目次

- Eexcelによる数値解析準備事項
- 0.0 Exce1ファイルの読み取り専用での立ち上げ手順
- 0.1 アドインのソルバーとデータ分析の有効化(使えるようにする)
- 第1回 線形方程式 -線形方程式 (実験式のつくり方:最小2乗法と多重回帰)-
- 1.1 荷重とバネの長さの実験式 (Excelファイルのファイル名に同じ、以下同様)
- 1.2 反応速度解析
- 1.3 灯油引火点とASTM蒸留点の相関
- 第2回 非線形方程式 -実験データの曲線あてはめと非線形方程式の数値解法-
- 2.1 圧力損失の流量による曲線あてはめ
- 2.2 中間領域の流動摩擦係数の計算
- 第3回 最適化 -最適化計算と線形計画法-
- 3.1 最適化勾配法
- 3.2 最適化反応次数の決定
- 3.3 線形計画法
- 第4回 微分・積分 -数値微分と数値積分(台形法、シンプソン則、(3/8)シンプソン則)-
- 4.1 微分法による反応次数決定
- 4.2 正規分布の数値積分
- 4.3 断熱反応解析
- 第5回 微分方程式の数値解法-常微分方程式(ルンゲクッタ法)、偏微分方程式(緩和法、陽解法、陰解法)-
- 5.1 ルンゲクッタ法による反応解析
- 5.2 緩和法による熱伝導の解析
- 5.3 固定床液分散の解析
- 第6回 確率論的シミュレーション手法-モンテ・カルロ法-
- 6.1 モンテカルロ法によるπの計算
- 6.2 モンテカルロ法による放射伝熱の解析

0.0 Exce1ファイルの読み取り専用での立ち上げ手順

1) 開示 Excel ファイルの知的所有権について

開示する数値解析の説明用の Excel ファイルには、改変ができないようにパスワードが設定してあります。しかし、読者の方には読み取り用のパスワードを開示しますので、Excel ファイルを読み取り専用で立ち上げてください。読み取り専用で立ち上げれば、Excel ファイルの数値解析の内容の解読は可能ですし、ファイル内の色々な試行操作ができます。

開示する Excel ファイルは著者に知的所有権があります。読者の方は自分だけが使用するファイルとして、数値解析の内容を習熟してください。コピーして第三者に配布しないこと。部分的なコピーも禁止します。

読者の方には内容を完全に理解してオリジナルの数値解析の Excel ファイルを作成することを期待していま す。新たに解析のデータを収集してオリジナルの解析をしたものは、読者のものです。

2) Excelファイルの立ち上げ手順

Excelファイルの立ち上げ手順は次のようになります。例えば、下記のようにエクスプロラーから、1.1 荷重とバネ長さの実験式.xlsxをクリックして立ち上げようとすると、

名前	更新日時	種類	サイズ
X 1.1荷重とバネ長さの実験式.xlsx	2017/02/17 13:44	Microsoft Excel	29 KB
X 1.2反応速度解析.xlsx	2017/02/17 16:25	Microsoft Excel	65 KB
1 .3灯油引火点とASTM蒸留点の相関.xlsx	2017/02/15 10:21	Microsoft Excel	39 KB

下記の読み取り用のパスワードの入力の窓が現れます。読み取り用のパスワード *.*の部分はファイル名の冒頭の番号です。パスワードは半角小文字英数字です。パスワードを入力して、OKをおしてください。



次に、下記の窓が開きます。パスワードの入力はせずに、読み取り専用(R)をクリックしてください。そうするとファイルは立ち上がります。

	パスワード	? ×			
ファイル '1.1荷重とバネ長さの美 瀬瀬満	€験' は次のユーザーに。	よって保護されています:			
上書き保存するにはパスワードが必要です。または読み取り専用で開いてください。 パスワード(<u>P</u>):					
読み取り専用(<u>R</u>)	OK	キャンセル			

立ち上がったファイルは完全に内容の解読可能です。アドイン等の操作も可能ですので、内容を十分に理解して ください。その上で、読者は新たなデータを収集して、自分自身で数値解析部分を打ち込んで、自分のオリジナ ルのExcelファイルを作ってください。

0.0 アドインのソルバーとデータ分析の有効化(使えるようにする)

1) ソルバーとデータ分析のアドインを有効化(使えるように)する手順

Excel ファイルを立ち上げ、メニューからファイルをクリック (で位置を示す。以下同様) する。

×ヨ ファイ	ア ち - ル ホー	<i>で</i> ~ ÷ ム 挿入	ページレイ	アウト 数3	式 データ	校閲	表示	B	ook1 - Exce	el	IIII			0		? 6	12 — 「 瀬瀬満	× • P
H6		▼ : ×	 , 	f_X														^
	Α	в	С	D	E	F	G	н	I	J	к	L	M	N	0	P	Q	
1																		
2																		
3																		
4																		-
	•	Sheet1	+															Þ
準備另	₹ 7													## E	□	-	-+ 1	00%



~			Excel のオプション	? ×
(ϵ)		基本設定 数式	Excel の基本オプションを設定します。	
情報	開く	文章校正保存	ユーザー インターフェイスのオブション ▼ 選択時にミニッール バーを表示する(M) ^①	
新規		言語 詳細設定	 ・	
開く	「取江したつにノック	リボンのユーザー設定	ヒントのスタイル(B): ヒントに機能の説明を表示する ▼ 新しいブックの作成時	
上書き保存	👝 OneDrive - 個人用	7862	次を気走フォントとして使用(N): 本文のフォント マ	
名前を付けて 保存	その他の Web サービス	C+2074 C>9-	フォント サイズ(Z): 11 ■ 新(ルジレートの原志のビュー(2): 標準ビュー ブックのシート数(S): 1 ・	
印刷			Microsoft Office のユーザー設定 ユーザー名(山): 演奏美	
共有 エクスポート	<u> </u>		 Office へのサインイン状態にかかわらず、米にこれらの設定を使用する(Δ) Office の掲載(<u>B</u>): 円と読録様様 ▼ 	
閉じる	場所の追加		Office デーマ(工): 白 ビ 記録時の認定	
アカウント オプション			国走で Excel で著(広張子の道明: 国本で Excel オスプレキシートを表示,補償するとめの間走のプログラムでない場合に通知する(工) Cのアグリケーションの記録時にスタート画面を表示する(出)	
				OK キャンセル

Excel オプション画面からアドインをクリックすると、内側がアドインの画面になる。このアドインの画面の下部の管理(A)でExcelアドインを選択して、設定をクリックする。展開画面のアドインからソルバーアドインと分析ツールにチェックを入れて、OKを押すと有効化される(使えるようになる)。

	Excel のオブシ	26V	? ×
本設定 式	Microsoft Office のアドインの表示と管理を行います	Ĵ.	
章校正	アドイン		
¥	名前・ アクティブはアプリケーションアドイン ジがにーアドイン ジがにット フタティブをはいアプリケーションアドイン Euro Currency Tools Microsoft Actioner San a 3 Microsoft Power Map for Excel 日代 (2014) プがワール - VBA INFO-INFO-INFO-INFO-INFO-INFO-INFO-INFO-	場所 C.Yricetfoffice15FLbHraryWSQLVERVSQLVERXALM C.Yricetfoffice15FLbHraryWSQLVERVSQLVERXALM C.Yce15FrootVoffice15FLbHraryWEUROTOOLXLAM C.Yce15FrootVoffice15FLbHraryWEUROTOOLXLAM C.Yricetfoffice15FLbHraryWAnalysisWATFVBAEN.XLAM C.YotWoffice15FLbHraryWAnalysisWATFVBAEN.XLAM Geffice15FLbHraryWSQLVERVSQLVER.XLAM Geffice15FLbHraryWSQLVERVSQLVER.XLAM	優加 Excel アドイン Excel アドイン マンパム 拡張(PFイン) マンパム 拡張(PFイン) マンパム シンパム ビンパン (PFイン) ビンパン (PFイン) ビンパン (PFイン) ビンパン (PFイン) (PF (PF (PF (PF (PF (PF (PF (PF (PF (PF

