

○説明

- 本ツールは、Microsoft EXCEL 2010 以降のバージョンでご使用ください。
※バージョンが古い場合、正しく動作しない場合があります。
- 本ツールは、予告なく更新、修正などを行うことがあります。
- ご利用の際にはマニュアルも併せて閲覧して下さい。
- 本ツールの使用に際する不具合等は、安衛研ホームページの「お問合せ」先へご連絡ください。

<https://www.jniosh.johas.go.jp/rule/contact.html>

本ツールは、労働安全衛生研究(多段階の伝熱を考慮した反応熱量計の時定数補正手法, <https://doi.org/10.2486/josh.JOSH-2023-0005-GI>, 早期公開)記載の理論に基づく等温条件での熱量計測定データに対する時定数補正ツールとなっています。

本ツール利用時には上記文献を参考文献として記載して頂けると幸いです。

ツールはヒーター校正法によって得られたヒートパルス測定データから最適な時定数を求める"ヒーター校正法解析"並びに熱量計測定データに対して時定数補正を実施する"時定数補正"の2つの Excel シートから構成されています。

○権利・免責

本ツールの著作権は独立行政法人労働者健康安全機構 労働安全衛生総合研究所が保持しています。

本ツールを使用して得られた結果について、著作権者は利用者に対していかなる保証をするものではありません。

利用者は自己の責任においてご使用ください。

利用者は測定条件や目的に合わせて本ツールを改変することが可能ですが、それによって生じた問題について、

著作権者は利用者に対していかなる保証をするものではありません。

使用者は、著作権法及び関連法規を遵守するとともに、営利目的の個人、法人、団体等が、利益を得る目的で本ツールを配布、

または他の製品と合わせて配布することは禁止します。

上記を承諾のうえご利用下さい

目次

1. 時定数算出ツールの使用方法
…p. 3
2. 時定数補正ツールの使用方法
…p. 7
3. 時定数算出・補正ツールに関する補足・解説
…p. 8

1. 時定数算出ツールの使用方法

本ツールはヒーター校正法から得られる伝熱遅れの影響を受けた矩形波より、多段階の伝熱を考慮した時定数の最適値を算出するツールとなっています。

【操作説明】

(1) 事前準備

本ツールでは Excel 機能の 1 つであるソルバー機能を利用します。そのため、事前にソルバーアドインがアクティブになっているか確認する必要があります。

なお、以下のソルバーアドインの有効化の確認方法は Excel の更新によって変更される恐れがございます。ご理解ください。

Excel の”ファイル”タブからオプションを選択し、”アドイン”タブ内のアクティブなアプリケーションアドインを確認してください。その中にソルバーアドインがない場合、管理 > Excel アドインを選択し、設定後に出てくる有効なアドイン一覧からソルバーアドインにチェックを入れ、OK を押してください。

アクティブなアプリケーションアドインにソルバーアドインが追加され、Excel の”データ”タブからソルバーを起動することができるようになれば、事前準備は終了となります。

(2) 測定データの準備

本ツールではヒーターなどによって発生させた矩形波(ヒートパルス)の発熱挙動を基に時定数の最適値の算出を実施する(ヒーター校正法)を想定してツールを作成しています。そのため、**事前に測定データを取得する必要があります**。ヒーター校正法の概略は本ツールの参考文献などをご確認ください。なお、現バージョンのデフォルト設定ではヒーターの ON ⇒ OFF ⇒ ON を 10 分 ⇒ 40 分 ⇒ 40 分で実施した場合の挙動が入力されています。

(2) データの入力

必要な入力項目(図 1 の Excel の入力部(黄色))とその補足を以下に記載します。

(a) 測定間隔

データの測定間隔を入力してください。デフォルト設定では 1s となっているため、他の条件でヒーター校正法を実施した場合は、Excel シート内のデータの最下部の長さを時間に合わせて延長させて利用してください。

(b) 時間 vs 発熱速度(測定値)

時間に対する測定された発熱速度のデータを入力してください。ベースラインが 0 から離れてしまっている場合は、必要に応じて**発熱速度の 0 点補正の欄に修正用の数字**を入力し

てください。なお、ノイズが小さく、矩形波の最大値で発熱速度が安定する様子が測定できている場合、0点補正時の最大発熱速度をヒートパルス高さとして利用することが可能です。

(c) 時間 vs 発熱速度(設定値)

