

Discontinuous Data Analysis Instruction Manual Version 5.20
 非連続データ解析の操作手順書 Thermokinetics Version 5.20、5.31

第 1 版 発行日 2020_04_06
 追加編集 2023_07_03
 株式会社パルメトリクス

この操作手順書は AKTS/Thermokinetics Ver.No.5.20 を使って作成しています。
 寿命推定や反応モデル式の探索には機能強化された Version 5.20 以上の利用をお勧めします。

2023_07 時点の Version 5.51 は 2020 年当時よりもさらに機能強化されていますが、TKsd に関する操作手順は Version 5.2 と同じです。

AKTS ソフトウェアは①の機能の TK と②の機能の TKsd のように名称が変更されました。

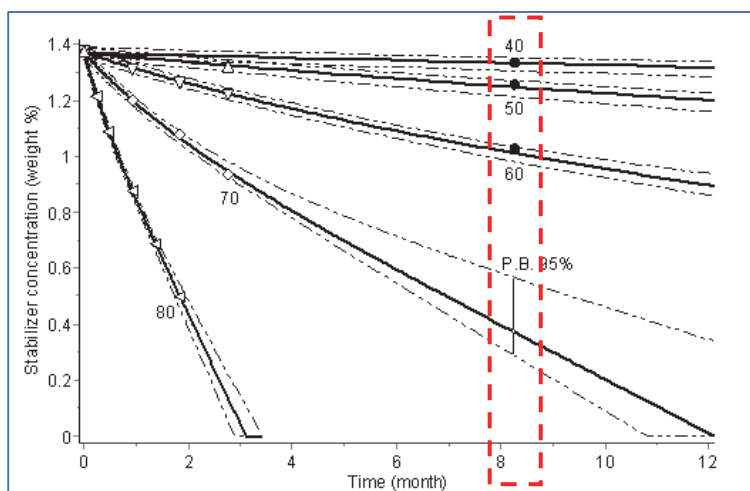
- ① DSC など熱分析の“連続データ”を使った Differential_iso_conversional 法（微分等価法）
 反応モデルを想定しないで各反応率ごとの Kinetics パラメータを求める Continuous データ法
- ② 下記のような 3 カ月に及ぶ加速試験データ（ここでは HPLC により劣化防止剤の減少量）から Propellant の老化プロセスの反応モデルを探索する手法があります。

4. Kinetic and model selection analysis of experimental data

4.1 Investigation of propellants aging

Nitrocellulose-based propellants may decompose slowly which can lead to the decreasing of their chemical stability. To prevent this undesired process, the components reacting with the degradation products (stabilizers) are introduced in the propellants. The determination of the stabilizer depletion by e.g. chromatographic techniques such as High Performance Liquid Chromatography (HPLC) offers, therefore, an efficient tool for monitoring propellant aging process

3 カ月間の加速試験データから老化プロセスの反応モデル式と 95% 予測幅と併せて得られます。
 得られた反応モデル式の検証は 253 日後に採取された実験データにより行います。



得られた反応モデル式の Table

	Two steps		One step	
	16	16	16	16
N	16	16	16	16
J	5	6	4	3
A_1	7.49E+7	5.58E+7	3.24E+11	4.2E+12
E_1	101.1	100.23	123.62	130.7
n_1	4(*)	3.762	0.61	1(*)
m_1	0(*)	0(*)	0(**)	0(*)
A_2	7.29E+13	1.19E+14		
E_2	140.8	142.29		
n_2	0(*)	0(*)		
m_2	0(*)	0(*)		
RSS	7.45E-4	7.42E-4	2.14E-3	4.01E-3
w_A	96.15%	3.54%	0.29%	0.02%
w_B	91.12%	8.65%	0.21%	0.02%