2) 有効化(使えるようになったかどうか)の確認

メニューからデータをクリックして、右端の分析の欄にソルバーとデータ分析が出てくれば、準備は完了です。

🚺 🔒 ち・ぐ・+			Book1 - Excel		? 🖬 – 🗆 🗅
ファイル ホーム 挿入 ページ レイアウト	・ 数式 データ 反	潤 表示			瀬瀬満 *
	 を続 	2↓ <u>ス</u> 2 ス↓ 並べ替え フィルター	 アリア 予 再適用 ア 詳細設定 		 ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・
外部データの取り込み	接続	並べ替えとフィル	1/9-	データ ツール	アウトライン 5 分析 -
1					

1.1 荷重とバネの長さの実験式

- 1)最小2乗法による実験定数の決定
 ①実験データ:実験式を決める実験データの表です。
 ②最小2乗法の各項の計算:前項実験データに基づく定数 a,b の各項の合計を算出しています。
 ③定数の計算:前項の各項の合計から、定数 a、b を計算しています。
 ④実験定数による計算(実験式プロット用):決定した定数 a、b でバネ長さの計算をして、この値をグラフ にプロットしています。
- 2) データ分析の回帰分析による実験定数の決定

①実験データ:実験式を決める実験データの表です。

この表に基づき、Excelのアドインのデータ分析機能の重回帰で、定数 a、b を求めます。 ②回帰分析の結果(重回帰の手順)

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。 データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。

すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で D50~D58 と入力 X 範囲で E50~E58 を選択する。

出力オプションで、一覧の出力先でC61を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? ×
 入力 Y 範囲(Y): 入力 X 範囲(X): □ ラペル(L) □ 有意水準(Q) 	◆D\$50:\$D\$58 ◆E\$50:\$E\$58 定数に 0 を使用(Z) 5 %	OK キャンセル ヘルプ(<u>H</u>)
出力オプション 一覧の出力先(<u>S</u>): 新規ワークシート(<u>P</u>): 新規プック(<u>W</u>) 	\$C\$61	
残差	 □ 残差グラフの作成(<u>D</u>) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>) 	
正規確率 正規確率グラフの作成(N) 		

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。



回帰分析の結果の切片とX値の係数の値が定数a、bに相当します。

③実験定数による計算(実験式プロット用):決定した定数 a、b でバネ長さの計算をして、この値をグラフ にプロットしています。

1.2 反応速度解析

ソルバーによる反応次数の決定
 ①基礎式:ここで使う基礎式です。
 ②実験データ:実験式を決める実験データの表です。
 このデータに基づき、反応次数を求めます。
 ③ソルバーでの求め方(ソルバーの手順)
 予め変数 D20 に反応次数の初期値を入力しておきます。Excelファイル中に示した変数nの値と目的
 セル H24 の値との関係図から分かるように、初期値は1.1~1.7(1は不可)を記入します。

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。

ソルバーをクリックすると、下記のソルバー画面がでてきます。

	ソルバーのパラメータ	_		×		
目的セルの設定:(I) \$H\$2	24]		
目標値: 〇 最大値(M) 💿 最小	値()) ○指定値:(⊻)	0				
<u>変数セル</u> の変更:(<u>B)</u> \$D\$20			E.]		
制約条件の対象:(U)						
			追加(<u>A</u>)			
			変更(<u>C</u>)			
			削除(<u>D</u>)			
			すべてリセット(<u>R</u>)			
		~	読み込み/保存(L)			
✓ 制約のない変数を非負数にする(上	<u><)</u>					
解決方法の選択:(E)	GRG 非線形	~	オプション(<u>P</u>)			
解決方法 滑らかな非線形を示すソルバー問題には GRG 非線形エンジン、線形を示すソルバー問題には LP シンプレッ クス エンジン、滑らかではない非線形を示すソルバー問題にはエボリューショナリー エンジンを選択してください。						
へルプ(<u>H</u>)	<	解決(<u>S</u>)	閉じる(<u>O</u>)			

目的セルの設定でH24を選択し、次に目標値は最小値を、そして変数セルの変更でD20を選択します。 解決を押すと、下記のソルバーの結果が表示され、変数セルD20の値が変化します。

ソルバーの結果		×		
ソルパーによって現在の解に収束されました。すべての制約条(満たしています。	牛を レポート			
● □ルバーの解の保持	解答 感度 条件			
○ 計算前の値に戻す 	□ アウトライン レポート			
QK ++77511	シナリオの保存			
ソルバーによって現在の解に収束されました。すべての制約	う条件を満たしています。			
ソルパーで反復計算を5回実行しましたが、目的セルが有意に移動しませんでした。収束 の設定値を小さくするか、開始点を変更してください。				

問題なければ、OK押すと、変数セル D20 の値が固定されます。

2)多重回帰(アウレニウスプロット)による頻度因子と活性化エネルギーの決定
①基礎式:ここで使う式です。
②実験データ:実験式を決める実験データの表です。
このデータに基づき、頻度因子と活性化エネルギーの決定をします。
③回帰分析の結果(重回帰の手順)
予め、反応次数は、前項で求めた値を入力しておき、Lnkと1/Tの表を作成しておきます。
メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。
データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。

すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で F51~F53 と入力 X 範囲で G51~G53 を選択する。

出力オプションで、一覧の出力先で C55 を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? ×
入力元 入力 Y 範囲(Y): 入力 X 範囲(X): □ ラペル(L) □ 有意水準(<u>0</u>)	\$F\$51:\$F\$53 \$G\$51:\$G\$53 章 定数に 0 を使用(Z) 95 %	ок キャンセル ヘルプ(出)
 出力オプション 一覧の出力先(S): 新規ワークシート(P): 新規ブック(W) 発差 	\$C\$55	
□ 残差(<u>R</u>) □ 標準化された残差(<u>T</u>)	 □ 残差グラフの作成(<u>D</u>) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>) 	
正規確率		

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。

	Microsoft Excel	
?	回帰分析出力範囲にデータがあります。上書きする場合は [OK] を押してください。[スプリング.xlsx]Sheet1!\$C\$61:\$K\$81	L
	この情報は役に立ちましたか?	

回帰分析の結果の切片とX値の係数の値が定数a、bに相当します。

回帰分析結果のa、bから頻度因子Aと活性化エネルギーEを求め(逆算し)ます。

1.3 灯油引火点のASTM蒸留点の相関(Exce1ファイル)

- 1)実験データ:実験式を決める実験データの表です。
 - この表に基づき、Excel のアドインのデータ分析機能の重回帰で、次式の定数 a、b、c を求めます。 $y = a + b x_1 + c x_2$
- 2) データ分析の回帰分析による引火点の初留点および5%留出点の相関式の決定

①回帰分析の結果(重回帰の手順)

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。

データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。

すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で D8~D84 と入力 X 範囲で E8~F84(初留点と5%留出点の両方の欄)を選択 する。

出力オプションで、一覧の出力先で C91 を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? ×
入力元 入力 Y 範囲(Y): 入力 X 範囲(X):	\$D\$8:\$D\$84 \$E\$8:\$F\$84 □ 定数に 0 を使用(Z) 95 %	0K キャンセル ヘノレブ(<u>H</u>)
出力オプション 一覧の出力先(<u>S</u>): 新規ワークシート(<u>P</u>): 新規ブック(<u>W</u>) 	\$C\$91	
 □ 残差(<u>R</u>) □ 標準化された残差(<u>I</u>) 正規確率 □ 正規確率グラフの作成(<u>N</u>) 	 □ 残差グラフの作成(<u>D</u>) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>) 	

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。

	Microsoft Excel
? •]帰分析出力範囲にデータがあります。上書きする場合は [OK] を押してください。[スプリング.xlsx]Sheet1!\$C\$61:\$K\$81
	OK キャンセル ヘルプ(H)
<u>20</u>	の情報は役に立ちましたか?