時間に対する設定上のヒートパルスの発熱速度のデータを入力してください。また、必要に応じて発熱速度の0点補正の欄に修正用の数字を入力してください。現バージョンのデフォルト設定ではヒーターの ON⇒OFF⇒ON を 10分⇒40分⇒40分 で実施した場合の挙動が入力されており、ヒートパルス高さを入力することで自動的に設定上のヒートパルスの発熱速度が入力されるようになっています。

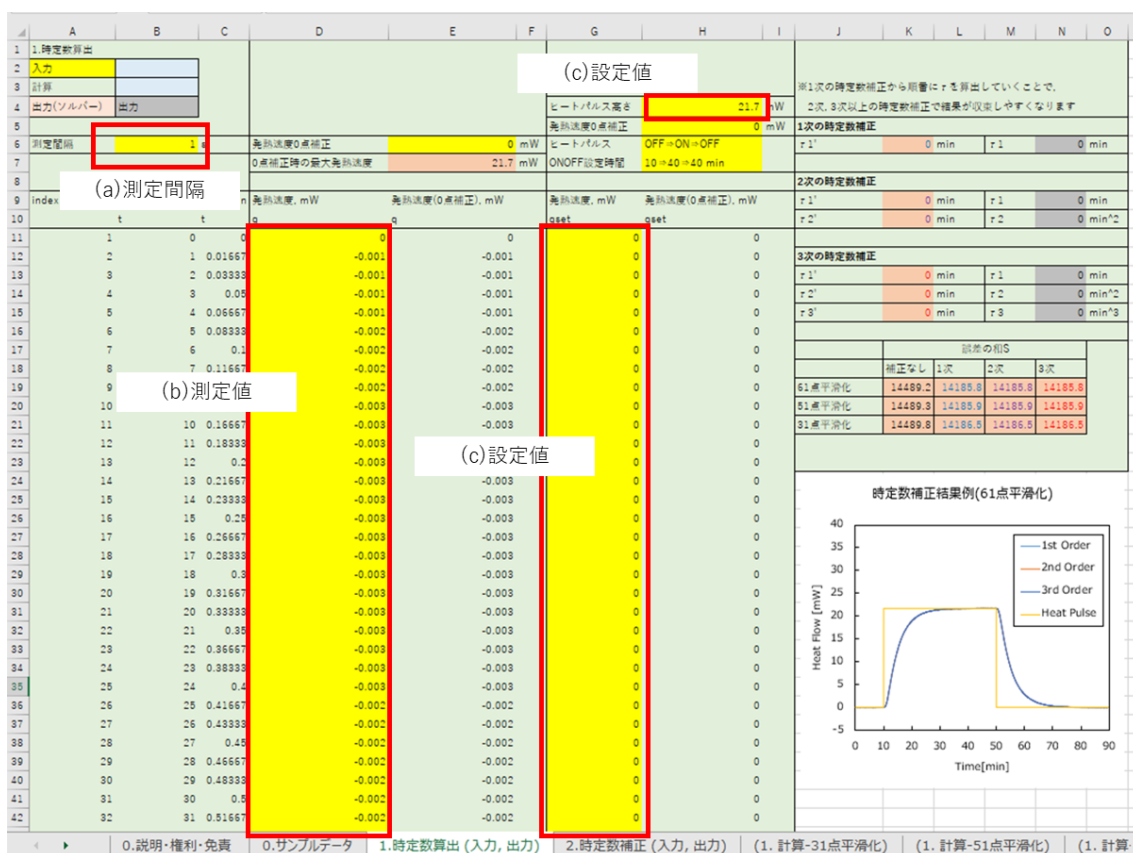


図 1 時定数算出時の Excel への事前のデータ入力

(3) ソルバー

最後に時定数 τ の最適値を算出していきます。本ツールでは 1~3 次の時定数補正に用いる τ に対応しています。次数が高いほど精度の向上が期待されますが、同時に計算負荷も上昇する問題があります。ソルバー計算には図 2 の領域を使用します。ソルバーによる時定数の最適値探索の手順を以下に示します。

(a) 仮の時定数の入力

計算に用いる時定数補正の次数における τ' に仮の時定数を入力します。この際、時定数の最適値からあまりに離れた値を選択した場合、異常な値で収束する場合がありますため、おおよそその値が分かっている場合は、その値を入力することで計算のやり直しを避けることができます。なお、現バージョンのデフォルト設定では $\tau 1'=7$ 、 $\tau 2'=1$ 、 $\tau 3'=0.1$ となっています。

