蒸気種／エアロゾルとの固相－気相反応に着目した高温化学反応実験を非放射性のセシウム及びヨウ素を用いて実施した。平成27年度の実験ではCsI沈着物と B_2O_3 蒸気種との固相－気相反応により有意な量のヨウ素が再蒸発したことを示唆する結果が得られた。これらの挙動を検証するため、本年度の実験ではCsIの加熱保持時間を長くし、十分に再蒸発を生じさせることで B_2O_3 蒸気流入時のCsI再蒸発を抑制するようにし、これ以外の実験条件は平成27年度と同じとした。しかしながら、本年度の実験では、CsI実験において沈着物中のヨウ素が減少し、CsI+ B_2O_3 実験では沈着物中のヨウ素が減少しないという結果が得られ、平成27年度に示された傾向は再現されなかった。引き続きホウ素の影響を検討していくことが必要である。

4.2 FP化学及び移行に係わる解析

平成27年度に実施されたCsI+ B_2O_3 実験を対象としてVICTORIA2.0コードを用いた熱力学平衡計算を実施し、FP移行挙動に関する予測性能の妥当性評価を行った。しかし、熱力

学平衡計算では、平成 27 年度の実験結果により示唆された CsI 沈着物と B_2O_3 蒸気種の反応による沈着物中ヨウ素の有意な減少が再現されなかった。また、温度勾配管におけるホウ素の沈着量分布についても実験における傾向との一致が見られず、解析結果では高温領域に多くのホウ素が B_2O_3 化学種として沈着した。引き続き、ホウ素による CsI からのヨウ素離脱促進の機構解明を進める必要がある。

熱力学的平衡条件下の化学種予測精度について、熱力学平衡計算機能を有する VICTORIA2.0 コードおよび HORN コードによる比較検討を行った。熱力学平衡計算では、同じデータベースを用いた場合でも、コード内での平衡計算の取り扱い方法の違いにより数 10% 程度の差異が生じ得ることがわかった。

VERDON-5 実験はホウ素化合物を添加した水蒸気雰囲気下で実施されたが、これに先立ってホウ素添加なしで実施された VERDON-2 実験を対象として VICTORIA2.0 コードを用いた解析を実施した。約 300°C 以上の温度領域におけるセシウム移行挙動については熱力学平衡計算により精度よく評価できる可能性が示された。しかしながら、ヨウ素の移行挙動については熱力学平衡計算を用いた評価が難しく、熱力学平衡計算手法や解析条件の再検討、速度論の導入などが必要と考えられる。

ソースターム評価において原子炉冷却系内の FP 化学形を考慮するため、シビアアクシデント総合解析コード THALES2 に熱力学平衡計算機能を導入し、試解析を実施した。熱力学平衡計算モデルを直接 THALES2 コードに実装すると計算時間の大幅な増大を招くため、等価な結果を得られ、かつ、計算速度を損なうことのない代替統計モデルを構築し、THALES2 コードに導入した。さらに、格納容器内のヨウ素化学計算において原子炉冷却系内の FP 化学で取扱う全ての化学種を考慮するため、THALES2 コードの格納容器内ヨウ素化学計算モジュール KICHE のデータベースに化学反応を追加し、格納容器内の pH を計算する機能を拡張した。以上の高度化により FP 化学計算機能を強化した THALES2/KICHE を事故解析に適用し、コードの動作を確認した。本年度は動作確認を目的としたため代替統計モデルを構築する際のクラスタ数の制限値を 5 としたが、これを増やすことにより代替統計モデルの精度向上が可能である。

付録 A 代替統計モデルのパラメータ

500K	-----	本文掲載
700K	-----	A-1
900K	-----	A-6
1100K	-----	A-11
1300K	-----	A-16
1500K	-----	A-21
1700K	-----	A-26
1900K	-----	A-31
2100K	-----	A-36
2300K	-----	A-41
2490K	-----	A-46

表 A.1 温度 700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	4.103E-07	-5.023E-07	1.239E-06	-6.982E-08	-1.932E-07	-5.400E-06	4.342E-09
HI	6.794E-04	-1.624E-03	6.032E-03	-9.944E-05	-5.917E-05	-1.071E-02	2.973E-04
CsI	9.993E-01	1.624E-03	-6.033E-03	9.951E-05	5.937E-05	1.071E-02	-2.973E-04
CsBO ₂	7.031E-01	8.888E-03	4.967E-01	1.409E-01	-8.190E-01	4.856E-01	2.881E-02
CsOH	1.159E-05	3.420E-05	-1.021E-04	-2.047E-05	7.661E-05	3.098E-04	-8.310E-06
Cs ₂ MoO ₄	2.969E-01	-8.921E-03	-4.965E-01	-1.409E-01	8.189E-01	-4.859E-01	-2.880E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル	4.792E-01	7.345E-02	5.110E-01	1.961E-01	6.172E-03	9.061E-01	
共分散行列	1.233E-01	1.039E-03	3.087E-03	1.003E-02	-2.638E-04	6.315E-02	
	1.039E-03	7.914E-04	6.105E-04	-7.905E-05	-2.138E-05	-1.263E-03	
	3.087E-03	6.105E-04	1.536E-01	1.413E-02	-6.285E-05	1.051E-02	
	1.003E-02	-7.905E-05	1.413E-02	1.009E-01	7.464E-06	-9.587E-03	
	-2.638E-04	-2.138E-05	-6.285E-05	7.464E-06	1.922E-04	-4.751E-04	
	6.315E-02	-1.263E-03	1.051E-02	-9.587E-03	-4.751E-04	9.186E-01	
データ数	483						

表 A.2 温度 700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.303E-04	-2.600E-04	6.631E-04	1.405E-04	-3.273E-06	-2.864E-04	8.541E-05
HI	1.117E-01	-2.349E-01	1.614E+00	2.204E-01	-2.703E-03	-1.486E-01	5.550E-02
CsI	8.880E-01	2.352E-01	-1.615E+00	-2.205E-01	2.709E-03	1.489E-01	-5.558E-02
CsBO ₂	5.606E-01	-1.206E-01	-7.968E-01	-1.518E-01	4.470E-03	-5.132E-01	4.810E-02
CsOH	3.421E-03	9.846E-02	9.546E-01	-1.383E-01	1.615E-02	-9.276E-02	-8.641E-02
Cs ₂ MoO ₄	4.348E-01	2.238E-02	-1.467E-01	2.900E-01	-2.062E-02	6.064E-01	3.833E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		7.104E-01	7.100E-02	3.426E-01	6.015E+00	2.836E-01	6.650E-01
共分散行列		1.876E-01	-9.326E-04	-6.486E-02	-3.981E-01	-5.391E-02	-4.824E-02
		-9.326E-04	9.561E-04	4.016E-04	1.037E-02	-2.257E-03	4.500E-04
		-6.486E-02	4.016E-04	1.377E-01	2.219E-01	4.287E-02	-2.071E-02
		-3.981E-01	1.037E-02	2.219E-01	4.886E+00	1.223E-01	5.821E-01
		-5.391E-02	-2.257E-03	4.287E-02	1.223E-01	1.044E-01	-7.635E-03
		-4.824E-02	4.500E-04	-2.071E-02	5.821E-01	-7.635E-03	6.010E-01
データ数	38						

表 A.3 温度 700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.104E-05	-1.910E-04	8.940E-04	-4.279E-05	6.774E-05	-3.643E-05	1.153E-05
HI	6.666E-02	-2.992E-01	1.671E+00	1.401E-03	3.357E-02	1.192E-01	8.112E-03
CsI	9.333E-01	2.994E-01	-1.672E+00	-1.355E-03	-3.364E-02	-1.192E-01	-8.123E-03
CsBO ₂	7.915E-01	-9.598E-02	7.909E-01	7.683E-02	-2.053E-01	-8.989E-02	1.530E-02
CsOH	3.906E-04	-1.700E-05	-1.974E-03	-2.644E-04	1.984E-04	3.312E-04	-1.738E-05
Cs ₂ MoO ₄	2.081E-01	9.600E-02	-7.886E-01	-7.656E-02	2.051E-01	8.957E-02	-1.528E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		3.179E-01	8.024E-02	5.068E-01	6.711E-01	2.227E-01	2.563E+00
共分散行列		1.146E-01	-1.366E-03	1.199E-02	9.304E-02	9.490E-03	4.176E-01
		-1.366E-03	7.638E-04	6.779E-04	-5.730E-03	-2.932E-04	-1.192E-02
		1.199E-02	6.779E-04	1.588E-01	3.804E-02	1.266E-02	-3.666E-02
		9.304E-02	-5.730E-03	3.804E-02	1.649E+00	1.176E-02	6.021E-01
		9.490E-03	-2.932E-04	1.266E-02	1.176E-02	8.048E-02	-1.653E-01
		4.176E-01	-1.192E-02	-3.666E-02	6.021E-01	-1.653E-01	9.580E+00
データ数	189						

表 A.4 温度 700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.209E-04	-4.269E-04	1.675E-03	-1.758E-04	9.292E-05	-2.098E-03	4.961E-05
HI	3.228E-02	-2.509E-01	1.429E+00	1.003E-01	4.349E-02	-8.387E-01	3.274E-02
CsI	9.676E-01	2.513E-01	-1.430E+00	-1.002E-01	-4.358E-02	8.408E-01	-3.279E-02
CsBO ₂	3.134E-02	2.782E-02	-8.449E-02	-2.329E-02	-3.085E-03	1.447E-01	9.379E-03
CsOH	-2.031E-05	1.554E-03	-2.951E-03	-8.241E-04	1.020E-04	1.526E-04	-3.962E-05
Cs ₂ MoO ₄	9.687E-01	-2.937E-02	8.745E-02	2.412E-02	2.983E-03	-1.449E-01	-9.339E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.292E-01	7.706E-02	5.875E-01	4.269E+00	1.537E-02	5.199E-01
共分散行列		1.020E-01	2.359E-04	1.939E-02	9.299E-02	-6.994E-04	1.280E-02
		2.359E-04	9.192E-04	8.226E-04	-4.824E-04	-4.883E-05	8.764E-04
		1.939E-02	8.226E-04	1.639E-01	1.620E-01	6.246E-04	1.796E-02
		9.299E-02	-4.824E-04	1.620E-01	6.064E+00	-1.020E-02	1.290E-01
		-6.994E-04	-4.883E-05	6.246E-04	-1.020E-02	1.050E-03	-2.341E-03
		1.280E-02	8.764E-04	1.796E-02	1.290E-01	-2.341E-03	3.112E-01
データ数	144						

表 A.5 温度 700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HI	1.286E-03	-1.366E-03	-1.904E-03	-1.246E-04	1.001E-03	1.633E-03	-9.964E-05
CsI	9.987E-01	1.366E-03	1.904E-03	1.246E-04	-1.001E-03	-1.633E-03	9.964E-05
CsBO ₂	8.856E-01	-9.386E-02	-1.929E-01	-2.186E-02	-1.384E+00	-6.820E-02	4.180E-01
CsOH	5.777E-02	1.486E-01	9.760E-03	-1.228E-02	1.743E-02	-5.848E-02	-2.336E-01
Cs ₂ MoO ₄	5.659E-02	-5.471E-02	1.836E-01	3.414E-02	1.367E+00	1.267E-01	-1.843E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		7.332E-01	7.552E-02	5.332E-01	9.126E-02	2.492E-01	2.487E-01
共分散行列		1.666E-01	1.487E-03	-1.244E-02	-8.201E-03	-2.780E-02	3.678E-03
		1.487E-03	7.260E-04	1.561E-03	-3.763E-04	-4.182E-04	-1.768E-04
		-1.244E-02	1.561E-03	1.659E-01	4.844E-03	7.176E-03	2.642E-03
		-8.201E-03	-3.763E-04	4.844E-03	2.299E-02	9.852E-03	-2.201E-03
		-2.780E-02	-4.182E-04	7.176E-03	9.852E-03	9.456E-02	2.910E-02
		3.678E-03	-1.768E-04	2.642E-03	-2.201E-03	2.910E-02	5.477E-02
データ数		146					