回帰分析の結果の切片とX値1とX値2の係数の値が定数a、b、cに相当します。

3)データ分析の回帰分析による引火点の97留出点および終点(100%留出点)の相関式の決定
 ①回帰分析の結果(重回帰の手順) 手順は前項に同じです。

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。 データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。 すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で D8~D84 と入力 X 範囲で Q8~R84(97% 留出点と100% 留出点の両方の 欄)を選択する。

出力オプションで、一覧の出力先で C118 を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

入力元 () 入力 Y 範囲(Y): \$D\$81:\$D\$84 ↓ 力 X 範囲(X): \$Q\$81:\$R\$84 □ ラベル(L) 定数に 0 を使用(Z) □ オ意水準(Q) 95 95 % ・ 小しプ(H) 出力オプション () ● 一覧の出力先(S): \$C\$118 ● 新規プック(W) () 残差 () 一残差(R) () 一環準化された残差(I) () 正規確率 ()		回帰分析	? ×
 出力オブション ● 一覧の出力先(S): \$C\$118 新規ワークシート(P): 新規ブック(W) 残差 一 残差(R) 一 残差(F) 一 残差(I) 一 観測値グラフの作成(D) 正規確率 □ 工場確率(L=3の(fr.ff.(D)) 	入力元 入力 Y 範囲(<u>Y</u>): 入力 X 範囲(<u>X</u>): ラベル(L) 有意水準(<u>0</u>)	\$D\$8:\$D\$84 \$Q\$8:\$R\$84 ■ 定数に 0 を使用(Z) 95 %	OK キャンセル ヘルプ(<u>H</u>)
□ 残差(R) □ 残差グラフの作成(D) □ 標準化された残差(I) □ 観測値グラフの作成(I)	出力オプション 一覧の出力先(<u>S</u>): 新規ワークシート(<u>P</u>): 新規ブック(<u>W</u>) 発差 	\$C\$118	
	 ス定 残差(<u>R</u>) 標準化された残差(<u>T</u>) 正規確率 工規確率 	 □ 残差グラフの作成(<u>D</u>) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>) 	

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。



回帰分析の結果の切片とX値1とX値2の係数の値が定数a、b、cに相当します。

2.1 圧力損失の流量による曲線あてはめ(Excelファイル)

- 1) べき級数による曲線あてはめ(カーブフィッティング)
 - ①実験データ(実測値):実験式を決める実験データの表です。

この表に基づき、Excelのアドインのデータ分析機能の重回帰で、べき級数での曲線あてはめをおこなう。 ②べき級数による曲線あてはめ(カーブフィッティング)のための作表

上式ののべき級数での曲線あてはめのために Excel のアドインのデータ分析機能の重回帰で、最大、3次のべき級数の定数 a、b、c、d を求めるための作表をします。

 $y = a + b x + c x^{2} + d x^{3}$

③曲線のあてはめ

- ③-1 1次式での回帰分析の結果 ここでは、線形のy = a + b xでのあてはめでa、b を求めます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。
 - データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。
 - すると下記の回帰分析の画面がでてきます。
 - 入力元で、入力Y範囲でD16~D19と入力X範囲でE16~E19の欄を選択する。
 - 出力オプションで、一覧の出力先で C25 を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? × (
- 入力元 入力 Y 範囲(<u>Y</u>): 入力 X 範囲(<u>X</u>): □ ラベル(<u>L</u>) □ 有意水準(<u>0</u>)	\$D\$16:\$D\$19 \$E\$16:\$E\$19 定数に 0 を使用(Z) 95 %	0K キャンセル ヘルプ(<u>H</u>)
出力オプション 一覧の出力先(<u>S</u>): 新規ワークシート(<u>P</u>): 新規ブック(<u>W</u>) 	\$C\$25	
 	 □ 残差グラフの作成(<u>D</u>) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>) 	

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。



回帰分析の結果の切片とX値1とX値2の係数の値が定数a、bに相当します。

③-2 3次式での回帰分析の結果 y = a + b x + c x² + d x³でのあてはめで a、b、c、d を求めます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。 データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。 すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で D16~D19 と入力 X 範囲で E16~G19 (x、x²、x³)の 3 つの欄を選択します。

出力オプションで、一覧の出力先で C50 を指定する。

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? ×
 入力 Y 範囲(Y): 入力 X 範囲(X): □ ラペル(L) □ 有意水準(Q) 	\$D\$16:\$D\$19 \$E\$16:\$G\$19 定数に0を使用(Z) 95 %	ОК キャンセル ヘルレプ(<u>H</u>)
出力オプション 一覧の出力先(<u>S</u>): 新規ワークシート(<u>P</u>): 新規ブック(<u>W</u>) 残差 ス株美(R) 	◆C\$50	
□	□ 72299907FB3(E) □ 観測値グラフの作成(<u>I</u>)	

先に実施した結果がある場合、下の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。

Microsoft Excel
回帰分析出力範囲にデータがあります。上書きする場合は [OK] を押してください。[スプリング.xlsx]Sheet1!\$C\$61:\$K\$81
OK キャンセル ヘルプ(H)
この情報は役に立ちましたか?

回帰分析の結果の切片とX値1,X値2,X値3の係数の値が定数a、b、c、dに相当します。

④ y=bx²での回帰分析の結果 ここでは、y=bx²(a=0) でのあてはめでbを求めます。
 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。
 データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。
 すると下記の回帰分析の画面がでてきます。
 入力元で、入力Y範囲でD16~D19と入力X範囲でF16~F19の欄を選択する。
 a=0で原点をと通る曲線なので、定数に0を使用する(Z)にチェックをいれます。
 出力オプションで、一覧の出力先でC77を指定する。
 OKを押すと、回帰分析の結果が印字されます。

	回帰分析	? ×
入力元 入力 Y 範囲(Y): 入力 X 範囲(X): うべい(L) 日 有意水準(Q)	\$D\$16:\$D\$19 \$F\$16:\$F\$19	ОК キャンセル ヘルプ(出)
 出力オプション ● 一覧の出力先(S): ● 新規ワークシート(P): ● 新規ブック(W) 残差 ■ 残差(R) ■ 標準化された残差(I) 正規確率 ■ 正規確率グラフの作成(N) 	\$C\$77 ○ 残差グラフの作成(D) ○ 観測値グラフの作成(I) 1)	
先に実施した結果があ	る場合、下の窓が現れるので、上書	きするときは OK をクリックする
	Microsoft Excel	×
② 回帰分析出力範囲にデータ この情報は役に立ちましたか	かがあります。上書きする場合は [OK] を押してください。[スプリング.xls OK キャンセル ヘルプ(H)	x]Sheet1!\$C\$61:\$K\$81

回帰分析の結果、定数はゼロを指定しているので、切片は0となっています。X 値1の係数の値が定数bに相当 します。

次項の2.2 中間領域の流動摩擦係数の計算(Excelファイル)には操作用のシート摩擦係数の計算(初 期)シートに加えて、最終の結果のシート摩擦係数の計算(最終))シートを添付して、内容を確認できるように しています。摩擦係数の計算(初期)シートで次の説明をトレースして、分からなくなったら、摩擦係数の計算(最 終))シートで確認してください。

2.2 中間領域の流動摩擦係数の計算(Excelファイル)

1) 逆補間法による流動摩擦係数の計算

①計算条件

ここに計算条件および逆補間法の流動摩擦係数の初期値をまとめています。関数は次式です。

f (x) =-4log {(e/d) /3.71+1.26/Rex^{1/2}} - 1/x^{1/2}=0 ②逆補間法による計算 表計算にまとめています。(表の内容は各自確認のこと)

kは計算のステップ数、 x_k は計算途中の流動摩擦係数の値、f(x)は計算途中の関数値です。 ϵ は計算ステップの計算値の相対変化(精度)を表しています。

x_kの列のセル E15 と E16 は初期値 x₀、 x₁です。E17 に数式=E16-(E15-E16)/(F15-F16)*F16 を打 ち込みます。そして、セル E17 をコピーして E18 から E25 までに貼り付けます。

f (x)の列のセルの F15 に数式=-4*LOG10(\$E\$7/3.71+1.26/(\$E\$6*SQRT(E15)))-1/SQRT(E15)を打ち込みます。そしてセル F15 をコピーして F16 から F25 までに貼り付けます。

 ϵ の列のセルの G16 に数式=ABS((E16-E15)/E16)を打ち込みます。そしてセル G16 をコピーして G17 から G25 までに貼り付けます。以上で作表は完成で、 $\epsilon < 0.0001$ になった時点で計算は終了です。 計算後、計算条件がR e \geq 4000およびR e f^{1/2} (e/d) <100で中間領域を判定しています。

2) ソルバーによる流動摩擦係数の計算

①計算条件

ここに計算条件および関数をまとめています。

②ソルバーでの求め方 (ソルバーの手順)