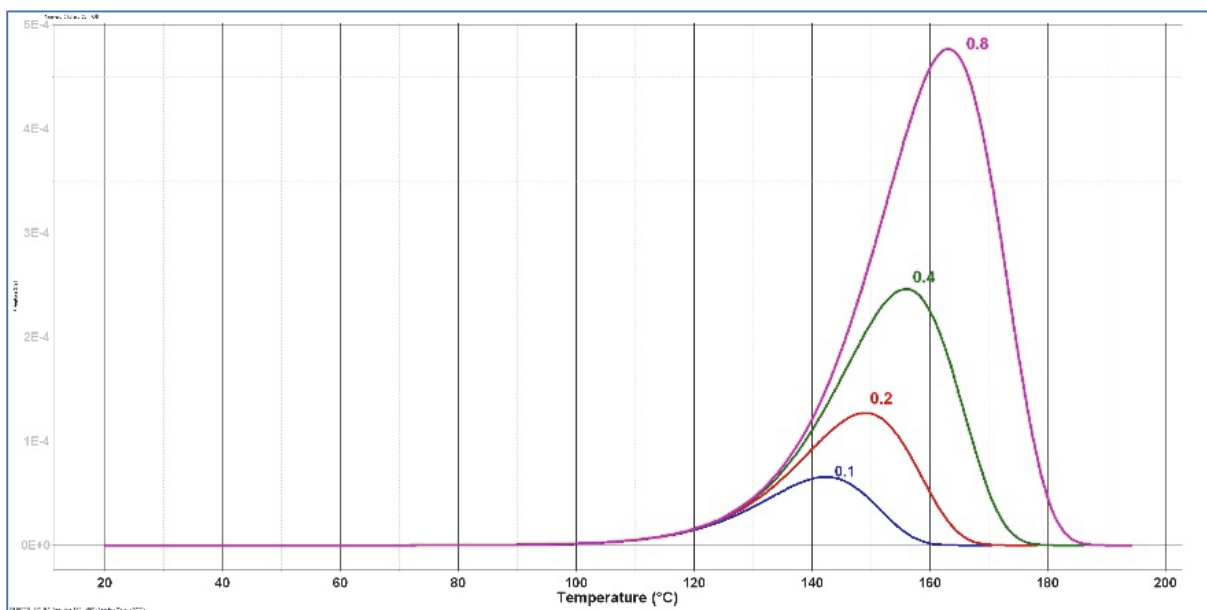
この操作手順書をマスターすれば得られた反応モデル式の表が何を意味するか？(どのような測定データなら反応モデル式が求まるか？)を理解することができます。)

加速試験データはさまざまな測定データがありますが熱分析データや熱量計データも加速試験と見做すことができます。

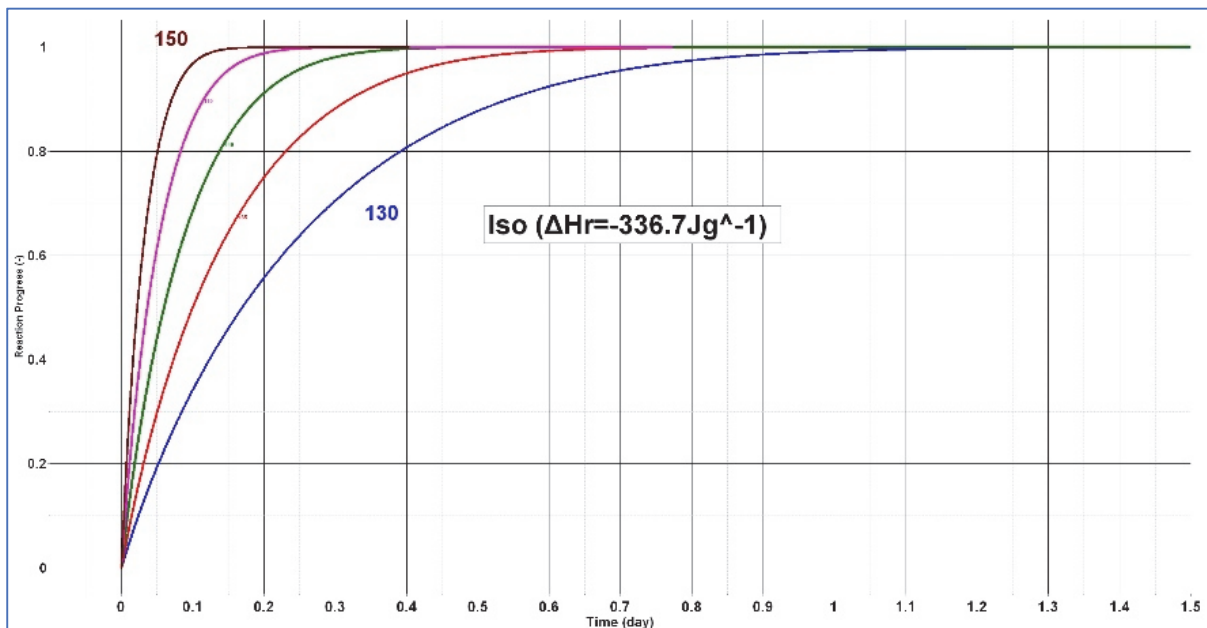
限定的な応用となりますが、DSC, TG などの熱分析データから TKsd 法による反応モデル式の算出が可能です。