表 A.6 温度 900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.519E-03	-8.425E-03	3.185E-02	-3.233E-03	1.859E-03	-4.044E-02	6.806E-04
HI	3.265E-02	-2.411E-01	1.361E+00	1.056E-01	4.258E-02	-8.886E-01	2.096E-02
CsI	9.648E-01	2.495E-01	-1.393E+00	-1.023E-01	-4.444E-02	9.291E-01	-2.164E-02
CsBO ₂	7.154E-02	-1.368E-02	7.476E-02	-1.754E-02	-1.195E-02	4.725E-01	5.264E-02
CsOH	-3.346E-04	4.443E-04	2.468E-03	-3.429E-04	1.081E-04	2.669E-03	1.934E-04
Cs ₂ MoO ₄	9.288E-01	1.324E-02	-7.721E-02	1.789E-02	1.185E-02	-4.751E-01	-5.284E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.321E-01	7.785E-02	5.880E-01	4.247E+00	1.625E-02	5.619E-01
共分散行列		1.009E-01	4.775E-04	1.881E-02	7.145E-02	-9.710E-04	3.103E-02
		4.775E-04	8.823E-04	5.779E-04	-1.169E-03	-6.744E-05	6.708E-04
		1.881E-02	5.779E-04	1.634E-01	1.636E-01	7.725E-04	7.830E-03
		7.145E-02	-1.169E-03	1.636E-01	5.977E+00	-1.256E-02	7.154E-02
		-9.710E-04	-6.744E-05	7.725E-04	-1.256E-02	1.156E-03	-3.241E-03
		3.103E-02	6.708E-04	7.830E-03	7.154E-02	-3.241E-03	4.006E-01
データ数	145						

表 A.7 温度 900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	9.863E-04	-3.178E-03	1.720E-02	1.124E-03	2.804E-04	-3.756E-03	1.222E-03
HI	1.771E-02	-1.784E-01	1.365E+00	6.987E-02	1.764E-02	-9.625E-02	2.481E-02
CsI	9.813E-01	1.816E-01	-1.382E+00	-7.099E-02	-1.792E-02	1.000E-01	-2.603E-02
CsBO ₂	4.422E-01	-5.917E-02	-6.869E-02	-1.520E-01	-5.928E-03	-2.694E-01	8.637E-02
CsOH	5.661E-02	1.516E-01	1.008E+00	-8.096E-02	-4.471E-03	-7.683E-02	-7.821E-02
Cs ₂ MoO ₄	5.006E-01	-9.231E-02	-9.327E-01	2.330E-01	1.040E-02	3.464E-01	-8.122E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.685E-01	7.185E-02	4.590E-01	3.684E+00	2.891E-01	4.913E-01
共分散行列		1.891E-01	-6.428E-04	-4.097E-02	-1.905E-01	-5.981E-02	-2.450E-02
		-6.428E-04	8.766E-04	7.491E-04	-1.753E-03	-7.507E-04	-1.842E-03
		-4.097E-02	7.491E-04	1.776E-01	-1.531E-01	4.010E-02	-2.131E-02
		-1.905E-01	-1.753E-03	-1.531E-01	8.944E+00	9.536E-02	8.423E-01
		-5.981E-02	-7.507E-04	4.010E-02	9.536E-02	9.584E-02	5.118E-03
		-2.450E-02	-1.842E-03	-2.131E-02	8.423E-01	5.118E-03	4.183E-01
データ数	76						

表 A.8 温度 900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.220E-06	-1.922E-05	8.908E-05	-3.272E-06	4.018E-07	-1.719E-04	3.130E-06
HI	5.462E-04	-1.880E-03	9.602E-03	-2.862E-04	-6.326E-05	-1.255E-02	4.702E-04
CsI	9.994E-01	1.899E-03	-9.691E-03	2.894E-04	6.285E-05	1.272E-02	-4.734E-04
CsBO ₂	7.761E-01	-2.207E-02	3.250E-01	8.738E-02	-7.183E-01	9.373E-01	4.776E-02
CsOH	5.965E-05	2.457E-05	-2.065E-04	-2.395E-05	1.200E-04	1.934E-03	-1.446E-05
Cs ₂ MoO ₄	2.238E-01	2.204E-02	-3.247E-01	-8.735E-02	7.182E-01	-9.392E-01	-4.774E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.805E-01	7.335E-02	5.064E-01	2.031E-01	5.489E-03	9.155E-01
共分散行列		1.235E-01	1.028E-03	3.794E-03	9.790E-03	-1.281E-04	6.081E-02
		1.028E-03	7.989E-04	7.595E-04	-2.896E-04	-2.614E-05	-1.135E-03
		3.794E-03	7.595E-04	1.512E-01	1.263E-02	-2.215E-04	8.772E-03
		9.790E-03	-2.896E-04	1.263E-02	1.076E-01	2.012E-04	-1.010E-02
		-1.281E-04	-2.614E-05	-2.215E-04	2.012E-04	1.453E-04	-1.787E-04
		6.081E-02	-1.135E-03	8.772E-03	-1.010E-02	-1.787E-04	9.334E-01
データ数	481						

表 A.9 温度 900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.602E-03	-3.728E-03	1.508E-02	-1.189E-03	1.877E-03	-4.152E-04	7.665E-05
HI	1.322E-01	-2.864E-01	1.517E+00	5.495E-04	5.255E-02	1.320E-01	-2.489E-03
CsI	8.662E-01	2.901E-01	-1.532E+00	6.436E-04	-5.443E-02	-1.316E-01	2.413E-03
CsBO ₂	9.658E-01	-4.209E-02	1.776E-01	2.697E-02	-1.137E-01	2.377E-02	-3.403E-03
CsOH	2.924E-04	-3.741E-04	-3.556E-03	-4.549E-05	7.995E-04	1.357E-03	2.060E-05
Cs ₂ MoO ₄	3.387E-02	4.246E-02	-1.740E-01	-2.692E-02	1.129E-01	-2.512E-02	3.383E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		2.844E-01	8.225E-02	5.074E-01	4.593E-01	2.065E-01	2.970E+00
共分散行列		1.174E-01	-1.351E-03	1.203E-02	8.784E-02	1.408E-02	5.691E-01
		-1.351E-03	7.146E-04	2.268E-04	-4.668E-03	4.687E-05	-1.857E-02
		1.203E-02	2.268E-04	1.498E-01	2.841E-02	8.130E-03	-3.623E-02
		8.784E-02	-4.668E-03	2.841E-02	1.513E+00	-2.060E-02	1.198E+00
		1.408E-02	4.687E-05	8.130E-03	-2.060E-02	8.491E-02	-1.559E-01
		5.691E-01	-1.857E-02	-3.623E-02	1.198E+00	-1.559E-01	1.112E+01
データ数	150						

表 A.10 温度 900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	7.297E-06	-7.493E-06	-1.024E-05	1.759E-07	3.142E-06	1.266E-05	-5.419E-06
HI	1.230E-03	-1.323E-03	-1.040E-03	1.773E-05	5.244E-04	2.292E-03	-9.581E-04
CsI	9.988E-01	1.330E-03	1.050E-03	-1.790E-05	-5.275E-04	-2.305E-03	9.635E-04
CsBO ₂	9.502E-01	-9.161E-02	-1.382E-01	-6.621E-03	-7.171E-01	5.556E-02	1.654E-01
CsOH	1.450E-02	7.201E-02	3.084E-02	2.225E-03	1.384E-02	-3.970E-02	-6.073E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.530E-02	1.960E-02	1.074E-01	4.397E-03	7.033E-01	-1.586E-02	-1.047E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.766E-01	7.497E-02	5.288E-01	1.068E-01	2.467E-01	3.640E-01
共分散行列		1.592E-01	1.592E-03	-9.273E-03	-1.942E-02	-1.546E-02	-1.061E-02
		1.592E-03	7.545E-04	1.665E-03	-3.479E-04	-7.168E-04	-4.270E-04
		-9.273E-03	1.665E-03	1.741E-01	-3.186E-03	1.783E-03	4.204E-03
		-1.942E-02	-3.479E-04	-3.186E-03	3.814E-02	7.982E-03	2.386E-02
		-1.546E-02	-7.168E-04	1.783E-03	7.982E-03	8.582E-02	2.601E-02
		-1.061E-02	-4.270E-04	4.204E-03	2.386E-02	2.601E-02	1.195E-01
データ数	148						

表 A.11 温度 1100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.225E-04	-2.323E-04	7.883E-04	-5.883E-05	1.797E-04	-1.187E-03	2.660E-05
HI	1.670E-03	-3.644E-03	1.374E-02	-8.509E-04	1.625E-03	-1.266E-02	5.869E-04
CsI	9.982E-01	3.876E-03	-1.453E-02	9.097E-04	-1.804E-03	1.385E-02	-6.135E-04
CsBO ₂	9.091E-01	-4.720E-02	2.062E-01	4.253E-02	-4.434E-01	1.057E+00	1.052E-02
CsOH	1.694E-04	-4.976E-06	-4.350E-04	-6.767E-05	2.391E-04	1.738E-03	-6.377E-06
Cs ₂ MoO ₄	9.077E-02	4.720E-02	-2.057E-01	-4.246E-02	4.431E-01	-1.059E+00	-1.051E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.783E-01	7.320E-02	4.939E-01	6.161E-02	7.435E-03	1.208E+00
共分散行列		1.313E-01	1.026E-03	-2.620E-03	3.374E-03	2.711E-05	1.085E-01
		1.026E-03	7.866E-04	4.504E-04	-8.972E-05	-2.399E-05	-2.966E-03
		-2.620E-03	4.504E-04	1.503E-01	3.240E-04	3.266E-04	9.011E-03
		3.374E-03	-8.972E-05	3.240E-04	1.071E-02	6.111E-05	2.056E-02
		2.711E-05	-2.399E-05	3.266E-04	6.111E-05	2.999E-04	1.361E-03
		1.085E-01	-2.966E-03	9.011E-03	2.056E-02	1.361E-03	2.106E+00
データ数		398					

表 A.12 温度 1100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	6.206E-03	-4.031E-02	1.997E-01	-9.544E-03	9.989E-03	-2.734E-01	3.047E-03
HI	4.466E-02	-2.026E-01	9.955E-01	1.235E-01	3.335E-02	-1.806E-01	4.925E-03
CsI	9.491E-01	2.430E-01	-1.195E+00	-1.140E-01	-4.334E-02	4.538E-01	-7.970E-03
CsBO ₂	1.154E-01	-2.632E-02	-1.846E-02	-1.087E-02	-1.973E-02	2.704E-01	1.053E-01
CsOH	-8.426E-04	-1.707E-04	1.989E-03	-5.688E-04	3.797E-04	7.112E-03	9.291E-04
Cs ₂ MoO ₄	8.855E-01	2.649E-02	1.650E-02	1.144E-02	1.935E-02	-2.775E-01	-1.062E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.446E-01	7.798E-02	5.768E-01	4.276E+00	1.181E-02	7.568E-01
共分散行列		1.050E-01	7.193E-04	1.443E-02	5.414E-02	-2.303E-04	4.703E-02
		7.193E-04	9.366E-04	1.370E-03	-3.079E-03	-9.811E-07	-4.740E-03
		1.443E-02	1.370E-03	1.605E-01	2.348E-01	3.103E-04	-2.978E-02
		5.414E-02	-3.079E-03	2.348E-01	5.941E+00	2.143E-03	-2.714E-01
		-2.303E-04	-9.811E-07	3.103E-04	2.143E-03	6.938E-04	-3.242E-03
		4.703E-02	-4.740E-03	-2.978E-02	-2.714E-01	-3.242E-03	7.978E-01
データ数	141						