セル E40 に関数式=-4*LOG10(E32/3.71+1.26/(E31*SQRT(E33)))-1/SQRT(E33)を打ち込みます。また、 予め変数 E33 に初期値を入力しておきます。メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここで はソルバー)を表示させます。ソルバーをクリックすると、下記のソルバー画面がでてきます。

目的セルの設定で E40 を選択し、次に目標値は指定値をチェックして0をいれます。変数セルの変更で E33 を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変数セル E33 の値が変化します。

	ソルバーのパラメーク	9—	
目的セルの設定:(工)	\$E\$40		K
目標値: 🔵 最大値(<u>M</u>) 🗌	最小値(1000 指定値:(⊻)	0	>
変数セルの変更:(<u>B</u>)			
\$E\$33			1
制約条件の対象:(U)			
		^	追加(<u>A</u>)
			変更(<u>C</u>)
			削除(<u>D</u>)
			すべてリセット(<u>R</u>)
		~	読み込み/保存(L)
✓ 制約のない変数を非負数に	<u>する(K)</u>		
解決方法の選択:(<u>E</u>)	GRG 非線形	~	オプション(P)
解決方法 滑らかな非線形を示すソルバ- クス エンジン、滑らかではないす	-問題には GRG 非線形エンジン、 F線形を示すソルバー問題にはエオ	線形を示すソルバ・ ミリューショナリー エン	ー問題には LP シンプレッ ジンを選択してください。
へルプ(<u>H</u>)		解決(<u>S</u>)	閉じる(<u>0</u>)

問題なければ、OK押すと、変数セル E33 の値が固定されます。(結果の画面省略)

3.1 最適化勾配法

基礎式の項で目的関数、探索方向の移動方向ベクトル、移動距離と移動後の位置を示しています。 目的関数 f (x1、x2) = 3 (x1-2)²+(x2-1)² 移動方向ベクトル 導関数 g(x1) = 6 (x1-2) g(x2) = 2 (x2-1) 移動距離 h 移動後 x1^{k+1}=x1^k-hg(x1^k) x2^{k+1}1=x1^k-hg(x2^k)

1) 最急降下法

まずは、最急降下法の計算のために作表します。試行番号、変数 x 1 、 x 2 、導関数 g (x 1)、g (x 2) 目的関数 f (x 1 、 x 2)です。x 1 欄の cl2 セルと x 2 欄の dl2 に探索の開始位置の 4 と 6 を入れます。h は、ここでは0.3に固定します。g (x 1)の欄に=6*(Cl2・2)、g (x 2)の欄に=2*(Dl2・1)を打ち込みます。 f (x 1 、 x 2)の欄に=3*(Cl2・2)^2+(Dl2・1)^2 を打ち込みます。x 1 欄の cl3 セルと x 2 欄の dl3 に=Cl2・ Fl2*El2 と =Dl2-Gl2*El2 を打ち込みます。El2 から Hl2 をコピーして、El3 から Hl3 に貼り付けます。 その後。Cl3 から Hl3 までをコピーして、全体に貼り付けます。これで完成です。

2)移動距離最適化

完成した最急降下法の表全体の試行番号25までをコピーして移動距離最適化の表に貼り付けます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリ ックすると、ソルバー画面がでてきますので、これまでのソルバーの操作と同様にH55を目的セルにして、 E54を変数として、ソルバーを動かします。これで試行1の移動距離が最適化されます。次に、H56を目的 セルにして、E55を変数として、試行2の移動距離を最適化します。これを順次繰り返します。

3) 最適化最急降下法

最急降下法の試行1と2(セル c12, 13~h12, 13)をコピーして最適化最急降下法の表に貼り付けます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリ ックすると、ソルバー画面がでてきますので、これまでのソルバーの操作と同様にH84を目的セルにして、 E83~G83の3つを変数として、ソルバーを動かします。これで、移動距離と移動ベクトルが最適化されま す。

4) ソルバーを使った解法

目的関数は同じです。変数x1と変数x2の初期値4と6をC92とD92に入れます。目的関数をD94に =3*(C92-2)^2+(D92-1)^2と打ち込みます。メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここでは ソルバー)を表示させます。ソルバーをクリックすると、ソルバー画面がでてきますので、これまでと同様 にD94を目的セルにして、C92、D92の2つを変数として、ソルバーを動かします。

以上の操作の完結版を最終シートとして添付していますので、最終のシートで確認可能です。

3.2 最適化反応次数の決定

1) ソルバーによる反応次数の決定

1.2 反応速度解析(Excelファイル)の1)ソルバーによる反応次数の決定の内容を参照してください。

2) 区間法による決定

①等間隔法

等間隔法のために作表します。試行回数、探索値x1~x4、反応次数n、速度定数k1~k3、目的 関数です。x1の初期値セルd31とx2の初期値セルd34に探索幅として1.1と1.6を入れます。x 3のセルd32とx4のセルd33は等間隔の分割で=D31+(D34·D31)/3と=D32+(D34·D31)/3を打ち込み ます。2回目のx1のセルd35とx2のセルd38は=IF(H32<H33,D31,D32)と=IF(H32<H33,D33,D34) を打ち込みます。2回目のx3のセルd36とx4のセルd36は1回目のd32とd33をコピーして貼り付 けます。次に2回目のセルd35~セルd38までをコピーして、3回目以降にはりつけます。

k 1 は=-(POWER(E\$11,(1-D31))-POWER(E\$10,(1-D31)))/((1-D31)*E\$12)、k 2 は=-(POWER(F\$11,(1-D31)))-POWER(F\$10,(1-D31)))/((1-D31)*F\$12)、k 3 は =-(POWER(G\$11,(1-D31)))-POWER(G\$10,(1-D31)))/((1-D31)*G\$12)、目的関数は=(E31-F31)^2+(F31-G31)^2+(G31-E31)^2 を打ち込みます。そして セル E31 から H31 までをコピーして、各回にはりつけます。

作表およびエクセル上の計算はこれで終わりです。結果は最終のシートで確認できます。

②黄金分割法

黄金分割法のために作表します。試行回数、探索値x1~x4、反応次数n、速度定数k1~k3、目 的関数(セル)値です。x1の初期値セルd106とx2の初期値セルd109に探索幅として1.1と1.6 を入れます。x3のセルd107とx4のセルd108は黄金分割で=D106+((1.618-1)/1.618)*(D109-D106)と ==D106+(1/1.618)*(D109-D106)を打ち込みます。2回目のx1のセルd110とx2のセルd113に =IF(H107<H108,D106,D107)と=IF(H107<H108,D108,D109)を打ち込みます。2回目のx3のセルd111 とx4のセルd112は1回目のd107とd108をコピーして貼り付けます。次に2回目のセルd110~d113 までをコピーして、3回目以降にはりつけます。

k 1 は =-(POWER(E\$11,(1-D106))-POWER(E\$10,(1-D106)))/((1-D106)*E\$12) 、 k 2 は =-(POWER(F\$11,(1-D106))-POWER(F\$10,(1-D106)))/((1-D106)*F\$12) 、 k 3 は =-(POWER(G\$11,(1-D106))-POWER(G\$10,(1-D106)))/((1-D106)*G\$12) 、 目 的 関 数 は =(E106-F106)^2+(F106-G106)^2+(G106-E106)^2 を打ち込みます。そしてセル E106 から H106 までをコピーして、各回にはり っけます。

作表およびエクセル上の計算はこれで終わりです。結果は最終のシートで確認できます。

3.3 線形計画法

1) ソルバーにより線形計画法を解く

①変数:製品1、製品2の生産量x1、x2とスラックス変数x3、x4、x5です。

②制限(制約)条件:これらの式の制限下に、線形計画を解きます。

③目的関数:製品1、製品2を製造することによる収益です。

④ソルバーにより線形計画法の基礎式を解くための作表

Eq.(12)'.Eq.(13)',Eq.(14)',Eq.(15)' 式の制限式のもとに Eq.(16)の目的関数 z を最大にする変数 x 1 と x 2 を求めるために、変数と制限条件と目的関数を Excel ファイルのように作表します。

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。 ソルバーをクリックすると、下記のソルバー画面がでてきます。