図 2 時定数算出時のソルバー計算に用いる領域

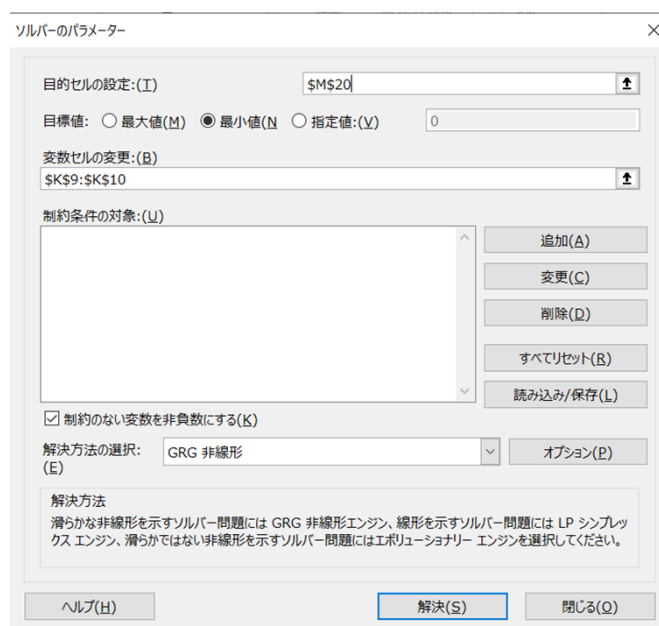


図 3 時定数算出時のソルバー条件の設定画面

(b) ソルバー計算

Excel の“データ”タブのソルバー計算を選択し、計算条件を設定します。図 3 のような画面で、目的セルを対象とする平滑化範囲かつ次数の誤差の和 S のセルを選択、目標値を最小値に設定、変数セルを対象とする次数での τ' を選択、GRG 非線形条件を選択して、解決を開始します。例として、61 点平滑化で 2 次の時定数を算出する場合、次の図 4 のセルを選択して、算出時定数を得ることとなります。

5	0 mW	1次の時定数補正				
6	OFF⇒ON⇒OFF	$\tau 1'$	4.384325 min	$\tau 1$	4.384325 min	
7	10⇒40⇒40 min					
8		2次の時定数補正		変数セル	算出時定数	
9	発熱速度(0点補正), mW	$\tau 1'$	4.227923 min	$\tau 1$	4.986205 min	
10	qset	$\tau 2'$	0.758282 min	$\tau 2$	3.205959 min ²	
11	0					
12	0	3次の時定数補正				
13	0	$\tau 1'$	4.256764 min	$\tau 1$	5.195854 min	
14	0	$\tau 2'$	0.665569 min	$\tau 2$	4.179531 min ²	
15	0	$\tau 3'$	0.273521 min	$\tau 3$	0.774931 min ³	
16	0					
17	0	誤差の和S				
18	0	補正なし	1次	2次	3次	
19	0	61点平滑化	14489.25	3124.39	1631.487	1340.827
20	0	51点平滑化	14489.29	3131.948	1672.727	1562.105
21	0	31点平滑化	14489.82	3154.761	1963.71	3304.343
22	0					

図 4 61 点平滑化時の 2 次の時定数算出時の選択セル

この際、収束しないまたは明確に異常な値が出た場合、(a)の仮の時定数を変更し、再度計算を実施してください。 $\tau 2'$ や $\tau 3'$ を求める場合、 $\tau 1'$ について先に 1 次の時定数で算出を行い、仮の時定数とすることで最適値の算出がスムーズとなります。

上記作業で得られた時定数を本ツールでの時定数補正や他の解析システムでの時定数補正に利用することが可能です。その際、時定数入力欄の単位を確認してご利用ください。

2. 時定数補正ツールの使用方法

本ツールは多段階の伝熱を考慮した条件での伝熱遅れの影響を微分法により補正する時定数補正を実施し、等温条件におけるより正確な発熱・吸熱挙動を求めるためのツールとなっています。

【操作説明】

(1) 測定データ・時定数の準備

目的とする反応などの発熱・吸熱曲線を取得します。本ツールでは 11 点の測定点を基にした平滑化を時定数補正と同時に実施しますが、ノイズがひどいようであれば本ツールのセル内の式を修正するほか、他の解析ソフトで前処理として平滑化処理を行う必要があります。