表 A.13 温度 1100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	4.061E-02	-4.412E-02	1.119E-01	2.743E-03	2.119E-03	-4.878E-02	-1.266E-03
HI	7.897E-02	-2.123E-01	1.350E+00	9.064E-02	1.184E-02	-1.351E-01	1.947E-02
CsI	8.803E-01	2.565E-01	-1.462E+00	-9.338E-02	-1.395E-02	1.839E-01	-1.820E-02
CsBO ₂	4.584E-01	-2.018E-02	2.272E-01	-6.174E-02	-3.288E-02	-1.638E-01	1.329E-01
CsOH	1.001E-01	1.442E-01	9.950E-01	-9.159E-02	-7.874E-03	-3.636E-02	-9.706E-02
Cs ₂ MoO ₄	4.407E-01	-1.239E-01	-1.214E+00	1.533E-01	4.077E-02	2.003E-01	-3.591E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.884E-01	7.392E-02	4.476E-01	4.141E+00	2.882E-01	4.373E-01
共分散行列		2.188E-01	-3.084E-04	-2.076E-02	-4.472E-01	-6.041E-02	-3.224E-02
		-3.084E-04	9.959E-04	-2.566E-05	-6.922E-03	-9.508E-04	1.212E-04
		-2.076E-02	-2.566E-05	1.809E-01	-2.077E-01	4.427E-02	-8.244E-03
		-4.472E-01	-6.922E-03	-2.077E-01	9.914E+00	7.655E-02	8.605E-01
		-6.041E-02	-9.508E-04	4.427E-02	7.655E-02	1.063E-01	1.444E-02
		-3.224E-02	1.212E-04	-8.244E-03	8.605E-01	1.444E-02	2.940E-01
データ数	65						

表 A.14 温度 1100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	7.789E-05	-8.118E-05	-4.413E-05	-1.698E-05	8.648E-05	6.151E-05	-4.989E-05
HI	1.156E-03	-1.424E-03	-1.061E-03	5.371E-05	8.009E-04	2.004E-03	-5.639E-04
CsI	9.988E-01	1.505E-03	1.105E-03	-3.673E-05	-8.874E-04	-2.066E-03	6.138E-04
CsBO ₂	6.588E-01	8.108E-02	-1.263E-02	4.238E-03	-4.449E-01	3.588E-01	1.843E-01
CsOH	1.229E-02	4.040E-02	-4.256E-03	-7.831E-03	-1.134E-02	-9.417E-03	-2.772E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.289E-01	-1.215E-01	1.699E-02	3.596E-03	4.563E-01	-3.493E-01	-1.566E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.969E-01	7.293E-02	5.365E-01	4.531E-01	1.519E-01	3.691E-01
共分散行列		1.356E-01	1.333E-03	2.566E-03	-2.668E-02	-3.089E-04	3.787E-03
		1.333E-03	7.562E-04	1.503E-03	-1.547E-03	-3.391E-04	-3.312E-04
		2.566E-03	1.503E-03	1.716E-01	1.558E-02	-1.336E-04	2.767E-03
		-2.668E-02	-1.547E-03	1.558E-02	2.705E-01	-2.781E-02	3.090E-02
		-3.089E-04	-3.391E-04	-1.336E-04	-2.781E-02	6.289E-02	1.455E-02
		3.787E-03	-3.312E-04	2.767E-03	3.090E-02	1.455E-02	1.188E-01
データ数	264						

表 A.15 温度 1100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.241E-02	-2.398E-02	9.312E-02	-8.650E-03	1.005E-02	-2.974E-03	3.129E-04
HI	1.748E-01	-2.969E-01	1.219E+00	-1.214E-02	4.120E-02	1.139E-01	-2.515E-03
CsI	8.127E-01	3.209E-01	-1.311E+00	2.080E-02	-5.125E-02	-1.110E-01	2.203E-03
CsBO ₂	1.027E+00	-6.727E-02	-3.217E-01	5.867E-03	-8.025E-02	3.049E-02	1.189E-03
CsOH	2.710E-04	-7.762E-04	-6.957E-03	3.119E-04	2.039E-03	2.549E-03	1.909E-05
Cs ₂ MoO ₄	-2.773E-02	6.804E-02	3.287E-01	-6.178E-03	7.821E-02	-3.304E-02	-1.208E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		2.424E-01	8.541E-02	5.259E-01	4.696E-01	2.349E-01	2.616E+00
共分散行列		9.779E-02	-1.164E-03	1.343E-02	1.271E-01	2.364E-02	4.776E-01
		-1.164E-03	6.161E-04	8.626E-05	-3.987E-03	-6.093E-04	-1.295E-02
		1.343E-02	8.626E-05	1.405E-01	3.313E-02	5.503E-03	-2.798E-02
		1.271E-01	-3.987E-03	3.313E-02	1.489E+00	-1.792E-02	1.457E+00
		2.364E-02	-6.093E-04	5.503E-03	-1.792E-02	9.257E-02	-1.032E-01
		4.776E-01	-1.295E-02	-2.798E-02	1.457E+00	-1.032E-01	1.077E+01
データ数	132						

表 A.16 温度 1300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.035E-03	-1.617E-03	4.991E-03	-9.001E-05	1.269E-03	-5.869E-04	2.354E-04
HI	3.960E-03	-0.00666949	0.01837929	0.00021405	0.00406859	-0.00020634	1.468E-03
CsI	9.950E-01	8.287E-03	-2.337E-02	-1.240E-04	-5.338E-03	7.932E-04	-1.703E-03
CsBO ₂	7.238E-01	1.329E-02	2.553E-01	-1.250E-02	-4.285E-01	3.144E-01	2.137E-01
CsOH	9.475E-03	3.666E-02	2.962E-02	-4.540E-03	-8.515E-03	-4.366E-03	-3.472E-02
Cs ₂ MoO ₄	2.667E-01	-4.994E-02	-2.847E-01	1.704E-02	4.370E-01	-3.101E-01	-1.790E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.149E-01	7.423E-02	5.446E-01	4.142E-01	1.483E-01	3.562E-01
共分散行列		1.394E-01	1.197E-03	-9.056E-04	-3.008E-02	-1.632E-03	1.184E-02
		1.197E-03	7.343E-04	1.485E-03	-4.595E-04	-3.824E-04	4.146E-05
		-9.056E-04	1.485E-03	1.725E-01	2.095E-02	-1.515E-04	5.619E-03
		-3.008E-02	-4.595E-04	2.095E-02	2.280E-01	-2.426E-02	2.974E-02
		-1.632E-03	-3.824E-04	-1.515E-04	-2.426E-02	6.298E-02	1.206E-02
		1.184E-02	4.146E-05	5.619E-03	2.974E-02	1.206E-02	9.956E-02
データ数		252					

表 A.17 温度 1300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.958E-02	-1.033E-01	4.389E-01	-1.100E-02	2.430E-02	-7.615E-01	4.462E-03
HI	5.036E-02	-1.467E-01	6.595E-01	1.151E-01	2.011E-02	-1.227E-01	-4.978E-04
CsI	9.200E-01	2.500E-01	-1.098E+00	-1.041E-01	-4.440E-02	8.835E-01	-3.963E-03
CsBO ₂	1.344E-01	-6.230E-02	2.134E-01	4.308E-03	-2.542E-02	6.467E-01	1.328E-01
CsOH	-1.743E-03	-1.829E-03	5.663E-03	-9.279E-04	9.500E-04	2.767E-02	1.955E-03
Cs ₂ MoO ₄	8.673E-01	6.413E-02	-2.190E-01	-3.379E-03	2.447E-02	-6.743E-01	-1.348E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.400E-01	7.676E-02	5.576E-01	4.112E+00	8.917E-03	7.432E-01
共分散行列		1.034E-01	5.201E-04	1.640E-02	5.574E-02	2.261E-04	4.301E-02
		5.201E-04	9.565E-04	1.553E-03	1.064E-03	-2.272E-05	-3.904E-03
		1.640E-02	1.553E-03	1.580E-01	2.773E-01	2.945E-04	-2.218E-02
		5.574E-02	1.064E-03	2.773E-01	6.208E+00	8.159E-04	-1.794E-01
		2.261E-04	-2.272E-05	2.945E-04	8.159E-04	3.715E-04	-1.339E-03
		4.301E-02	-3.904E-03	-2.218E-02	-1.794E-01	-1.339E-03	7.677E-01
データ数	148						

表 A.18 温度 1300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.901E-03	-2.929E-03	7.102E-03	-4.972E-04	4.132E-03	-1.418E-02	3.104E-04
HI	7.946E-03	-1.409E-02	3.312E-02	-8.508E-04	1.462E-02	-4.673E-02	2.359E-03
CsI	9.902E-01	1.702E-02	-4.022E-02	1.348E-03	-1.875E-02	6.091E-02	-2.670E-03
CsBO ₂	9.495E-01	-3.032E-02	8.883E-02	2.275E-02	-3.186E-01	7.849E-01	7.833E-03
CsOH	3.359E-04	-3.413E-05	-5.551E-04	-7.962E-05	5.131E-04	3.341E-03	-1.934E-05
Cs ₂ MoO ₄	5.018E-02	3.036E-02	-8.827E-02	-2.267E-02	3.181E-01	-7.883E-01	-7.814E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.793E-01	7.373E-02	5.058E-01	5.881E-02	7.746E-03	1.144E+00
共分散行列		1.266E-01	1.040E-03	-3.695E-03	1.054E-03	-5.786E-05	1.275E-01
		1.040E-03	7.903E-04	2.575E-04	-5.788E-05	-3.382E-05	-1.088E-03
		-3.695E-03	2.575E-04	1.530E-01	1.355E-03	3.128E-04	2.737E-02
		1.054E-03	-5.788E-05	1.355E-03	9.516E-03	1.630E-04	1.871E-02
		-5.786E-05	-3.382E-05	3.128E-04	1.630E-04	3.213E-04	1.177E-04
		1.275E-01	-1.088E-03	2.737E-02	1.871E-02	1.177E-04	1.783E+00
データ数	381						

表 A.19 温度 1300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.115E-02	-6.424E-02	3.993E-01	-1.398E-02	2.298E-02	-5.885E-03	7.584E-04
HI	8.633E-02	-2.657E-01	1.587E+00	1.893E-02	2.343E-02	1.100E-01	1.355E-03
CsI	8.923E-01	3.300E-01	-1.984E+00	-4.962E-03	-4.640E-02	-1.041E-01	-2.111E-03
CsBO ₂	1.020E+00	-6.270E-02	-2.127E-01	-1.832E-03	-6.351E-02	3.207E-02	2.359E-03
CsOH	-2.103E-04	3.439E-04	-6.244E-03	5.919E-04	4.172E-03	4.439E-03	-1.003E-04
Cs ₂ MoO ₄	-1.983E-02	6.236E-02	2.190E-01	1.241E-03	5.934E-02	-3.651E-02	-2.259E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		2.403E-01	8.138E-02	4.986E-01	4.458E-01	2.243E-01	2.633E+00
共分散行列		9.116E-02	-9.607E-04	1.343E-02	1.165E-01	2.238E-02	4.488E-01
		-9.607E-04	7.058E-04	7.678E-04	-3.453E-03	-2.606E-04	-1.261E-02
		1.343E-02	7.678E-04	1.395E-01	4.088E-02	8.774E-03	-4.444E-02
		1.165E-01	-3.453E-03	4.088E-02	1.351E+00	-8.625E-04	1.254E+00
		2.238E-02	-2.606E-04	8.774E-03	-8.625E-04	8.862E-02	-1.195E-01
		4.488E-01	-1.261E-02	-4.444E-02	1.254E+00	-1.195E-01	1.022E+01
データ数	150						