ソルバーのパラメーター		x
目的セルの設定:(工) \$F\$42 目標値: ●最大値(M) ○最小値(N) ○指定値:(V)		
変数セルの変更:(<u>B</u>) \$D\$23:\$H\$23 制約名件の対象:(U)	-	
第1年30=\$K\$30 追加(A) 第1531 = \$K\$31 変更(C) 第1533 >= \$K\$33 調節(A) 第1534 >= \$K\$34 週間(A)		
\$I\$35 >= \$K\$35 \$I\$36 >= \$K\$36 \$I\$37 >= \$K\$37 読み込み/保存	<u>R)</u> ^E (L)	
 ✓ 制約のない変数を非負数にする(K) 解決方法の選択:(E) シンプレックス LP オプション(P))	
解決方法 滑らかな非線形を示すソルバー問題には GRG 非線形エンジン、線形を示すソルバー問題には LP シン クス エンジン、滑らかではない非線形を示すソルバー問題にはエボリューショナリー エンジンを選択してくだ	プレッ さい。	
ヘルプ(<u>H</u>) 閉じる	(<u>0</u>)	

目的セルの設定で F42 を選択し、次に目標値は最大値を、そして変数セルの変更で D23 から H23 を選択し ます。制約条件の対象に I30~I37 と K30~K37 のそれぞれの関係を入れます。解決方法はここではシンプ レックス LP を選択します。

解決を押すと、下記のソルバーの結果が表示され、変数セル D23~H23 の値が変化します。

ソルバーの結果	>
ソルパーによって解が見つかりました。すべての制約条件と最適 条件を満たしています。	動化 レポート
● ソルバーの解の保持	解答 感度 条件
○ 計算前の値に戻す	
□ ソルバー パラメーターのダイアログに戻る	□ アウトライン レポート
<u>O</u> K キャンセル	シナリオの保存
ソルバーによって解が見つかりました。すべての制約条件と す。	最適化条件を満たしていま
GRG エンジンが使用されるのは、ソルパーで 1 つ以上のローカ す。シンプレックス LP が使用されるのは、ソルパーでグローバル す。	ル最適解が見つかった場合で 最適解が見つかった場合で

問題なければ、OK押すと、変数セル D23~H23の値が固定されます。

以上の操作の完結版を最終シートとして添付していますので、最終のシートで確認可能です。

2) ソルバーによる線形計画法の解析結果の感度解析

ソルバーの結果の画面でレポートの解答、感度、条件で感度を選択して、OK を押すと

ソルバーの結果	×
ソルバーによって解が見つかりました。すべての制約条件と最適 条件を満たしています。	化 レポート
 シルパーの解の保持 計算前の値に戻す 	<u>解茶</u> 感度 条件
□ ソルバー パラメーターのダイアログに戻る	□ アウトライン レポート
QK	シナリオの保存
ソルバーによって解が見つかりました。すべての制約条件とす。 す。	最適化条件を満たしていま
GRG エンジンが使用されるのは、ソルパーで 1 つ以上のローカ. す。シンプレックス LP が使用されるのは、ソルパーでグローパル す。	ル最適解が見つかった場合で 最適解が見つかった場合で

下記の感度解析の結果のレポートシートが作成されます。

変数セル

			最終	限界		目的セル	許容範囲内	許容範囲内
セル		名前	値	コスト		係数	増加	減少
\$D\$23	x1		20.96774194		0	100	61.53846154	10
\$E\$23	x2		47.41935484		0	150	16.66666667	57.14285714
\$F\$23	x3		6.677419355		0	0	18.51851852	242.4242424
\$G\$23	x4		0		0	0	0.322580645	1E+30
\$H\$23	x5		0		0	0	1.290322581	1E+30

制約条件

		最終	潜在	制約条件	許容範囲内	許容範囲内
セル	名前	値	価格	右辺	増加	減少
\$I\$30	Eq.(1) 関数値	54	0	54	1E+30	6.677419355
\$I\$31	Eq.(2) 関数値	4550	0.322580645	4550	383.3333333	650
\$I\$32	Eq.(3) 関数値	6000	1.290322581	6000	1000	1254.545455
\$I\$33	x1 関数値	20.96774194	0	0	20.96774194	1E+30
\$I\$34	x2 関数値	47.41935484	0	0	47.41935484	1E+30
\$I\$35	x3 関数値	6.677419355	0	0	6.677419355	1E+30
\$I\$36	x4 関数値	0	-0.322580645	0	650	0
\$I\$37	x5 関数値	0	-1.290322581	0	1254.545455	0

4.1 微分法による反応次数決定

1) 理論式と解析データ

①理論式 $ln | \Delta C/\Delta t | = lnk + nlnCt$ (9) 反応次数nを求める線形化した式です。 ($\Delta C/\Delta t$)_i = y_i' = ($-y_{i+2} + 4y_{i+1} - 3y_i$) / 2h(6a)' 始点での前進差分式です。 ($\Delta C/\Delta t$)_i = y_i' = ($y_{i+1} - y_{i-1}$) / 2h (5a) 中間点各点での中心差分式です。 ($\Delta C/\Delta t$)_i = y_i' = ($3y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}$) / 2h (7a)' 終点での後退差分式です。 ②解析データ

解析のための反応時間と硫黄分濃度の関係の等温反応データです。

2) 微分法による反応次数決定のための作表

各点の反応速度を差分で求める表です。ここで、微小時間dt=0.1に固定しています。次に始点の反応速 度e29を(6a)'式相当で=abs((-D31+4*D30-3*D29)/(2*\$C\$27))を打ち込みます。終点の反応速度e39を(7a)'式相 当で=abs((3*D39-4*D38+D37)/(2*\$C\$27))を打ち込みます。中間点の反応速度e30を(5a)'式相当で=abs((D31-D29)/(2*\$C\$27))を打ち込みます。e30をコピーして、e31~e38まで貼り付けます。F29に=LN(D29)、G29に =LN(E29)を打ち込みます。F29の=LN(D29)とG29の=LN(E29)は、それぞれ濃度と反応速度の自然対数です。 F29とG29をコピーして、G30~F39まで貼り付けます。これで作表終了です。

3)回帰分析による係数の決定 (9)式の関係で、回帰分析で係数(ここでは反応次数)を求めます。 ①回帰分析の結果(重回帰の手順)

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではデータ分析)を表示させます。 データ分析をクリックして、データ分析の項目から回帰分析を選択して、OKを押します。

すると下記の回帰分析の画面がでてきます。

入力元で、入力 Y 範囲で G29~G39、入力 X 範囲で F29~F39 を選択します。 出力オプションで、一覧の出力先で C44 を指定する。

	回帰分析	? ×
入力元 入力 Y 範囲(<u>Y</u>): 入力 X 範囲(<u>X</u>): □ ラベル(<u>L)</u> □ 有意水準(<u>Q</u>)	\$G\$29:\$G\$39 \$F\$29:\$F\$39 立 定数に 0 を使用(Z) 95 %	0K キャンセル ヘルプ(<u>H</u>)
 出力オブション ● 一覧の出力先(<u>S</u>): ○ 新規ワークシート(<u>P</u>): ○ 新規ブック(<u>W</u>) 残差 □ 残差(<u>R</u>) □ 標準(rtab.F磁美(T)) 	\$C\$44 ○ 残差グラフの作成(D) ○ 観測(値グラフの作成(L))	
正規確率 □ 正規確率/うフの作成(N)		

OK を押すと、回帰分析の結果が印字されます。

先に実施した結果がある場合、確認の窓が現れるので、上書きするときは OK をクリックする。

回帰分析の結果の係数X値1の値が反応次数nに相当します。 またここでは、相関式の切片から反応速度定数kが得られることを示しています。 4.2 正規分布の数値積分

1) 関数および数値積分の式

①正規分布の密度関数 ここでは、x軸は標準偏差 σ で規格化した、次式の密度関数の値を使います。

f (x) = 1/(2 π) 1/2 e x p (-x 2/2) (15) ②数値積分 離散値で計算する数値積分の公式です。 台形則 h [(y₀+y₁)/2] (14a) シンプソン則 h/3 [y₀+4 y₁+y₂] (14b) (3/8) シンプソン則 (3/8) h [y₀+3 y₁+3 y₂+y₃] (14c) 2) 正規分布の全体積分