解析手順として

① DSC などの熱分析データから微分型等価法で Kinetics parameter を求めます。

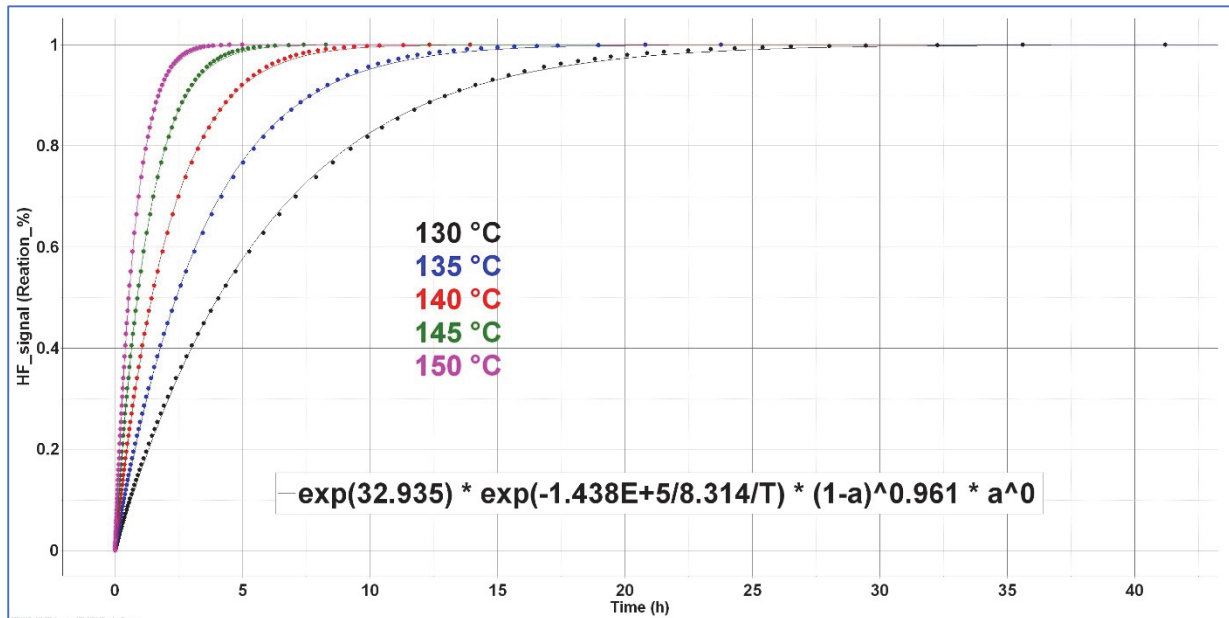


② 得られた Kinetics_parameter を使って等温データに変換します。



上記 iso_data を 40~50 点データに間引きします。この予測データを加速試験データと見做します。

反応モデル解析結果 反応式は 0.961 次反応で活性化エネルギーが 144kJ/mol となりました。



目次

- I : 操作手順 3~16 ページ
- II : 測定データ数や温度水準と解析精度の関係 17~20 ページ
- III : 応用解析例 予定

I : 操作手順

01 : 測定データを csv,または txt で準備する。

上に示した等温条件を 30°C, 40°C, 60°Cの等温条件の測定データに変換します。

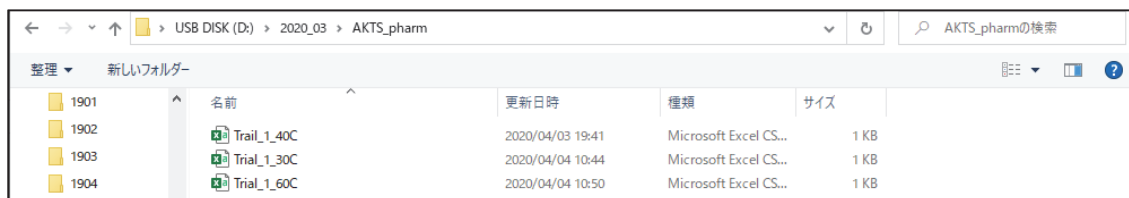
ここで適度に測定データを間引きして Fig_01 のテキストファイルが得られたとします。

Fig_01

				合計データ点数_34 個 温度条件_3 水準																																																																																	
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>A</th> <th>B</th> <th>C</th> <th>D</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 month</td> <td>Temperature</td> <td>30C_1</td> <td>30_2</td> </tr> <tr><td>2</td><td>0</td><td>30</td><td>0.04</td></tr> <tr><td>3</td><td>1</td><td>30</td><td>0.0402</td></tr> <tr><td>4</td><td>3</td><td>30</td><td>0.0405</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>30</td><td>0.0412</td></tr> <tr><td>6</td><td>9</td><td>30</td><td>0.0417</td></tr> <tr><td>7</td><td>12</td><td>30</td><td>0.0421</td></tr> <tr><td>8</td><td>18</td><td>30</td><td>0.043</td></tr> <tr><td>9</td><td>24</td><td>30</td><td>0.044</td></tr> <tr><td>10</td><td>36</td><td>30</td><td>0.0451</td></tr> </tbody> </table>	A	B	C	D	1 month	Temperature	30C_1	30_2	2	0	30	0.04	3	1	30	0.0402	4	3	30	0.0405	5	6	30	0.0412	6	9	30	0.0417	7	12	30	0.0421	8	18	30	0.043	9	24	30	0.044	10	36	30	0.0451	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>A</th> <th>B</th> <th>C</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 month</td> <td>40C_1</td> <td>40C_2</td> </tr> <tr><td>2</td><td>0</td><td>0.04</td></tr> <tr><td>3</td><td>3</td><td>0.0415</td></tr> <tr><td>4</td><td>6</td><td>0.0424</td></tr> <tr><td>5</td><td>9</td><td>0.0435</td></tr> <tr><td>6</td><td>12</td><td>0.0441</td></tr> </tbody> </table>	A	B	C	1 month	40C_1	40C_2	2	0	0.04	3	3	0.0415	4	6	0.0424	5	9	0.0435	6	12	0.0441	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>A</th> <th>B</th> <th>C</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 month</td> <td>60C_1</td> <td>60C_2</td> </tr> <tr><td>2</td><td>0</td><td>0.04</td></tr> <tr><td>3</td><td>1</td><td>0.0416</td></tr> <tr><td>4</td><td>3</td><td>0.0441</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0.0469</td></tr> </tbody> </table>	A	B	C	1 month	60C_1	60C_2	2	0	0.04	3	1	0.0416	4	3	0.0441	5	6	0.0469
A	B	C	D																																																																																		
1 month	Temperature	30C_1	30_2																																																																																		
2	0	30	0.04																																																																																		
3	1	30	0.0402																																																																																		
4	3	30	0.0405																																																																																		
5	6	30	0.0412																																																																																		
6	9	30	0.0417																																																																																		
7	12	30	0.0421																																																																																		
8	18	30	0.043																																																																																		
9	24	30	0.044																																																																																		
10	36	30	0.0451																																																																																		
A	B	C																																																																																			
1 month	40C_1	40C_2																																																																																			
2	0	0.04																																																																																			
3	3	0.0415																																																																																			
4	6	0.0424																																																																																			
5	9	0.0435																																																																																			
6	12	0.0441																																																																																			
A	B	C																																																																																			
1 month	60C_1	60C_2																																																																																			
2	0	0.04																																																																																			
3	1	0.0416																																																																																			
4	3	0.0441																																																																																			
5	6	0.0469																																																																																			
30°C_加速試験データ 9×2=18 個	40°C加速試験データ 5×2=10 個	60°C加速試験データ 4 個×2=6 個																																																																																			