表 A.20 温度 1300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	9.725E-02	-1.019E-01	2.420E-01	7.469E-03	4.089E-03	-1.055E-01	1.416E-03
HI	6.312E-02	-1.630E-01	1.046E+00	8.221E-02	1.009E-02	-1.067E-01	7.695E-03
CsI	8.395E-01	2.649E-01	-1.287E+00	-8.968E-02	-1.417E-02	2.122E-01	-9.116E-03
CsBO ₂	4.870E-01	9.206E-03	-6.365E-02	-1.026E-01	-4.982E-02	4.876E-04	1.656E-01
CsOH	5.365E-02	1.533E-01	1.131E+00	-1.067E-01	-6.001E-03	6.391E-02	-8.305E-02
Cs ₂ MoO ₄	4.587E-01	-1.624E-01	-1.061E+00	2.093E-01	5.584E-02	-6.429E-02	-8.258E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		7.053E-01	7.392E-02	4.466E-01	3.999E+00	2.778E-01	4.056E-01
共分散行列		2.140E-01	-1.155E-03	-2.742E-02	-4.465E-01	-5.717E-02	-2.635E-02
		-1.155E-03	9.851E-04	1.775E-04	-8.397E-03	-4.858E-04	-4.594E-05
		-2.742E-02	1.775E-04	1.778E-01	-1.679E-01	4.370E-02	-7.342E-03
		-4.465E-01	-8.397E-03	-1.679E-01	9.688E+00	9.480E-02	8.228E-01
		-5.717E-02	-4.858E-04	4.370E-02	9.480E-02	1.009E-01	1.724E-02
		-2.635E-02	-4.594E-05	-7.342E-03	8.228E-01	1.724E-02	2.843E-01
データ数	69						

表 A.21 温度 1500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	4.121E-03	-6.911E-03	4.600E-03	1.142E-03	8.454E-03	-3.011E-03	6.963E-03
HI	8.251E-03	-1.444E-02	2.377E-02	1.812E-03	1.239E-02	-9.973E-04	1.269E-02
CsI	9.876E-01	2.135E-02	-2.837E-02	-2.954E-03	-2.085E-02	4.008E-03	-1.965E-02
CsBO ₂	8.942E-01	-1.459E-01	4.993E-01	-6.479E-02	-3.685E-01	1.781E-01	2.419E-01
CsOH	6.963E-03	6.166E-02	4.840E-02	-2.499E-04	-4.200E-03	1.490E-02	-8.325E-02
Cs ₂ MoO ₄	9.878E-02	8.426E-02	-5.476E-01	6.504E-02	3.727E-01	-1.930E-01	-1.586E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.941E-01	7.504E-02	5.817E-01	3.033E-01	1.674E-01	3.187E-01
共分散行列		1.541E-01	1.652E-03	-1.228E-02	-2.584E-02	-1.136E-02	1.889E-02
		1.652E-03	7.303E-04	1.582E-03	-8.682E-04	-1.162E-04	-5.550E-05
		-1.228E-02	1.582E-03	1.801E-01	3.900E-02	-1.626E-03	-1.768E-03
		-2.584E-02	-8.682E-04	3.900E-02	1.735E-01	-1.324E-02	2.484E-02
		-1.136E-02	-1.162E-04	-1.626E-03	-1.324E-02	6.761E-02	1.420E-02
		1.889E-02	-5.550E-05	-1.768E-03	2.484E-02	1.420E-02	7.927E-02
データ数	221						

表 A.22 温度 1500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.109E-01	-1.839E-01	4.042E-01	-4.202E-02	4.748E-02	-1.546E+00	-3.813E-03
HI	7.257E-02	-1.054E-01	2.287E-01	6.869E-02	1.477E-02	-1.887E-02	-3.085E-03
CsI	8.165E-01	2.893E-01	-6.327E-01	-2.667E-02	-6.226E-02	1.563E+00	6.898E-03
CsBO ₂	3.088E-01	-1.214E-01	1.604E-01	3.266E-03	-5.025E-02	3.275E-01	1.560E-01
CsOH	-1.596E-04	-4.374E-03	-1.827E-03	1.824E-03	9.657E-04	6.748E-02	2.524E-03
Cs ₂ MoO ₄	6.914E-01	1.258E-01	-1.585E-01	-5.088E-03	4.928E-02	-3.948E-01	-1.586E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.101E-01	7.639E-02	5.254E-01	3.366E+00	8.003E-03	6.465E-01
共分散行列		8.591E-02	3.737E-04	1.715E-02	6.467E-02	2.370E-04	2.974E-02
		3.737E-04	9.133E-04	1.350E-03	1.884E-03	-1.802E-05	-2.816E-03
		1.715E-02	1.350E-03	1.470E-01	3.502E-01	1.939E-04	4.064E-03
		6.467E-02	1.884E-03	3.502E-01	6.666E+00	3.498E-03	2.391E-02
		2.370E-04	-1.802E-05	1.939E-04	3.498E-03	3.181E-04	-8.544E-04
		2.974E-02	-2.816E-03	4.064E-03	2.391E-02	-8.544E-04	5.719E-01
データ数	187						

表 A.23 温度 1500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.808E-02	-1.249E-01	6.039E-01	-2.613E-02	3.528E-02	-3.518E-02	1.478E-03
HI	1.346E-01	-2.508E-01	1.169E+00	1.624E-02	8.448E-04	3.019E-02	7.069E-03
CsI	7.772E-01	3.757E-01	-1.771E+00	9.883E-03	-3.612E-02	4.996E-03	-8.545E-03
CsBO ₂	1.015E+00	-4.827E-02	-1.764E-01	-2.138E-03	-5.309E-02	2.756E-02	2.850E-03
CsOH	-9.083E-05	-5.213E-04	-7.596E-03	8.187E-04	5.385E-03	4.099E-03	2.809E-05
Cs ₂ MoO ₄	-1.476E-02	4.879E-02	1.840E-01	1.320E-03	4.770E-02	-3.166E-02	-2.878E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		2.759E-01	7.956E-02	4.995E-01	3.487E-01	2.048E-01	2.805E+00
共分散行列		1.043E-01	-8.611E-04	1.395E-02	6.031E-02	9.286E-03	5.293E-01
		-8.611E-04	7.074E-04	5.121E-04	-2.566E-03	5.304E-05	-1.085E-02
		1.395E-02	5.121E-04	1.544E-01	2.541E-02	7.240E-03	-2.799E-02
		6.031E-02	-2.566E-03	2.541E-02	1.011E+00	-1.640E-02	1.056E+00
		9.286E-03	5.304E-05	7.240E-03	-1.640E-02	8.269E-02	-1.612E-01
		5.293E-01	-1.085E-02	-2.799E-02	1.056E+00	-1.612E-01	1.035E+01
データ数	167						

表 A.24 温度 1500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.472E-02	-3.453E-02	4.650E-02	-4.374E-03	4.097E-02	-1.568E-01	5.822E-03
HI	4.207E-02	-7.144E-02	1.037E-01	-2.206E-03	4.040E-02	-1.383E-01	1.905E-02
CsI	9.332E-01	1.060E-01	-1.501E-01	6.580E-03	-8.137E-02	2.951E-01	-2.487E-02
CsBO ₂	9.822E-01	-1.958E-02	4.358E-02	9.130E-03	-2.131E-01	5.295E-01	5.249E-03
CsOH	5.484E-04	-2.006E-05	-7.087E-04	-1.257E-04	1.286E-03	5.379E-03	-6.373E-05
Cs ₂ MoO ₄	1.729E-02	1.960E-02	-4.287E-02	-9.004E-03	2.119E-01	-5.349E-01	-5.186E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.665E-01	7.401E-02	5.090E-01	5.810E-02	6.614E-03	1.001E+00
共分散行列		1.218E-01	7.103E-04	-4.982E-03	-3.409E-04	-4.125E-05	8.052E-02
		7.103E-04	7.980E-04	2.985E-04	1.107E-05	-2.570E-05	-9.964E-04
		-4.982E-03	2.985E-04	1.484E-01	1.646E-03	-4.488E-06	1.747E-02
		-3.409E-04	1.107E-05	1.646E-03	8.715E-03	1.818E-04	1.874E-02
		-4.125E-05	-2.570E-05	-4.488E-06	1.818E-04	2.189E-04	-3.446E-04
		8.052E-02	-9.964E-04	1.747E-02	1.874E-02	-3.446E-04	9.317E-01
データ数	360						

表 A.25 温度 1500K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.080E-01	-2.091E-01	3.872E-01	2.063E-02	4.993E-03	-2.079E-01	2.177E-02
HI	8.638E-02	-1.506E-01	7.816E-01	7.356E-02	5.760E-03	-8.349E-02	-1.157E-03
CsI	7.054E-01	3.597E-01	-1.166E+00	-9.420E-02	-1.075E-02	2.915E-01	-2.062E-02
CsBO ₂	6.292E-01	-5.883E-02	-1.002E+00	-2.385E-01	-5.211E-02	1.107E-01	1.438E-01
CsOH	1.329E-02	1.768E-01	1.315E+00	-8.911E-02	-7.369E-03	1.224E-01	-4.669E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.573E-01	-1.179E-01	-3.111E-01	3.276E-01	5.949E-02	-2.330E-01	-9.712E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.658E-01	7.176E-02	3.786E-01	4.654E+00	2.980E-01	5.901E-01
共分散行列		1.900E-01	-1.113E-03	-2.725E-02	-1.049E-01	-4.986E-02	3.256E-02
		-1.113E-03	1.023E-03	1.699E-04	2.264E-03	-1.336E-03	1.083E-03
		-2.725E-02	1.699E-04	1.607E-01	4.282E-02	5.465E-02	4.794E-02
		-1.049E-01	2.264E-03	4.282E-02	7.753E+00	-6.509E-03	7.976E-01
		-4.986E-02	-1.336E-03	5.465E-02	-6.509E-03	1.056E-01	2.618E-02
		3.256E-02	1.083E-03	4.794E-02	7.976E-01	2.618E-02	7.434E-01
データ数	65						

表 A.26 温度 1700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.944E-01	-2.412E-01	2.460E-01	-3.562E-02	2.239E-01	-1.015E+00	3.181E-02
HI	1.475E-01	-2.321E-01	2.814E-01	-4.604E-03	6.847E-02	-9.573E-02	5.910E-02
CsI	6.580E-01	4.733E-01	-5.272E-01	4.022E-02	-2.923E-01	1.109E+00	-9.091E-02
CsBO ₂	9.981E-01	-1.048E-02	2.347E-02	1.809E-03	-1.001E-01	1.619E-01	1.235E-03
CsOH	2.656E-04	9.708E-05	5.535E-04	1.275E-05	2.234E-03	1.030E-02	-3.466E-05
Cs ₂ MoO ₄	1.675E-03	1.039E-02	-2.403E-02	-1.822E-03	9.789E-02	-1.722E-01	-1.201E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.020E-01	7.598E-02	5.022E-01	6.204E-02	6.683E-03	9.920E-01
共分散行列		1.089E-01	3.647E-04	-1.242E-04	-3.275E-03	-2.502E-04	6.001E-02
		3.647E-04	7.938E-04	2.949E-04	9.402E-05	-3.784E-06	-1.120E-05
		-1.242E-04	2.949E-04	1.421E-01	1.452E-03	-8.413E-05	2.279E-02
		-3.275E-03	9.402E-05	1.452E-03	9.591E-03	1.837E-04	6.552E-03
		-2.502E-04	-3.784E-06	-8.413E-05	1.837E-04	2.056E-04	2.302E-05
		6.001E-02	-1.120E-05	2.279E-02	6.552E-03	2.302E-05	8.881E-01
データ数		404					

表 A.27 温度 1700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.401E-01	-3.239E-01	3.025E-01	-9.242E-02	6.291E-02	-3.311E+00	1.607E-03
HI	1.145E-01	-9.252E-02	1.677E-01	3.955E-02	5.297E-03	7.843E-02	2.014E-03
CsI	5.455E-01	4.164E-01	-4.701E-01	5.287E-02	-6.821E-02	3.227E+00	-3.623E-03
CsBO ₂	4.375E-01	-1.568E-01	1.301E-01	1.021E-02	-7.107E-02	9.198E-01	1.886E-01
CsOH	5.353E-04	-5.495E-03	3.758E-03	1.799E-03	1.480E-03	1.096E-01	3.288E-03
Cs ₂ MoO ₄	5.619E-01	1.623E-01	-1.337E-01	-1.201E-02	6.959E-02	-1.029E+00	-1.919E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.108E-01	7.616E-02	5.461E-01	3.168E+00	6.000E-03	5.946E-01
共分散行列		7.847E-02	-3.847E-05	1.626E-02	3.308E-02	-1.051E-04	3.717E-02
		-3.847E-05	8.513E-04	8.727E-04	5.409E-03	-2.222E-05	-4.387E-04
		1.626E-02	8.727E-04	1.611E-01	2.476E-01	4.639E-05	4.055E-04
		3.308E-02	5.409E-03	2.476E-01	6.553E+00	1.404E-03	2.362E-02
		-1.051E-04	-2.222E-05	4.639E-05	1.404E-03	1.549E-04	-2.335E-04
		3.717E-02	-4.387E-04	4.055E-04	2.362E-02	-2.335E-04	4.301E-01
データ数	198						