先ず x を-5~+5までの関数値 f (x)の表を作ります。ここで π = 3.141592654に固定します。 この表で、上記3種類の積分公式で全体を積分してみます。G17に台形則の=(E16+E17)*F17/2を打ち込みます。 そして g18~g116までコピーします。H18にシンプソン則の=(E16+4*E17+E18)*F18/3を打ち込み、1行飛ば しで H116までコピーします。I19に(3/8)シンプソン則の=(3/8)*(E16+3*E17+3*E18+E19)*F19を打ち込 みます。2行飛ばしで I115まで貼り付けます。最後の I116は台形則で=(E115+E116)*F116/2を打ち込みます。 これで作表は終わりで、それぞれの手法のなかでどの手法が1に近いか確認してください。

2) 台形則での±σ (標準偏差)、±2σ、±3σの範囲の数値積分

次に± σ 、±2 σ 、±3 σ の範囲の積分をするための作表をします。xの-5~+5までの関数値f(x)の表 の作表は前項に同じです。G163 に台形則の=(E162+E163)*F163/2 を打ち込み、G164~G182 までコピーしま す。H153 に台形則の=(E152+E153)*F153/2 を打ち込み、H154~H192 までコピーします。I143 に台形則の =(E142+E143)*F143/2 を打ち込み、I144~H201 までコピーします。合計値が± σ 、±2 σ 、±3 σ それぞれの 数値積分値ですので、理論値と比較してみてください。

4.3 発熱反応解析

1) 理論式および実験データ 固定値 A=1.04E+13 (·), E=31.35 (c a l / g - m o l), R=1.987 (c a l / g - m o l · K), n=1.33 (·) T0=315 (°C), C0=0.3239 (w t %), Cp=0.95 (c a $1 \neq g \cdot K$), $\rho = 0.9$ (g $\neq c m 3$) パラメーターの初期値 $-\Delta Q = 60000(c a 1 / g - m o 1)$ ②計算式 反応速度式 $-dC/dt = Aexp(-E/RT)C^{n}$ (16)速度式積分形 $\int d t = \int -d C \swarrow (A e x p (-E/RT) C^{n})$ (16)'反応時間と濃度の関係 $t = -\int f(C) dC$ (16)" ここで、f (C) = 1 / (A e x p (-E/RT) C n) 濃度変化による温度変化 $T_{i+1} = T_i + (-\Delta Q) \Delta C \swarrow C p \rho$ (17)

2) (3/8) シンプソン則による数値積分を含む逐次計算

計算のための作表をします。iは計算ステップです。濃度 Cw t %は逐次計算をするために、完全に反応する まで分割します。 $\Delta C = 0.0001$ 、最終ステップは $\Delta C = 0.00005$ にしています。i = 0の濃度と温度 は初期濃度 C0=0.3239、初期温度 T0=315 (°C) です。i = 0数値積分の関数 f (C)のセル E17 に =1/(C5*EXP(-C6/((C7/1000)*(D17+273.15)))*C17^C88)を打ち込みます。これをコピーして E18~ E368 に貼り付けます。(3/8)シンプソン則の式をセル F20 に=(3/8)*(C17-C18)*(E17+3*E18+3*E19+E20) を打ち込みます。これをコピーして、F23~F368 までに2行置きに張付けます。反応時間は逐次計算の合計です から、G20 に=G17+F20を打ち込みます。これをコピーして G23~G368 までに2行置きに張付けます。 これで、作表は完了です。次に平衡温度340℃になるようにパラメーター ΔQ をきめます。

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリッ クすると、下記のソルバー画面がでてきます。目的セルの設定でD369を選択し、次に目標値は指定値をチェッ クして340をいれます。変数セルの変更でC13を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変 数セルC13の値が変化します。

	ソルバーのパラメータ	7—		×
目的セルの設定:(工) 目標値: ○ 最大値(<u>M</u>)	\$D\$369 ○ 最小値(N) ● 指定値:(V)	340]
\$C\$13			E.	
制約条件の対象:(U)				-
		^	追加(<u>A</u>)	
			変更(<u>C</u>)	
			削除(<u>D</u>)	
			すべてリセット(<u>R</u>)	
		\sim	読み込み/保存(L)	
✓ 制約のない変数を非負数にする(K)				
解決方法の選択:(<u>E</u>)	GRG 非線形	~	オプション(<u>P</u>)	
解決方法 滑らかな非線形を示すソルバー問題には GRG 非線形エンジン、線形を示すソルバー問題には LP シンプレッ クス エンジン、滑らかではない非線形を示すソルバー問題にはエボリューショナリー エンジンを選択してください。				
へルプ(<u>H</u>)	(解決(<u>S</u>)	閉じる(<u>O</u>)	

結果でセルを書き換えたいときは OK をおすと、結果で書き換えられます。



5.1 ルンゲクッタ法による反応解析

ワンパス反応の解析

1) 反応速度式

 $A \rightarrow B - d C A / d t = -k C A^{n}$ (1)

2) 変数の整理

 $-d y_1 / d x = -a_1 y_1^n = f (x, y_1)$

3) 反応定数

初期値の速度定数 a₁=k を 40.85に、反応次数 n を 1.33 に設定します。

4) 反応成績 手法を照合するための実験(実測)データです。

5) ルンゲクッタ法による計算

計算のための $\Delta x = 0.01$ にセットします。計算のための作表は、Mはステップ数、Xは時間です。Aの欄がル ンゲクッタ法の計算です。Y(1) CAのd29セルは初期値の濃度です。次にK1(1)、K2(1)、K3(1)、K4(1)のe29 ~ h29 セルにそれぞれ、=-\$H\$8*D29^\$H\$9*\$C\$26、=-\$H\$8*(D29+0.5*E29)^\$H\$9*\$C\$26、=-\$H\$8*(D29+0.5*F29)^\$H\$9*\$C\$26、=-\$H\$8*(D29+G29)^\$H\$9*\$C\$26を打ち込みます。次に Δ Y(1)のi29セルに=(E29+2*F29+2*G29+H29)/6を打ち込みます。そして、e29~i29セルをコピーしてe129~i129セルに貼り付けます。つぎにd30セルに=D29+I29を打ち込みます。D30セルをコピーしてd31~d129セルに貼り付けます。作表はこれで終わりです。ワンパスルンゲクッタ法(反応定数決定)のシートと同じになるはずです。

次にワンパスルンゲクッタ法 (反応定数決定)のシートを使って、反応定数を求めてみます。

6)実測値と計算値の差の二乗和に示す表は実測値と計算値の二乗の和を計算する表です。

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリッ クすると、下記のソルバー画面がでてきます。目的セルの設定で M24 を選択し、次に目標値は最小値をチェッ クします。変数セルの変更で H8 と H9 を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変数セル H8 と H9 の値が変化します。

	ソルバーのパラメーク	ター		×
目的セルの設定:(工) (目標値: 〇 最大値(<u>M</u>) (\$M\$24 最小值()) 〇 指定值:(<u>V</u>)	0	F]
<u>変数セルの</u> 変更:(<u>B)</u> (\$H\$8:\$H\$9			The second secon]
制約条件の対象:(U)		<u> </u>	追加(A)	
			変更(<u>C</u>)	
			削除(<u>D</u>)	
			すべてリセット(<u>R</u>)	
		~	読み込み/保存(L)	
✓ 制約のない変数を非負数	こする(<u>K</u>)			
解決方法の選択:(E)	GRG 非線形	~	オプション(<u>P</u>)	
解決方法 滑らかな非線形を示すソルパ クス エンジン、滑らかではない	ー問題には GRG 非線形エンジン、 非線形を示すソルパー問題にはエオ	線形を示すソルバ- 『リューショナリー エン	-問題には LP シンプレッ ジンを選択してください。	
へルプ(<u>H</u>)	(解決(5)	閉じる(<u>O</u>)	

以下の操作は前出のソルバーに同じ。

結果をワンパスルンゲクッタ法 (最終)のシートで確認してみてください。

マルチパスルンゲクッタ法

1) モデルと収支式 反応モデル (パス) と各成分の収支式は下記です。

k 4	
$A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$	
k 1 k 2 k 3	
$- d C A \neq d t = -k 1 C A - k 4 C A$	(11a)
$d C B \neq d t = k 1 C A - k 2 C B$	(11b)
$d C C \neq d t = k 4 C A + k 2 C B - k 3 C C$	(11c)
$d C D \neq d t = k 3 C c$	(11d)
2)変数の整理 作表のために、変数を次のように整理します。	
-d y 1 / d x = -a 1 y 1 - a 4 y 1 = f (x, y 1)	(a)
d y 2 / d x = a 1 y 1 - a 2 y 2 = f (x, y 1, y 2)	(b)
d y 3 / d x = a 4 y 1 + a 2 y 2 - a 3 y 3 = f (x, y 1,	y 2,y 3) (c)
d y 4 ∕ d x = a 3 y3= f (x, y 3, y 4)	(d)