2 : 測定データファイルが 3 ファイル準備されました。

Fig_02



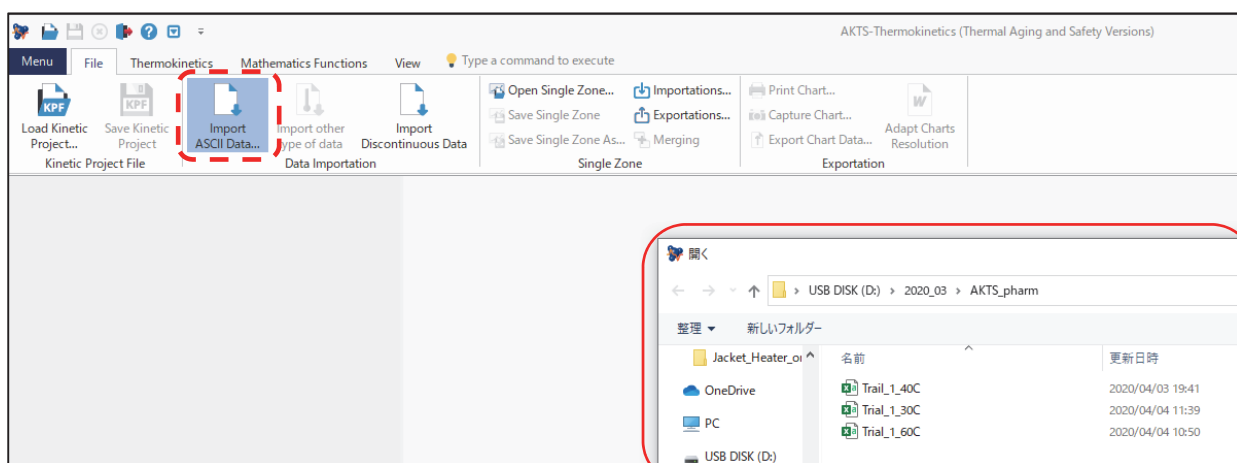
4

03 : 測定データの読み込み

Import ASCII Data (赤破線枠) をクリックする。

アイコンをクリックすると赤線枠が表示され、読み込む測定データファイルをクリックする。

Fig_03:



04 : File_Header に測定データの配列が表示されています。

1 : 時間列 (month)、2 : Temperature 3,4 : %単位の濃度

注意 : 測定データが 2 列ある場合は平均値ではなく、それぞれの測定データを読み込む方が解析精度が高くなります。操作_09 を参照

Fig_04

Import ASCII File

Current File
D:\2020_03\AKTS_pharm\Trial_1_30C.csv

File Header
month, Temperature, 30C_1, 30C_2, ...

	1	2	3	4
1	0	30	0.04	0.04
2	1	30	0.0402	0.0403
3	3	30	0.0405	0.0407
4	6	30	0.0412	0.0416
5	9	30	0.0417	0.0419
6	12	30	0.0421	0.0425

Melting Temperature
Introduce melting temperature (if available) °C

Temperature
 Column -
 Units °C
 If no column with temp.
 Set temperature as °C

Time
 Column -
 Units -
 Filter 1 points

Signal
 Column -
 Continuous data collection
 Discontinuous data collection
 Type of signal UNKNOWN
 Units
 Name Unknown

Initial Mass
 0 mg

Molar Mass
 0 g/mol

File Templates
 Enter a name... Choose... Import Cancel ?