表 A.28 温度 1700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.718E-01	-2.227E-01	4.941E-01	-6.897E-02	3.479E-02	-1.012E-01	7.450E-03
HI	1.944E-01	-2.098E-01	5.187E-01	1.206E-02	-2.515E-02	9.968E-03	1.580E-02
CsI	5.337E-01	4.325E-01	-1.012E+00	5.691E-02	-9.640E-03	9.118E-02	-2.325E-02
CsBO ₂	9.956E-01	-2.994E-02	-2.685E-02	-3.754E-03	-5.832E-02	3.510E-02	3.951E-03
CsOH	-1.666E-03	2.929E-04	-1.154E-02	1.836E-03	8.101E-03	6.153E-03	5.383E-05
Cs ₂ MoO ₄	6.067E-03	2.964E-02	3.840E-02	1.918E-03	5.022E-02	-4.126E-02	-4.005E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		3.765E-01	7.503E-02	5.162E-01	5.449E-01	2.508E-01	3.665E+00
共分散行列		1.337E-01	-8.279E-04	1.446E-02	3.794E-02	-7.206E-03	5.296E-01
		-8.279E-04	7.989E-04	6.125E-04	-4.839E-03	1.325E-03	-9.760E-03
		1.446E-02	6.125E-04	1.715E-01	3.677E-02	1.248E-02	-1.074E-01
		3.794E-02	-4.839E-03	3.677E-02	1.641E+00	-6.045E-02	1.161E+00
		-7.206E-03	1.325E-03	1.248E-02	-6.045E-02	8.138E-02	-3.506E-01
		5.296E-01	-9.760E-03	-1.074E-01	1.161E+00	-3.506E-01	1.210E+01
データ数	118						

表 A.29 温度 1700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.351E-02	-3.578E-02	6.726E-02	-3.602E-03	4.777E-02	-4.413E-03	4.066E-02
HI	2.822E-02	-4.230E-02	7.742E-02	-3.410E-03	3.310E-02	4.822E-03	4.381E-02
CsI	9.483E-01	7.808E-02	-1.447E-01	7.012E-03	-8.087E-02	-4.089E-04	-8.447E-02
CsBO ₂	9.659E-01	-7.794E-02	-8.621E-03	-5.763E-02	-2.716E-01	1.089E-01	1.328E-01
CsOH	9.595E-03	3.542E-02	9.068E-02	2.773E-03	9.501E-04	9.089E-03	-6.626E-02
Cs ₂ MoO ₄	2.447E-02	4.253E-02	-8.198E-02	5.486E-02	2.707E-01	-1.180E-01	-6.651E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.964E-01	7.514E-02	5.623E-01	2.011E-01	1.982E-01	3.386E-01
共分散行列		1.682E-01	1.423E-03	-1.352E-02	-1.376E-02	-2.526E-02	3.714E-02
		1.423E-03	7.430E-04	1.824E-03	-6.868E-04	-1.216E-04	-3.332E-05
		-1.352E-02	1.824E-03	1.807E-01	2.040E-02	-2.691E-03	-7.274E-03
		-1.376E-02	-6.868E-04	2.040E-02	8.942E-02	-8.721E-03	1.753E-02
		-2.526E-02	-1.216E-04	-2.691E-03	-8.721E-03	8.414E-02	1.379E-02
		3.714E-02	-3.332E-05	-7.274E-03	1.753E-02	1.379E-02	8.710E-02
データ数	196						

表 A.30 温度 1700K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	9.651E-02	-1.473E-01	5.254E-01	6.755E-02	1.696E-02	-1.553E-01	1.661E-02
HI	4.766E-02	-9.398E-02	4.233E-01	5.638E-02	8.069E-03	-3.602E-02	-4.988E-03
CsI	8.557E-01	2.413E-01	-9.477E-01	-1.239E-01	-2.503E-02	1.914E-01	-1.162E-02
CsBO ₂	6.377E-01	-5.525E-02	-8.508E-01	-2.390E-01	-6.049E-02	1.656E-01	1.435E-01
CsOH	2.666E-02	1.303E-01	7.503E-01	-1.214E-01	6.230E-03	1.604E-01	-2.542E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.356E-01	-7.498E-02	1.005E-01	3.604E-01	5.426E-02	-3.260E-01	-1.181E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		7.465E-01	7.273E-02	4.278E-01	3.834E+00	2.632E-01	4.914E-01
共分散行列		1.902E-01	4.807E-04	-1.238E-02	-3.061E-01	-5.744E-02	-1.084E-03
		4.807E-04	9.364E-04	1.042E-03	-4.855E-03	-1.272E-03	-1.850E-04
		-1.238E-02	1.042E-03	1.544E-01	-7.997E-03	3.392E-02	3.004E-02
		-3.061E-01	-4.855E-03	-7.997E-03	8.948E+00	1.073E-01	9.928E-01
		-5.744E-02	-1.272E-03	3.392E-02	1.073E-01	9.019E-02	3.335E-02
		-1.084E-03	-1.850E-04	3.004E-02	9.928E-01	3.335E-02	6.178E-01
データ数	84						

表 A.31 温度 1900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	4.438E-01	-3.728E-01	3.463E-02	-5.901E-02	3.381E-01	-1.659E+00	6.077E-02
HI	1.746E-01	-1.759E-01	5.016E-02	1.413E-02	1.862E-02	7.920E-01	6.728E-02
CsI	3.816E-01	5.488E-01	-8.474E-02	4.488E-02	-3.567E-01	8.663E-01	-1.281E-01
CsBO ₂	1.000E+00	-5.697E-03	1.017E-02	1.458E-03	-7.850E-02	1.238E-01	1.478E-03
CsOH	2.395E-04	9.624E-05	6.753E-04	-5.454E-05	3.372E-03	1.071E-02	-6.330E-05
Cs ₂ MoO ₄	-2.518E-04	5.601E-03	-1.085E-02	-1.403E-03	7.513E-02	-1.345E-01	-1.414E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.199E-01	7.601E-02	4.906E-01	7.266E-02	4.654E-03	9.954E-01
共分散行列		1.275E-01	3.954E-04	-1.909E-03	-2.487E-03	1.570E-05	5.436E-02
		3.954E-04	7.912E-04	4.811E-04	3.712E-05	-2.943E-06	-1.084E-04
		-1.909E-03	4.811E-04	1.408E-01	-4.978E-04	-2.048E-05	2.537E-02
		-2.487E-03	3.712E-05	-4.978E-04	1.362E-02	1.073E-04	2.737E-03
		1.570E-05	-2.943E-06	-2.048E-05	1.073E-04	9.626E-05	1.023E-03
		5.436E-02	-1.084E-04	2.537E-02	2.737E-03	1.023E-03	8.774E-01
データ数	411						

表 A.32 温度 1900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.909E-01	-2.227E-01	5.347E-01	4.954E-02	3.334E-02	-2.381E-01	2.753E-02
HI	6.413E-02	-8.563E-02	2.370E-01	2.949E-02	7.739E-03	-1.622E-02	-2.258E-03
CsI	7.448E-01	3.083E-01	-7.708E-01	-7.902E-02	-4.108E-02	2.544E-01	-2.528E-02
CsBO ₂	7.299E-01	-8.542E-02	-6.377E-01	-1.657E-01	-7.848E-02	1.452E-01	1.230E-01
CsOH	4.643E-02	1.157E-01	3.714E-01	-8.899E-02	1.346E-02	1.790E-01	-1.970E-02
Cs ₂ MoO ₄	2.236E-01	-3.027E-02	2.664E-01	2.547E-01	6.502E-02	-3.242E-01	-1.033E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		7.166E-01	7.249E-02	4.693E-01	3.469E+00	2.479E-01	4.892E-01
共分散行列		1.924E-01	9.056E-04	-3.773E-02	-2.631E-01	-5.172E-02	6.096E-04
		9.056E-04	9.203E-04	1.835E-04	-6.448E-03	-8.755E-04	-2.297E-04
		-3.773E-02	1.835E-04	1.667E-01	-1.118E-01	3.260E-02	1.891E-02
		-2.631E-01	-6.448E-03	-1.118E-01	9.109E+00	1.331E-01	1.062E+00
		-5.172E-02	-8.755E-04	3.260E-02	1.331E-01	8.597E-02	2.386E-02
		6.096E-04	-2.297E-04	1.891E-02	1.062E+00	2.386E-02	6.257E-01
データ数	96						

表 A.33 温度 1900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	1.627E-01	-2.374E-01	3.484E-01	-6.187E-03	8.862E-02	-1.340E-02	1.803E-01
HI	1.126E-01	-1.675E-01	2.600E-01	-3.564E-03	3.331E-02	-2.172E-03	1.281E-01
CsI	7.246E-01	4.050E-01	-6.077E-01	9.751E-03	-1.219E-01	1.557E-02	-3.083E-01
CsBO ₂	9.812E-01	-3.653E-02	-8.848E-02	-3.963E-03	-3.802E-02	2.653E-02	4.251E-02
CsOH	5.802E-03	3.313E-02	8.268E-02	2.143E-03	1.808E-02	-9.010E-03	-3.007E-02
Cs ₂ MoO ₄	1.298E-02	3.402E-03	5.807E-03	1.820E-03	1.993E-02	-1.752E-02	-1.244E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.256E-01	7.529E-02	5.376E-01	1.012E-01	2.848E-01	3.886E-01
共分散行列		1.559E-01	4.994E-04	-5.112E-03	-1.795E-02	-2.148E-02	-1.111E-02
		4.994E-04	7.477E-04	7.565E-04	-6.665E-04	3.247E-04	-7.902E-04
		-5.112E-03	7.565E-04	1.644E-01	-7.621E-03	-1.653E-03	-3.319E-03
		-1.795E-02	-6.665E-04	-7.621E-03	2.940E-02	5.983E-03	6.333E-03
		-2.148E-02	3.247E-04	-1.653E-03	5.983E-03	9.682E-02	3.072E-02
		-1.111E-02	-7.902E-04	-3.319E-03	6.333E-03	3.072E-02	1.230E-01
データ数	186						

表 A.34 温度 1900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	4.659E-01	-3.191E-01	5.343E-01	-8.419E-02	6.343E-02	-2.309E+00	7.645E-02
HI	1.061E-01	-6.563E-02	9.409E-02	3.305E-02	-9.281E-05	5.620E-01	2.418E-02
CsI	4.280E-01	3.847E-01	-6.279E-01	5.114E-02	-6.334E-02	1.745E+00	-1.006E-01
CsBO ₂	5.308E-01	-6.905E-02	1.783E-01	4.032E-03	-9.804E-02	1.002E+00	2.962E-01
CsOH	4.657E-03	-4.708E-03	2.753E-03	-5.762E-04	2.018E-03	1.005E-01	4.881E-03
Cs ₂ MoO ₄	4.645E-01	7.377E-02	-1.810E-01	-3.453E-03	9.603E-02	-1.102E+00	-3.011E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.710E-01	7.650E-02	5.892E-01	2.852E+00	5.743E-03	4.052E-01
共分散行列		1.133E-01	2.798E-04	2.291E-02	-1.023E-01	1.574E-04	1.346E-02
		2.798E-04	8.115E-04	1.284E-03	5.038E-03	1.730E-05	1.954E-04
		2.291E-02	1.284E-03	1.832E-01	1.381E-01	-9.117E-05	1.234E-02
		-1.023E-01	5.038E-03	1.381E-01	6.912E+00	1.721E-03	1.492E-01
		1.574E-04	1.730E-05	-9.117E-05	1.721E-03	1.510E-04	-4.050E-04
		1.346E-02	1.954E-04	1.234E-02	1.492E-01	-4.050E-04	1.255E-01
データ数	209						