3) 反応定数

初期値の速度定数は a1=k1 を 0.046114452、a2=k2 を 0.264090413、a3=k3 を 0.149008169、a4=k4 を 0.111213793 設定します。ここでは解析の単純化のために反応次数nは1に固定しています。

- 4) 初期値 反応解析のための初期値です。
- 5) ルンゲクッタ法による計算

次にマルチパスルンゲクッタ法 (反応定数決定)のシートを使って、反応定数を求めてみます。

- 3) 反応定数の決定 実測値と計算値の二乗の和を計算する表です。
- 4) 初期値および反応成績 反応成績は各成分の反応定数を求めるための実験成績です。
- 6) 反応定数の決定の操作

メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリッ クすると、下記のソルバー画面がでてきます。目的セルの設定でI14を選択し、次に目標値は最小値をチェック します。変数セルの変更でH10~H13を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変数セルH10 ~H13の値が変化します。

目的也100股定:(1)	\$1\$14		F.M.
目標値: 🔘 最大値(M) 🤇	最小値()) ○ 指定値:(⊻)	0	
変数セルの変更:(<u>B</u>)			
\$H\$10:\$H\$13			1
制約条件の対象:(旦)			
\$V\$127 = \$AB\$127		^	追加(<u>A</u>)
			変更(<u>C</u>)
			削除(<u>D</u>)
			すべてリセット(<u>B</u>)
		~	読み込み/保存(L)
✓ 制約のない変数を非負数(する(区)		
解決方法の選択:(<u>E</u>)	GRG 非線形	~	オプション(<u>P</u>)
解決方法 滑らかな非線形を示すソルバー クス エンジン、滑らかではない!	ー問題には GRG 非線形エンジン 非線形を示すソルバー問題にはエ	>、線形を示すソルバ・ ボリューショナリー エン	ー問題には LP シンプレッ バンを選択してください。

結果はマルチパスルンゲクッタ法 (最終)と照合してみてください。

5.2 緩和法による熱伝導の解析

緩和法

1) 計算式

 $u_{i,j} = (u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j}) / 4$ ここで、u: 温度

2) 境界条件及び初期値

固体の周囲の温度(固定値)と求めたい内部の温度の計算用の初期値です。

3)緩和計算

ステップ1 周囲のセルに固体の周囲の温度(固定値)を打ち込みます。次に求めたい内部の温度に対応するセル E23 に=(E8+D9+F9+E10)/4 を打ち込みます。E23 をコピーして、内部温度に相当するセル(E23~I23 からE31~I31)に貼り付けます。ステップ1の右の相対変化は計算試行での値の相対変化を表しています。

ステップ2 ステップ1の表と相対変化の表をコピーして、ステップ2の表に貼り付けます。

以後これを繰り返し、試行100回か相対変化 $\epsilon \leq 0.001$ で試行(計算)を打ち切ります。

Excelの機能

💵 🔒 ち・ぐ・=

1)計算式、2)境界条件及び初期値は前項に同じです。

Excelの機能での計算

前項のステップ1と同じように、周囲のセルに固体の周囲の温度(固定値)を打ち込みます。次に求めたい内部 の温度に対応するセル E23 に=(E8+D9+F9+E10)/4 を打ち込みます。E23 をコピーして、内部温度に相当するセ ル(E23~I23 から E31~I31)に貼り付けます。

Excelの機能での計算の手順では、Excelシートの上部のファイルをクリックします。次にオプション をクリックして、次に数式をクリックします。次に反復計算を行うにチェック✔入れて下部のOKをクリックす ると、計算が実施されます。基準はデフォルトで試行100回か相対変化ε≦0.001になっています。

5.2緩和法による熱伝導の解析.xlsx - Excel

ファイル ホーム 挿入	入 ページ レイアウト 数	対式 データ 校閲 表示		
$\left(\boldsymbol{\epsilon} \right)$	基本設定数式	■ → 数式の計算や処理、エラー処理に関するオプションを	変更します。	
\smile	文章校正	計算方法の設定		
情報	保存言語	ブックの計算 ^① ④ 自動(<u>A</u>)	✓ 反復計算を行う(I) 最大反復回数(X): 100 ◆	
新規	詳細設定	 データテーブル以外自動(<u>D</u>) 手動(<u>M</u>) 	変化の最大値(<u>C</u>): 0.001	
開く	リホンのユーリー設止 クイック アクセス ツール バー	✓ ブックの保存前に再計算を行う(<u>W</u>)		
上書き保存	アドイン セキュリティ センター	□ R1C1 参照形式を使用する(<u>R</u>) ^①		
名前を付けて 保存		 図 数式オートコンパノート(上) □ 図 数式でテーブル名を使用する(工) ☑ ビボットテーブル参照に GetPivotData 関数を使用する(<u>P</u>) 		
印刷		エラー チェック		
共有		 ✓ バックグラウンドでエラー チェックを行う(<u>B</u>) 次の色でエラーを示す(E): 	-のリセット(<u>G)</u>	
エクスポート		エラー チェック ルール		
閉じる		 ✓ エラー結果となる数式を含むせい(L)^① ✓ テーブル内の矛盾した集計列の数式(<u>S</u>)^② ✓ 2 桁の年が含まれるセル(Y)^① 	 ✓ 領域内のセルを除いた数式(Q)^① ✓ 数式を含むロックされていないセル(K)^① □ 空白セルを参照する数式(U)^① 	
アカウント		✓ 文字列形式の数値、またはアポストロフィで始まる数値(出) ^① ✓ 領域内の他の数式と矛盾する数式(<u>N</u>) ^①	☑ テーブルに入力されたデータが無効(⊻) ^①	
イブション				ОК ++>+

5.3 固定床液分散の解析

1) 基礎式

中心部:
$$f_{0, n+1} = f_{0, n} + 4 \times D \Delta z / \Delta r^2$$
 ($f_{1, n} - f_{0, n}$)
コア部: $f_{m, n+1} = f_{m, n} + (D \Delta z / \Delta r^2)$ ($(1 + 1 / 2m) f_{m+1, n} - 2 f_{m, n}$ (17)

+
$$(1 - 1 / 2 m) f_{m-1, n}$$
 (18)

壁面部: $f_{w, n+1} = (f_{w-1, n+1} + (\beta \Delta r / D) (\gamma W_{n+1})) / (1 + (\beta \Delta r / D))$ (19) 壁面流れ: $W_{n+1} = W_n + 2 \pi R \beta (f_{w, n} - \gamma W_n) d z$ (20) 2) 計算データおよびパラメーター

ここに計算に必要なデータおよびパラメーターをまとめています。

3)実験データによるパラメーター設定

ここでは壁面フローの実験データをまとめています。

シート液分散ベース

解析の表でmは半径方向の分割、nは計算ステップです。32行は半径方向の各分割点の断面積です。33行 は初期値の流量20です。セルB34に中心部の(17)式の=B33+(4*\$D\$28)*(C33-B33)を打ち込みます。次にセル C34にコア部の(18)式の=C33+\$D\$28*((1+1/(2*C\$31))*D33-2*C33+((1-1/(2*C\$31))*B33))を打ち込みます。

次にセル C34 をコピーして D34~U34 に貼り付けます。次に V34 に壁面部の(19)式を打ち込みます。次に W34 に壁面流れの(20)式を打ち込みます。

次に B34~W34 をコピーして、35行(計算ステップ2)から1038行(計算ステップ500)に貼り付けて、解 析のシートは完成です。

結果は液分散ベース(最終)で照合してみてください。

シート拡散係数Dの決定

拡散係数Dは実験パラメーターです。実験データで決めます。

3)実験データによるパラメーター設定では実験値と計算値の表をまとめています。実験値と計算値の差の二乗の 表は各データ点の実験値と計算値の差の二乗和の表です。この総和を最小にするようにソルバーでときます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリック すると、下記のソルバー画面がでてきます。目的セルの設定でT19を選択し、次に目標値は最小値をチェックし ます。変数セルの変更でD16を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変数セルD16の値が 変化します。