(2) データの入力

図 5 の黄色のセルが入力用のセルになっています。測定間隔、発熱・吸熱速度をセルに入力し、必要であれば発熱速度 0 点補正のセルに修正値を入力してください。また、目的とする次数の時定数補正に該当する $\tau 1 \sim \tau 3$ の項目に時定数を入力してください。入力後、目的とする次数の時定数補正の下のオレンジ色のセルに、補正後の発熱・吸熱速度が出力されるため、データをコピーし、解析に利用してください。デフォルト設定では 32000 点までの計算シートのみ用意していますが、数式の入力されたセルを下に同様の計算式で伸ばすことで、目的とする点数での計算が可能となっています。

A		B		C		D		E		F		G		H		I		J	
1	入力																		
2	出力																		
3																			
4																			
5																			
6																			
7																			
8	測定間隔		3 s		発熱速度0点補正		0 mW		1次の時定数補正		2次の時定数補正		3次の時定数補正						
9					0点補正時の最大発熱速度		579.8 mW		時定数		時定数		時定数						
10									$\tau 1$ [min]		$\tau 1$ [min]		$\tau 1$ [min]						
11	index		時間, min		時間, h		発熱速度, mW		発熱速度(0点補正), mW										
12	0		0		0		1.586		1.586										
13	1		0.05		0.000833		1.588		1.588										
14	2		0.1		0.001667		1.586		1.586		最大発熱速度, mW		最大発熱速度, mW		最大発熱速度, mW				
15	3		0.15		0.0025		1.582		1.582		2082.360308		3384.314996		4889.013103				
16	4		0.2		0.003333		1.582		1.582		時間, min		時間, min		時間, min				
17	5		0.25		0.004167		1.582		1.582		t		t		t				
18	6		0.3		0.005		1.589		1.589		0.25		0.25		0.25				
19	7		0.35		0.005833		1.584		1.584		0.3		0.3		0.3				
20	8		0.4		0.006667		1.584		1.584		0.35		0.35		0.35				
21	9		0.45		0.0075		1.584		1.584		0.4		0.4		0.4				
											0.45		0.45		0.45				

図 5 時定数補正時の Excel へのデータ入力

3. 時定数算出・補正ツールに関する補足・解説

(1) 計算内容

本ツールでは Excel の LINEST 関数による最小二乗法を用いた多項式近似を実施し、得られた多項式による平滑化と近似式の 1 階～3 階微分値を用いた時定数補正を同時に実行しています。

入力された値から時間 t から t^2 、 t^3 を算出、同様に入力された発熱速度 $q(t)$ と合わせて、 t から t^2 、 t^3 をそれぞれ x_1 、 x_2 、 x_3 、 $q(t)$ を y として LINEST 関数※1 を任意の平滑化範囲で実行しています。その後、INDEX 関数※2 で多項式近似式の係数を得て、任意の時間で次の式を計算することで平滑化後の $q(t)$ を得ることができます。

$$q(t) = a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_0 \quad (1)$$

※1

LINEST(既知の y , 既知の x) で

$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + \dots + a_0$ の多項式近似での定数 a を求めます

※2

INDEX(LINEST(), 番号) で

$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + \dots + a_0$ の a_0 から a_3 を抽出することができます

また $q(t)$ の微分値は次のように多項式近似から求められることができます。

$$\frac{dq(t)}{dt} = a_1 + 2a_2 t + 3a_3 t^2 \quad (2)$$

(2) 式の微分式および同様に求めた 2 階微分式を基に時定数補正を次式で実施します。ここで n は時定数補正の次数となります。

$$\hat{q}_n(t) = q(t) + \tau_1 \frac{dq(t)}{dt} + \tau_2 \frac{d^2 q(t)}{dt^2} + \tau_3 \frac{d^3 q(t)}{dt^3} + \dots + \tau_n \frac{d^n q(t)}{dt^n} \quad (3)$$

時定数補正における最適な補正值の算出では、任意の時定数 τ における $\hat{q}_n(t)$ と校正用のヒートパルスの設計値 $\hat{q}_{n, set}(t)$ の積分値が最小になる値を求める必要があります。そこで、ABS 関数により $\hat{q}_n(t) - \hat{q}_{n, set}(t)$ の絶対値を求め、さらに SUM 関数を用いることで誤差の和 S を求めています。

最後に、仮の時定数 τ を初期値として、 S が最小となる τ の条件を探索するために GRG 非線形(一般化簡約勾配)により、 τ の最適値を探索し、出力します。