表 A.35 温度 1900K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	5.582E-01	-2.297E-01	4.326E-01	-1.096E-01	3.308E-02	-2.758E-01	3.952E-03
HI	2.245E-01	-1.162E-01	1.226E-01	4.782E-02	-3.949E-02	-7.332E-02	1.505E-02
CsI	2.173E-01	3.459E-01	-5.552E-01	6.179E-02	6.412E-03	3.492E-01	-1.900E-02
CsBO ₂	9.945E-01	-6.253E-02	-3.143E-01	2.067E-03	-7.686E-02	1.020E-01	9.652E-03
CsOH	-6.416E-03	-1.503E-03	-3.855E-02	5.156E-03	9.900E-03	1.398E-02	7.064E-04
Cs ₂ MoO ₄	1.189E-02	6.403E-02	3.528E-01	-7.221E-03	6.696E-02	-1.160E-01	-1.036E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.082E-01	7.417E-02	4.921E-01	1.024E+00	1.488E-01	4.546E+00
共分散行列		1.348E-01	-4.764E-04	2.263E-02	-8.444E-03	8.293E-03	1.763E-01
		-4.764E-04	8.689E-04	1.809E-03	-3.258E-03	5.449E-04	-7.246E-03
		2.263E-02	1.809E-03	1.503E-01	7.311E-02	1.123E-02	-3.500E-02
		-8.444E-03	-3.258E-03	7.311E-02	2.448E+00	-7.638E-02	2.095E-02
		8.293E-03	5.449E-04	1.123E-02	-7.638E-02	5.344E-02	-9.184E-02
		1.763E-01	-7.246E-03	-3.500E-02	2.095E-02	-9.184E-02	1.067E+01
データ数	98						

表 A.36 温度 2100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	6.088E-01	-3.945E-01	-1.556E-01	-5.076E-02	3.220E-01	-2.063E+00	9.918E-02
HI	1.422E-01	-9.738E-02	-5.881E-02	2.145E-02	-1.964E-02	1.021E+00	6.613E-02
CsI	2.490E-01	4.918E-01	2.144E-01	2.931E-02	-3.024E-01	1.043E+00	-1.653E-01
CsBO ₂	1.001E+00	-5.023E-03	3.233E-03	3.155E-04	-6.620E-02	8.284E-02	2.295E-03
CsOH	3.311E-04	1.839E-04	1.575E-03	-1.269E-04	5.152E-03	2.688E-02	-3.122E-04
Cs ₂ MoO ₄	-1.078E-03	4.840E-03	-4.807E-03	-1.886E-04	6.105E-02	-1.097E-01	-1.982E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.204E-01	7.601E-02	4.931E-01	8.614E-02	5.267E-03	9.036E-01
共分散行列		1.257E-01	5.166E-04	-1.246E-03	-1.964E-03	-1.654E-04	5.254E-02
		5.166E-04	8.090E-04	5.366E-04	-1.089E-04	-2.107E-05	1.587E-03
		-1.246E-03	5.366E-04	1.397E-01	-7.697E-04	-7.950E-05	3.491E-02
		-1.964E-03	-1.089E-04	-7.697E-04	1.938E-02	2.538E-04	-2.080E-03
		-1.654E-04	-2.107E-05	-7.950E-05	2.538E-04	1.319E-04	2.802E-05
		5.254E-02	1.587E-03	3.491E-02	-2.080E-03	2.802E-05	6.134E-01
データ数	410						

表 A.37 温度 2100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.424E-01	-3.006E-01	1.151E-01	7.298E-02	7.400E-03	-7.007E-01	-1.555E-02
HI	8.571E-02	-2.439E-02	5.693E-02	3.907E-02	-1.735E-03	1.132E-03	-4.170E-03
CsI	7.184E-02	3.250E-01	-1.719E-01	-1.120E-01	-5.664E-03	6.995E-01	1.972E-02
CsBO ₂	3.577E-01	-8.454E-03	-3.079E-01	-8.396E-02	-4.030E-02	1.180E-01	1.141E-01
CsOH	-6.466E-02	8.821E-02	2.868E-01	-1.140E-01	1.973E-02	4.429E-01	1.677E-02
Cs ₂ MoO ₄	7.070E-01	-7.975E-02	2.115E-02	1.980E-01	2.057E-02	-5.610E-01	-1.308E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.193E-01	7.517E-02	5.625E-01	5.792E+00	1.151E-01	6.005E-01
共分散行列		1.293E-01	9.153E-05	-2.258E-03	-2.527E-02	9.515E-04	4.906E-02
		9.153E-05	1.028E-03	9.284E-04	4.367E-04	-1.213E-03	5.844E-04
		-2.258E-03	9.284E-04	1.949E-01	6.979E-02	1.482E-02	2.142E-02
		-2.527E-02	4.367E-04	6.979E-02	4.291E+00	-7.211E-03	1.808E-01
		9.515E-04	-1.213E-03	1.482E-02	-7.211E-03	6.073E-02	2.767E-02
		4.906E-02	5.844E-04	2.142E-02	1.808E-01	2.767E-02	4.982E-01
データ数	128						

表 A.38 温度 2100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	7.755E-01	-1.839E-01	2.598E-01	-8.510E-02	3.035E-02	-3.070E-01	-4.138E-03
HI	1.876E-01	-4.853E-02	-4.466E-02	5.356E-02	-4.094E-02	-2.192E-02	1.343E-02
CsI	3.681E-02	2.324E-01	-2.151E-01	3.155E-02	1.060E-02	3.289E-01	-9.289E-03
CsBO ₂	9.986E-01	-3.429E-02	-4.271E-01	-1.142E-03	-7.773E-02	7.965E-02	9.962E-03
CsOH	-7.147E-03	-6.437E-04	-4.053E-02	4.146E-03	1.195E-02	1.364E-02	8.214E-04
Cs ₂ MoO ₄	8.570E-03	3.493E-02	4.677E-01	-3.003E-03	6.578E-02	-9.329E-02	-1.078E-02
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.550E-01	7.187E-02	4.624E-01	1.027E+00	1.077E-01	3.799E+00
共分散行列		1.363E-01	-9.341E-04	1.696E-02	-3.562E-02	1.064E-02	2.829E-01
		-9.341E-04	7.775E-04	6.704E-04	-9.091E-04	4.822E-04	-3.179E-03
		1.696E-02	6.704E-04	1.364E-01	4.651E-02	8.997E-03	4.457E-02
		-3.562E-02	-9.091E-04	4.651E-02	2.026E+00	-5.847E-02	-2.444E-01
		1.064E-02	4.822E-04	8.997E-03	-5.847E-02	4.295E-02	1.970E-02
		2.829E-01	-3.179E-03	4.457E-02	-2.444E-01	1.970E-02	1.000E+01
データ数	134						

表 A.39 温度 2100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.508E-01	-3.853E-01	3.143E-01	1.803E-02	1.582E-01	-6.993E-01	4.275E-01
HI	7.071E-02	-8.536E-02	1.769E-02	2.054E-02	2.800E-02	-5.150E-02	1.096E-01
CsI	5.784E-01	4.707E-01	-3.317E-01	-3.857E-02	-1.862E-01	7.508E-01	-5.371E-01
CsBO ₂	6.376E-01	-1.221E-01	7.262E-01	-6.456E-02	-2.334E-01	5.744E-01	7.759E-01
CsOH	3.071E-02	1.201E-01	4.012E-02	-2.763E-02	7.929E-03	2.953E-01	-2.324E-01
Cs ₂ MoO ₄	3.316E-01	2.076E-03	-7.659E-01	9.219E-02	2.254E-01	-8.697E-01	-5.436E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.390E-01	7.739E-02	5.714E-01	9.644E-01	6.461E-02	2.083E-01
共分散行列		1.699E-01	7.459E-04	-5.853E-03	-8.184E-02	-9.362E-03	1.297E-02
		7.459E-04	7.641E-04	1.648E-03	7.780E-04	-1.268E-04	8.304E-04
		-5.853E-03	1.648E-03	1.840E-01	3.489E-03	-2.458E-03	1.178E-02
		-8.184E-02	7.780E-04	3.489E-03	6.814E-01	3.642E-02	4.074E-02
		-9.362E-03	-1.268E-04	-2.458E-03	3.642E-02	2.182E-02	1.943E-03
		1.297E-02	8.304E-04	1.178E-02	4.074E-02	1.943E-03	3.861E-02
データ数	153						

表 A.40 温度 2100K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	2.551E-01	-3.610E-01	4.727E-01	-8.744E-03	1.624E-01	2.479E-02	3.170E-01
HI	1.119E-01	-1.608E-01	2.184E-01	-2.915E-03	4.355E-02	1.808E-02	1.421E-01
CsI	6.329E-01	5.218E-01	-6.901E-01	1.166E-02	-2.059E-01	-4.288E-02	-4.591E-01
CsBO ₂	9.817E-01	-2.110E-02	-1.730E-02	-1.828E-03	-3.306E-02	1.116E-02	3.200E-02
CsOH	1.128E-02	1.994E-02	-1.166E-03	5.435E-04	2.624E-02	-4.064E-04	-2.536E-02
Cs ₂ MoO ₄	7.072E-03	1.161E-03	1.847E-02	1.285E-03	6.820E-03	-1.075E-02	-6.641E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.132E-01	7.547E-02	5.400E-01	9.305E-02	3.043E-01	4.020E-01
共分散行列		1.482E-01	4.801E-05	-1.056E-02	-1.432E-02	-1.830E-02	-6.399E-03
		4.801E-05	6.965E-04	6.367E-04	-4.299E-04	5.143E-04	-7.339E-04
		-1.056E-02	6.367E-04	1.665E-01	-6.716E-03	-4.499E-03	-3.878E-03
		-1.432E-02	-4.299E-04	-6.716E-03	2.775E-02	7.851E-03	7.552E-03
		-1.830E-02	5.143E-04	-4.499E-03	7.851E-03	1.012E-01	2.733E-02
		-6.399E-03	-7.339E-04	-3.878E-03	7.552E-03	2.733E-02	1.269E-01
データ数	175						

表 A.41 温度 2300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	7.075E-01	-3.212E-01	2.787E-02	-3.828E-02	2.651E-01	-1.658E+00	8.127E-02
HI	1.114E-01	-3.914E-02	-9.681E-03	2.066E-02	-3.845E-02	9.934E-01	4.321E-02
CsI	1.811E-01	3.604E-01	-1.816E-02	1.762E-02	-2.266E-01	6.652E-01	-1.245E-01
CsBO ₂	9.999E-01	-4.303E-03	4.129E-03	5.187E-04	-5.543E-02	4.224E-02	2.342E-03
CsOH	8.467E-04	2.018E-04	6.371E-04	-3.115E-04	7.988E-03	3.929E-02	-5.786E-04
Cs ₂ MoO ₄	-7.088E-04	4.101E-03	-4.766E-03	-2.072E-04	4.744E-02	-8.153E-02	-1.764E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.031E-01	7.519E-02	4.957E-01	9.300E-02	5.745E-03	9.385E-01
共分散行列		1.164E-01	2.828E-04	-1.977E-04	-8.747E-04	-2.583E-05	6.911E-02
		2.828E-04	8.250E-04	6.007E-04	-3.561E-05	-1.923E-05	1.536E-03
		-1.977E-04	6.007E-04	1.401E-01	-1.295E-03	-1.165E-04	1.959E-02
		-8.747E-04	-3.561E-05	-1.295E-03	2.216E-02	2.176E-04	-4.756E-03
		-2.583E-05	-1.923E-05	-1.165E-04	2.176E-04	1.532E-04	7.957E-05
		6.911E-02	1.536E-03	1.959E-02	-4.756E-03	7.957E-05	6.240E-01
データ数		395					