結果は拡散係数 D の決定(最終)で照合してみてください。

シート壁面流れパラメーター決定

ここで壁面流れのパラメーターを実験データで決めます。

3)実験データによるパラメーター設定では実験値と計算値の表をまとめています。実験値と計算値の差の二乗の 表は各データ点の実験値と計算値の差の二乗和の表です。この総和を最小にするようにソルバーでときます。 メニューでデータをクリックして、分析にアドイン(ここではソルバー)を表示させます。ソルバーをクリック すると、下記のソルバー画面がでてきます。目的セルの設定でL18を選択し、次に目標値は最小値をチェックし ます。変数セルの変更でC18~C19を選択します。解決を押すと、ソルバーの結果が表示され、変数セル C18~ C19の値が変化します。

結果はパラメーター決定(最終)で照合してみてください。

6.1 モンテカルロ法によるπの計算

シート乱数内部関数

このシートでは乱数列の発生にエクセルの内部関数を使っています。

1)計算手順 計算手順を示しています。

2) 乱数発生 乱数の発生方法を示しています。ここではセルに RAND0と打ち込むと内部関数により自動的に 乱数を発生します。

3) モンテカルロ法による計算

次に乱数を発生させるために、セル E76 と F76 に=RAND0と打ち込みます。次に発生させた乱数で平板上の 座標(x、y)を求めます。G76、H76 に=-0.5+E76、=-0.5+F76 と打ち込みます。次に的に当たったかどうか 判定します。I76 に=IF(G76^2+H76^2<0.25,1,0)と打ち込みます。的に当たった場合は1を、的を外れた場合は 0を返します。次は的に当たった回数の積算です。J75 は初期値の0を打ち込みます。J76 に=J75+I76 と打ち 込みます。次に的に当たった回数を試行回数で割って衝突確率を求めます。K76 に=J76/B76 と打ち込みます。 次は試行時点での π の値の計算です。L76 に=4*K76 と打ち込みます。M76 は試行結果と比較するための π の理 論値で、=3.141592653 と打ち込みます。これで試行番号1の行が完成です。

次に試行番号1の行の E76~M76 をコピーして、試行番号2~試行番号2000の行 E77: M77~E2075: M2075 までに貼り付けます。これで、作表は完了です。結果はシート乱数内部関数最終で確認してみてください。

完成したシート乱数内部関数もシート乱数内部関数最終もF9キーを押すと、乱数列が変化し、結果が変わり ます。これは、Excel シートで、なにか操作すると内部関数=RAND0で発生する乱数列が変化するためです。こ れでは、発生する疑似乱数も含め、計算結果の評価が難しいので、次節で、疑似乱数の発生に乗法合同法を使う 方法を示します。

シート乗法合同法

このシートでは乱数列の発生に乗法合同法を使っています。

1)計算手順 計算手順を示しています。

2) 乱数発生
 乱数の発生方法を示しています。ここでは乗法合同法の式
 Rn+1=kRn (modM)を使って、乱数列を発生します。ここで、定数はR₀=12345、k=65539、M=2147483647を使っています。

3) モンテカルロ法による計算

試行番号0の列は計算のための初期値です。セル D75 に乱数発生の初期値 12345 を打ち込みます。次に乱数 を発生させるために C76 に=MOD(D75*65539,2147483647)と打ち込みます。D76 に =MOD(C76*65539,2147483647)と打ち込みます。発生させた整数の乱数を0~1に規格(実数)化するために E76 に=C76/2147483647 と打ち込みます。F76 に=D6/2147483647 と打ち込みます。次に発生させた乱数で平 板上の座標(x、y)を決めます。G76、H76 に=-0.5+E76、=-0.5+F76 と打ち込みます。次に平板上の位置が 的に当たっているかどうか判定します。I76 に=IF(G76^2+H76^2<0.25,1,0)と打ち込みます。的に当たった場合 は1を、的を外れて場合は0を返します。次は的に当たった回数の積算です。J75 は初期値の0を打ち込みます。 J76 に=J75+I76 と打ち込みます。次に的に当たった回数を試行回数で割って衝突確率を求めます。K76 に =J76/B76 と打ち込みます。次は π の値の計算です。L76 に=4*K76 と打ち込みます。M76 は試行結果と比較す るための π の理論値で、=3.141592653 と打ち込みます。これで1番目の試行の行が完成です。

次に試行番号1の行C76~M76をコピーして、試行番号2~試行番号2000の行C77:M77~C2075:M2075 までに貼り付けます。これで、作表は完了です。結果はシート乗法合同法最終で確認してみてください。

F9キーを押してみてください。ここでは乱数列の値は固定なので、乱数列の数値は変化しません。

6.2 モンテカルロ法による放射伝熱の解析

1. 放射伝熱の解析 平行平板間の角関係

シート平行平板

1) πの値と幾何形状 計算に使うπの値と平行平板の幾何パラメーターです。

2) モンテカルロ法による平行平板の角関係の計算

このシートでは乱数列の発生に乗法合同法を使っています。ここでは式 Rn+1=kRn (modM) を 使って、乱数列を発生します。試行番号0の行は計算のための初期値です。試行番号1の行にそれぞれのセルの 式を打ち込みます。まずは1組4個の乱数を発生させます。セルC13に=MOD(D12*65539,2147483647)と打ち 込みます。D13 に=MOD(C13*65539,2147483647)と打ち込みます。E13 に=MOD(D13*65539,2147483647)と 打ち込みます。F13 に=MOD(E13*65539.2147483647)と打ち込みます。G13、H13、I13、J13 に=C13/2147483647、 =D13/2147483647、=E13/2147483647、=F13/2147483647と打ち込みます。次に試行光子の出発点の座標(x、 y、z)を決定します。K13は0です。L13に=\$C\$7*G13、M13に=\$C\$8*H13と打ち込みます。次に試行光 子の飛行方向を決めるために N13 に=SQRT(I13)、O13 に=SQRT(1-N13^2)と打ち込みます。P13 に =COS(2*\$C\$5*J13)、Q13 に=SIN(2*\$C\$5*J13)と打ち込みます。これらの値から飛行方向(方向余弦(α、β、 y)を求めます。R13 に=O13、S13 に=N13*P13、T13 に=N13*Q13 と打ち込みます。次に平行平板の衝突位 置の座標(x、y、z)を求めます。U13は1です。V13に=(U13-K13)/R13、W13に=L13+S13*V13、X13に =M13+T13*V13 と打ち込みます。次に衝突位置から目標の平行平板に衝突しているかどうか判定します。Y13 は判定です。=IF(AND(W13>0,W13<\$C\$7,X13>0,X13<\$C\$8),1,0)と打ち込みます。衝突しているときは1にな り、衝突していないときは0を返します。次は試行光子の衝突回数の積算さんです。Z12には初期値のゼロを打 ち込んでおきます。Z13は=Z12+Y13と打ち込みます。AA13は平行平板に衝突した試行光子を全試行回数で割 った角関係です。=Z13/B13と打ち込みます。AB13は試行結果と比較するための理論解で、0.2を打ち込みます。 これで試行番号1の行が完成です。

試行番号1の行 C13~AB13 をコピーして、試行番号2~試行番号1000 C14:AB14~C1012:AB1012 まで貼り付けてください。これで、完成です。

結果はシート平行平板最終で確認してみてください。

2. 放射伝熱の解析 アングル板間の角関係

シートアングル板

1) πの値と幾何形状 計算に使うπの値とアングル板の幾何パラメーターです。

2) モンテカルロ法によるアングル板の角関係の計算

手法は基本的にはシート平行平板に同じです。幾何条件が異なるので、U13は1です。V13に=(U13-M13)/T13、W13に=K13+R13*V13、X13に=L13+S13*V13と打ち込みます。アングル板に衝突したかどうかの判定のセルY13内の判定式は、=IF(AND(W13>0,W13<\$C\$7,X13>0,X13<\$C\$8),1,0)と打ち込みます。ほかは平行平板のときと同じなので、同様に試行番号1の行を完成させて、試行番号1の行C13~AB13をコピーして、試行番号2~試行番号1000C14:AB14~C1012:AB1012まで貼り付けてください。これで、完成です。

結果はシートアングル板最終で確認してみてください。