表 A.42 温度 2300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	9.133E-01	-2.145E-01	-3.079E-02	2.515E-02	8.202E-03	-5.727E-01	-7.493E-03
HI	7.348E-02	-1.617E-02	2.350E-02	2.275E-02	-2.052E-03	5.296E-02	-2.300E-03
CsI	1.316E-02	2.307E-01	7.336E-03	-4.790E-02	-6.149E-03	5.197E-01	9.793E-03
CsBO ₂	6.500E-01	-8.409E-02	-1.692E-01	-1.095E-01	-7.392E-02	1.226E-01	1.279E-01
CsOH	-6.971E-02	7.414E-02	2.092E-01	-1.178E-01	2.617E-02	4.732E-01	1.662E-02
Cs ₂ MoO ₄	4.197E-01	9.962E-03	-3.978E-02	2.273E-01	4.775E-02	-5.959E-01	-1.445E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.862E-01	7.667E-02	5.814E-01	5.796E+00	1.385E-01	6.902E-01
共分散行列		1.299E-01	-1.039E-04	6.919E-04	6.051E-02	-3.935E-03	5.201E-02
		-1.039E-04	9.742E-04	7.884E-04	-4.320E-03	-1.168E-03	6.725E-04
		6.919E-04	7.884E-04	1.981E-01	2.710E-03	1.203E-02	1.514E-02
		6.051E-02	-4.320E-03	2.710E-03	4.206E+00	-9.427E-02	-3.049E-02
		-3.935E-03	-1.168E-03	1.203E-02	-9.427E-02	7.091E-02	6.813E-03
		5.201E-02	6.725E-04	1.514E-02	-3.049E-02	6.813E-03	5.780E-01
データ数	129						

表 A.43 温度 2300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.380E-01	-1.106E-01	1.584E-01	-5.446E-02	2.354E-02	-2.260E-01	-3.407E-03
HI	1.577E-01	-2.314E-02	-1.084E-01	4.046E-02	-3.526E-02	3.692E-02	9.633E-03
CsI	4.330E-03	1.337E-01	-4.997E-02	1.400E-02	1.172E-02	1.891E-01	-6.226E-03
CsBO ₂	1.020E+00	-3.771E-02	-3.367E-03	-1.023E-02	-5.179E-02	2.823E-02	2.146E-03
CsOH	-7.810E-03	6.053E-04	-3.423E-02	3.291E-03	1.440E-02	1.492E-02	6.014E-04
Cs ₂ MoO ₄	-1.253E-02	3.711E-02	3.760E-02	6.940E-03	3.739E-02	-4.316E-02	-2.747E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.584E-01	7.113E-02	4.586E-01	8.928E-01	1.344E-01	3.781E+00
共分散行列		1.325E-01	-4.714E-04	2.029E-02	-8.457E-03	7.233E-03	2.524E-01
		-4.714E-04	8.179E-04	1.797E-03	-2.388E-03	4.629E-04	9.265E-05
		2.029E-02	1.797E-03	1.515E-01	2.344E-02	7.015E-03	8.074E-02
		-8.457E-03	-2.388E-03	2.344E-02	1.696E+00	-4.980E-02	4.193E-03
		7.233E-03	4.629E-04	7.015E-03	-4.980E-02	4.781E-02	-5.178E-02
		2.524E-01	9.265E-05	8.074E-02	4.193E-03	-5.178E-02	1.016E+01
データ数	133						

表 A.44 温度 2300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.923E-01	-4.342E-01	1.962E-01	3.237E-02	1.977E-01	-7.355E-01	6.720E-01
HI	5.483E-02	-6.707E-02	2.094E-02	2.269E-02	1.754E-02	-5.512E-03	1.120E-01
CsI	5.528E-01	5.013E-01	-2.169E-01	-5.505E-02	-2.152E-01	7.410E-01	-7.840E-01
CsBO ₂	6.709E-01	-1.619E-01	1.139E+00	-8.991E-02	-2.292E-01	6.605E-01	8.504E-01
CsOH	6.013E-02	1.144E-01	-8.348E-02	-1.817E-02	-4.831E-03	2.579E-01	-2.596E-01
Cs ₂ MoO ₄	2.690E-01	4.750E-02	-1.055E+00	1.081E-01	2.340E-01	-9.184E-01	-5.908E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.372E-01	7.617E-02	5.392E-01	9.910E-01	3.929E-02	1.859E-01
共分散行列		1.644E-01	6.787E-04	-3.612E-03	-3.853E-02	4.352E-04	1.606E-02
		6.787E-04	7.750E-04	1.147E-03	-5.588E-04	-3.195E-04	2.734E-04
		-3.612E-03	1.147E-03	1.699E-01	3.947E-03	-1.840E-03	9.721E-03
		-3.853E-02	-5.588E-04	3.947E-03	8.212E-01	5.463E-03	2.992E-02
		4.352E-04	-3.195E-04	-1.840E-03	5.463E-03	9.036E-03	-9.043E-04
		1.606E-02	2.734E-04	9.721E-03	2.992E-02	-9.043E-04	2.835E-02
データ数	165						

表 A.45 温度 2300K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.308E-01	-4.200E-01	3.831E-01	-2.116E-02	3.074E-01	8.329E-02	4.735E-01
HI	9.856E-02	-1.275E-01	1.094E-01	-5.385E-03	6.873E-02	3.312E-02	1.459E-01
CsI	5.706E-01	5.475E-01	-4.919E-01	2.655E-02	-3.761E-01	-1.164E-01	-6.193E-01
CsBO ₂	9.890E-01	-1.602E-02	1.669E-03	-6.306E-03	-4.108E-02	5.629E-04	3.164E-02
CsOH	7.409E-03	1.564E-02	-1.649E-02	5.028E-03	3.850E-02	5.295E-03	-2.744E-02
Cs ₂ MoO ₄	3.545E-03	3.816E-04	1.483E-02	1.279E-03	2.574E-03	-5.858E-03	-4.200E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.579E-01	7.777E-02	5.469E-01	6.435E-02	2.807E-01	3.673E-01
共分散行列		1.633E-01	2.560E-04	-1.565E-02	-1.068E-02	-2.648E-02	4.975E-03
		2.560E-04	6.554E-04	-3.867E-06	-1.214E-04	1.171E-04	-2.308E-04
		-1.565E-02	-3.867E-06	1.616E-01	-4.268E-04	-1.855E-03	7.197E-03
		-1.068E-02	-1.214E-04	-4.268E-04	1.259E-02	8.135E-03	2.039E-03
		-2.648E-02	1.171E-04	-1.855E-03	8.135E-03	1.040E-01	2.697E-02
		4.975E-03	-2.308E-04	7.197E-03	2.039E-03	2.697E-02	9.177E-02
データ数	178						

表 A.46 温度 2490K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 1)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	7.717E-01	-2.599E-01	3.964E-02	-2.853E-02	2.375E-01	-1.237E+00	6.432E-02
HI	9.202E-02	-1.579E-02	-1.185E-02	1.584E-02	-4.256E-02	8.733E-01	3.230E-02
CsI	1.363E-01	2.756E-01	-2.776E-02	1.270E-02	-1.949E-01	3.641E-01	-9.663E-02
CsBO ₂	9.992E-01	-4.574E-03	2.449E-03	4.968E-04	-5.090E-02	4.239E-02	2.539E-03
CsOH	1.567E-03	4.244E-04	-2.154E-03	-2.547E-04	1.107E-02	3.501E-02	-8.354E-04
Cs ₂ MoO ₄	-8.153E-04	4.150E-03	-2.948E-04	-2.420E-04	3.983E-02	-7.740E-02	-1.704E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.025E-01	7.508E-02	4.935E-01	9.755E-02	5.791E-03	9.315E-01
共分散行列		1.173E-01	3.053E-04	-1.275E-03	2.854E-03	-5.713E-05	6.612E-02
		3.053E-04	8.154E-04	5.027E-04	2.493E-05	-2.488E-05	1.960E-03
		-1.275E-03	5.027E-04	1.367E-01	-1.951E-03	-1.301E-04	2.226E-02
		2.854E-03	2.493E-05	-1.951E-03	2.516E-02	1.264E-04	-3.807E-03
		-5.713E-05	-2.488E-05	-1.301E-04	1.264E-04	1.617E-04	-1.093E-04
		6.612E-02	1.960E-03	2.226E-02	-3.807E-03	-1.093E-04	5.956E-01
データ数	396						

表 A.47 温度 2490K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 2)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.910E-01	-1.557E-01	-1.409E-01	1.278E-02	1.434E-02	-4.260E-01	1.210E-02
HI	6.550E-02	-8.771E-03	2.216E-02	1.486E-02	-2.892E-03	6.892E-02	-1.139E-03
CsI	4.353E-02	1.645E-01	1.187E-01	-2.764E-02	-1.145E-02	3.571E-01	-1.096E-02
CsBO ₂	9.275E-01	-1.228E-01	-4.024E-01	-1.655E-01	-9.535E-02	4.890E-02	1.332E-01
CsOH	-7.487E-02	2.243E-02	2.503E-01	-1.224E-01	3.665E-02	4.627E-01	5.310E-03
Cs ₂ MoO ₄	1.473E-01	1.003E-01	1.521E-01	2.879E-01	5.871E-02	-5.116E-01	-1.385E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.175E-01	7.506E-02	5.927E-01	5.846E+00	1.589E-01	7.413E-01
共分散行列		1.375E-01	-2.973E-04	-7.746E-03	-3.934E-02	-5.312E-03	6.777E-02
		-2.973E-04	9.459E-04	1.681E-03	1.161E-03	-1.273E-03	1.320E-03
		-7.746E-03	1.681E-03	2.023E-01	-1.146E-02	4.966E-03	7.867E-03
		-3.934E-02	1.161E-03	-1.146E-02	4.441E+00	-1.649E-01	-1.564E-01
		-5.312E-03	-1.273E-03	4.966E-03	-1.649E-01	7.475E-02	-7.296E-03
		6.777E-02	1.320E-03	7.867E-03	-1.564E-01	-7.296E-03	6.840E-01
データ数	124						

表 A.48 温度 2490K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 3)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	8.662E-01	-6.894E-02	7.985E-02	-3.317E-02	2.314E-02	-1.145E-01	-4.159E-03
HI	1.273E-01	-9.539E-03	-7.542E-02	2.837E-02	-2.887E-02	4.237E-02	8.161E-03
CsI	6.540E-03	7.847E-02	-4.423E-03	4.798E-03	5.727E-03	7.209E-02	-4.002E-03
CsBO ₂	1.024E+00	-2.238E-02	9.491E-02	-1.872E-02	-3.697E-02	-9.329E-04	-3.604E-04
CsOH	-5.023E-03	3.737E-03	-2.457E-02	1.584E-03	1.527E-02	1.044E-02	-3.425E-05
Cs ₂ MoO ₄	-1.927E-02	1.864E-02	-7.034E-02	1.714E-02	2.170E-02	-9.505E-03	3.947E-04
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		4.360E-01	7.077E-02	4.515E-01	9.488E-01	1.344E-01	3.644E+00
共分散行列		1.244E-01	-5.125E-04	2.003E-02	-5.016E-02	8.516E-03	3.030E-01
		-5.125E-04	8.241E-04	1.622E-03	-2.867E-03	5.458E-04	3.847E-04
		2.003E-02	1.622E-03	1.495E-01	8.126E-03	7.502E-03	9.365E-02
		-5.016E-02	-2.867E-03	8.126E-03	1.798E+00	-5.567E-02	-2.719E-01
		8.516E-03	5.458E-04	7.502E-03	-5.567E-02	4.725E-02	-4.777E-02
		3.030E-01	3.847E-04	9.365E-02	-2.719E-01	-4.777E-02	1.028E+01
データ数	138						

表 A.49 温度 2490K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 4)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	5.017E-01	-4.446E-01	-1.188E-01	2.995E-02	1.870E-01	-6.600E-01	6.529E-01
HI	5.700E-02	-5.078E-02	-4.442E-02	1.774E-02	7.559E-03	7.719E-02	8.183E-02
CsI	4.413E-01	4.954E-01	1.632E-01	-4.769E-02	-1.946E-01	5.828E-01	-7.348E-01
CsBO ₂	6.864E-01	-2.161E-01	1.228E+00	-1.053E-01	-1.989E-01	5.130E-01	9.478E-01
CsOH	7.546E-02	1.135E-01	-9.746E-04	-3.155E-02	-3.167E-03	6.104E-01	-2.756E-01
Cs ₂ MoO ₄	2.381E-01	1.027E-01	-1.226E+00	1.368E-01	2.021E-01	-1.123E+00	-6.722E-01
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		6.110E-01	7.700E-02	5.555E-01	1.119E+00	1.948E-02	1.886E-01
共分散行列		1.654E-01	-1.455E-04	4.369E-03	-3.862E-02	-1.218E-03	1.511E-02
		-1.455E-04	7.914E-04	7.514E-04	2.932E-03	-4.665E-05	4.324E-04
		4.369E-03	7.514E-04	1.721E-01	-2.304E-02	2.142E-03	1.096E-02
		-3.862E-02	2.932E-03	-2.304E-02	9.935E-01	-1.506E-03	3.139E-02
		-1.218E-03	-4.665E-05	2.142E-03	-1.506E-03	2.476E-03	-1.492E-03
		1.511E-02	4.324E-04	1.096E-02	3.139E-02	-1.492E-03	2.751E-02
データ数	153						

表 A.50 温度 2490K における代替統計モデルのパラメータ (クラスタ 5)

回帰変数							
出力	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
I	3.121E-01	-4.066E-01	6.477E-01	6.234E-03	3.260E-01	1.939E-01	5.305E-01
HI	6.578E-02	-8.967E-02	1.453E-01	3.017E-03	5.504E-02	5.119E-02	1.204E-01
CsI	6.221E-01	4.963E-01	-7.922E-01	-9.248E-03	-3.811E-01	-2.451E-01	-6.509E-01
CsBO ₂	9.845E-01	-2.072E-02	-4.521E-02	2.307E-04	-9.286E-02	4.012E-03	4.447E-02
CsOH	1.038E-02	2.103E-02	4.800E-02	-2.978E-05	8.698E-02	1.278E-03	-4.092E-02
Cs ₂ MoO ₄	5.147E-03	-3.172E-04	-2.787E-03	-2.008E-04	5.882E-03	-5.289E-03	-3.542E-03
重み関数の変数 (多変量正規分布及びクラスタのデータ数)							
平均値ベクトル		5.828E-01	7.873E-02	5.390E-01	6.610E-02	2.695E-01	3.494E-01
共分散行列		1.623E-01	7.451E-04	-1.828E-02	-9.512E-03	-2.867E-02	1.474E-03
		7.451E-04	6.780E-04	8.807E-05	-3.238E-04	-2.135E-04	-3.345E-04
		-1.828E-02	8.807E-05	1.651E-01	8.946E-04	5.991E-04	1.103E-02
		-9.512E-03	-3.238E-04	8.946E-04	1.304E-02	8.009E-03	9.079E-04
		-2.867E-02	-2.135E-04	5.991E-04	8.009E-03	1.009E-01	2.819E-02
		1.474E-03	-3.345E-04	1.103E-02	9.079E-04	2.819E-02	9.152E-02
データ数	189						

付録 B 出張報告

国内出張（1）

件名	日本原子力学会 2016 年秋の大会における口頭発表
出張先	久留米シティプラザ（福岡県久留米市）
期間	平成 28 年 9 月 7 日(水)～平成 28 年 9 月 9 日(金)
出張者	研究副主幹 1 名、研究員 1 名
概要	シビアアクシデント時のセシウム及びヨウ素の再蒸発に与えるホウ素の影響について、日本原子力学 2016 年会秋の大会にて下記の 2 件の口頭発表を行った。 [2G14] ソースターム評価手法の高度化に向けた FP 化学挙動の評価 (1)Cs 及び I の再蒸発挙動に与える B の影響評価実験 三輪 周平、品田 雅則、逢坂 正彦、杉山 智之、丸山 結（原子力機構） [2G15] ソースターム評価手法の高度化に向けた FP 化学挙動の評価 (2)Cs 及び I の再蒸発挙動に与える B の影響に係わる解析的検討 塩津 弘之、石川 淳、伊藤 裕人、杉山 智之、丸山 結（原子力機構）

国内出張（2）

件名	集中講義「知的情報処理の統計力学」出席
出張先	埼玉大学
期間	平成 28 年 8 月 30 日(火)～平成 28 年 8 月 31 日(水)
出張者	研究員 1 名
概要	本年度事業では、FP 化学組成データベースに基づいて代替統計モデルを構築し、シビアアクシデント総合解析コード THALES2 に組込むことから、代替統計モデル構築で用いる機械学習に関する最新知見を取得するため、埼玉大学で開催された集中講義に出席した。講師は京都大学・大関真之助教であった。 FP 化学組成データベースに基づいて構築する代替統計モデルにおいては、無限混合ガウスモデルに基づいて化学種のもル割合を予測する。このとき、データを表現する上で最適な無限混合ガウスモデルのクラスター数やパラメータ値(平均、標準偏差)は、データに基づいて機械学習することによって求められる。講義では、高精度の識別精度を持つことで知られる深層学習(Deep Learning)の基礎であるボルツマン機械学習、特徴量の本質を自動的に抽出する技術として知られるスパースモデリングの代表例である圧縮センシング、深層学習と圧縮センシングを統計力学の枠組みとマージさせた伝統的かつ普遍的な学問体系について解説された。

国内出張（3）

件名	日韓合同福島第一原子力発電所見学会への参加
出張先	1F 未来館（旧福島第二エネルギー館）（福島県双葉郡富岡町）
期間	平成 28 年 12 月 1 日(木)
出張者	研究員 1 名
概要	ソースターム評価技術の高度化において有効な福島第一原子力発電所(1F)の現状に関する最新知見収集のため、日本原子力学会熱流動部会が企画した 1F 見学会に参加した。 1F 未来館において、ソースターム評価の境界条件として重要となる震災時の設備被害状況等に関する情報を得た。また、1F サイトを見学により、廃炉作業の現状について知見を得た。

外国出張（1）

件名	FP 放出・移行実験 VERDON-5 に係る技術会議等への出席
出張先	フランス原子力・代替エネルギー庁（CEA）カダラッシュ研究所
期間	平成 28 年 5 月 31 日(火)～平成 28 年 6 月 5 日(日)
出張者	研究副主幹 2 名、研究員 1 名（仏駐在中）
概要	多機関国際協力の下で実施する FP 放出・移行実験 VERDON-5 の進捗を確認し、今後の追加分析項目を決定することを目的として、VERDON-5 実験プロジェクト管理委員会会合及び CEA カダラッシュ研究所との技術的打合せに出席した。また、放射線防護原子力安全研究所（IRSN）の研究者との議論を行い、FP 化学挙動に関する IRSN との今後の研究協力について検討した。 ・VERDON-5 実験プロジェクト管理委員会（Project Management Board : PMB）会合 CEA から 7 名、フランス電力公社（EDF）から 1 名、IRSN から 2 名、US-NRC から 1 名、JAEA から 3 名が出席した。平成 27 年 11 月 19 日に実施された VERDON-5 実験及び放出 FP 分析結果の速報が紹介された。また、追加分析項目の検討が行われた。 ・CEA との VERDON-5 実験に係る技術的議論 CEA から 5 名、JAEA から 3 名が出席した。JAEA が実施する VERDON-5 実験の解析に資するため、同実験の詳細条件及び結果に関する議論を行い、解析に必要となるホウ素放出速度データ等の詳細情報を入手した。また、FP 分析の条件等を検討した。 ・IRSN との研究協力に係る技術的議論 IRSN から 6 名、JAEA から 3 名が出席した。JAEA で進めている FP 化学挙動評価に係る研究を紹介し、今後の研究協力について議論を行った。

外国出張（2）

件名	THAI3 計画技術検討会議及び運営会議への出席
出張先	ドイツ フランクフルト
期間	平成 28 年 11 月 20 日(日)から平成 28 年 11 月 24 日(木)
出張者	研究首席 1 名
概要	OECD/NEA の THAI3（Thermal-hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine project, Phase 3）計画の技術検討会議及び運営会議に原子力規制庁の担当者とともに参加し、同計画において実施されるシビアアクシデント時の水素挙動やソースタームに係わる実験について、実験条件等に係わる技術的な検討を行なうとともに、計画のスケジュールや予算管理等、計画運営面に関する討議を行った。 今回の会合は、THAI-3 計画の実施機関である独ベッカーテクノロジー社があるフランクフルト近郊で開催され、同計画参加国のうちインド及びイギリスを除いた 13 ヶ国及び OECD/NEA 事務局から約 40 名が参加した（うち日本からの参加者は、原子力規制庁から 1 名、JAEA から 1 名）。

外国出張 (3)

件名	国際会議 NuMat2016 出席及びフランス原子力・代替エネルギー庁 (CEA) との技術打合せ
出張先	フランス モンペリエ
期間	平成 28 年 11 月 6 日(日)～平成 28 年 11 月 12 日(土)
出張者	研究副主幹 1 名
概要	NuMat は核燃料・材料に関する総合的な国際会議であり 2010 年から 2 年毎に開催されている。4 回目となる今回の会議においては、核分裂／核融合炉・サイクルに関連する燃料材料、モデリング等、計 8 つのトラックにおいて、基調講演 9 件、口頭発表 200 件以上、ポスター250 件以上の多数の発表がなされた。参加人数は約 480 名で、その内訳は欧州約 50%、アジア約 30%、北米約 15%、その他 5%であった。 出張者はシビアアクシデント時における FP 化学挙動に与える BWR 制御材の影響評価 (規制庁受託研究として実施) に関する研究発表を行った。また、各機関の報告から、今後の FP 挙動評価研究を促進していく上で参考となる実験や解析手法について情報を得た。 VERDON-5 実験の進捗及び今後の研究計画の確認のため、CEA と技術打合せを行った。昨年加熱試験で燃料から放出して装置系統内に沈着した FP について、化学形態等を評価するための沈着物の構造解析、化学分析等について議論した。

外国出張（4）

件名	OECD/NEA BIP3 及び STEM2 計画会議への出席
出張先	フランス OECD/NEA
期間	平成 29 年 1 月 30 日(月)～平成 29 年 2 月 3 日(金)
出張者	研究員 2 名（うち 1 名は仏駐在中）
概要	格納容器内のヨウ素挙動に関する OECD/NEA BIP3（Behaviour of Iodine Project, Phase 3）計画及びソースタームに関する同 STEM2（Source Term Evaluation and Mitigation project, Phase 2）計画の会議に出席し、FP 挙動に関する最新情報の収集を行った。また、STEM2 会議に付随して開催された解析ワークグループ（AWG）にて、JAEA でのソースターム研究活動について紹介した。 これらの会議には 11 カ国から計 26 名が参加した（うち日本からの参加者は、原子力規制庁から 1 名、JAEA から 2 名）。

外国駐在

件名	フランス放射線防護原子力安全研究所への駐在
出張先	フランス放射線防護原子力安全研究所
期間	平成 28 年 4 月 1 日(金)～平成 29 年 3 月 10 日(金)
出張者	研究員 1 名
概要	多機関国際協力の下で実施する FP 放出・移行実験 VERDON-5 に関する実験結果の整理、分析、解釈及び物理モデルの検討等を現地の研究者及び技術者とともに実施し、これを通して、ソースターム評価に係る共通課題の解決に向けて緊密な連携を図ることを目的として、同実験の参加機関の一つであるフランス放射線防護原子力安全研究所（IRSN）に駐在した。 駐在期間中に、VERDON-5 実験プロジェクト管理委員会（PMB）会合並びに OECD/NEA BIP3 及び STEM2 計画の会合に出席した。 なお、駐在は平成 27 年度事業からの継続であり、全駐在期間は平成 28 年 3 月 11 日(金)～平成 29 年 3 月 10 日(金)である。