05 : Temperature、Time、Signal の列を定義する

注意 : 寿命推定は Discontinuous data collection (非連続データ) を選択する。

Fig_05:

Current File
D:\2020_03\AKTS_pharm\Trial_1_30C.csv

File Header
month, Temperature, 30C_1, 30C_2, , , ,

	1	2	3	4
1	0	30	0.04	0.04
2	1	30	0.0402	0.0403
3	3	30	0.0405	0.0407
4	6	30	0.0412	0.0416
5	9	30	0.0417	0.0419
6	12	30	0.0421	0.0425

Melting Temperature
Introduce melting temperature (if available) °C

Temperature
 Column
 Units
 If no column with temp.
 Set temperature as °C
 Open temperature from file

Time
 Column
 Units
 Filter points

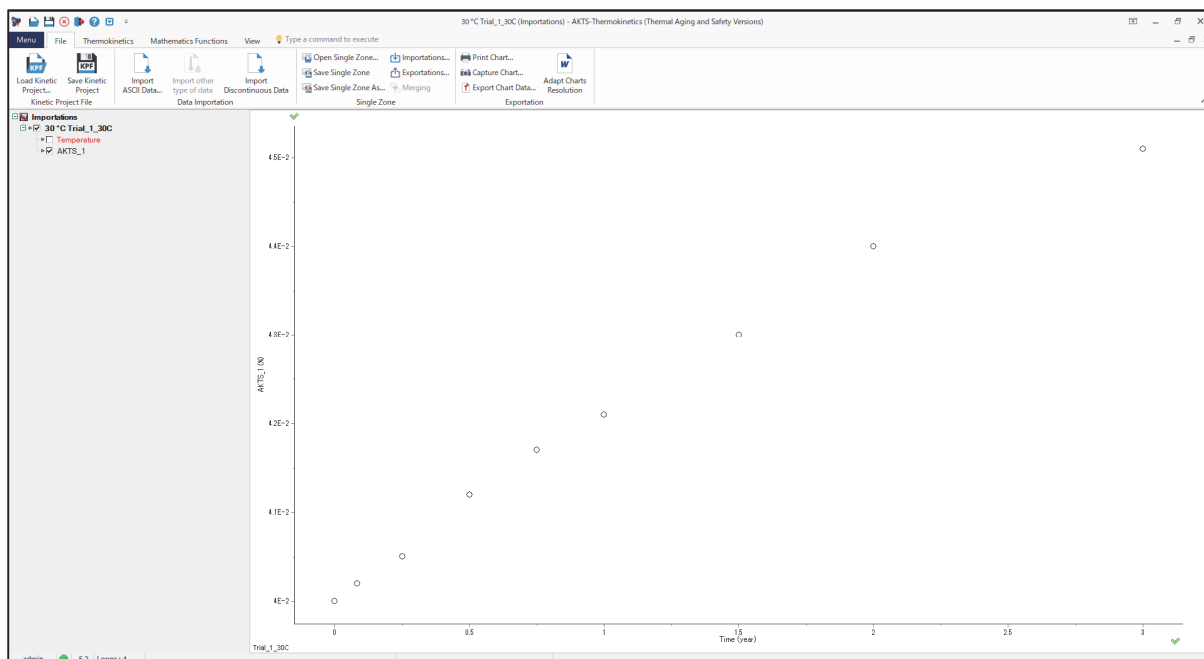
Signal

 Column
 Continuous data collection
 Discontinuous data collection
 Units
 Name

Relative Humidity
 Column
 Unit
 If no column with relative humidity, set relative humidity as %

File Templates

06 : 上記の条件で import をクリック後の画面 signal は 3 列目のみ



7

07 : Signal は 4 列目を読み込むときは 03_操作に戻って、再び同じ測定データを読み出す。
赤線枠のみを定義すれば良い。他の条件は 05_操作がそのまま継続されている。

Fig_07

Import ASCII File

Current File: D:\2020_03\AKTS_pharm\Trial_1_30C.csv

File Header: month, Temperature, 30C_1, 30C_2, , ,

	1	2	3	4
1	0	30	0.04	0.04
2	1	30	0.0402	0.0403
3	3	30	0.0405	0.0407
4	6	30	0.0412	0.0416
5	9	30	0.0417	0.0419
6	12	30	0.0421	0.0425

Melting Temperature: Introduce melting temperature (if available) [] °C

Temperature: Column 2, Units °C

Time: Column 1, Units month, Filter 1 points

Signal: Column 4 (highlighted with red box), Discontinuous data collection, Units %

Relative Humidity: Column -, Unit %

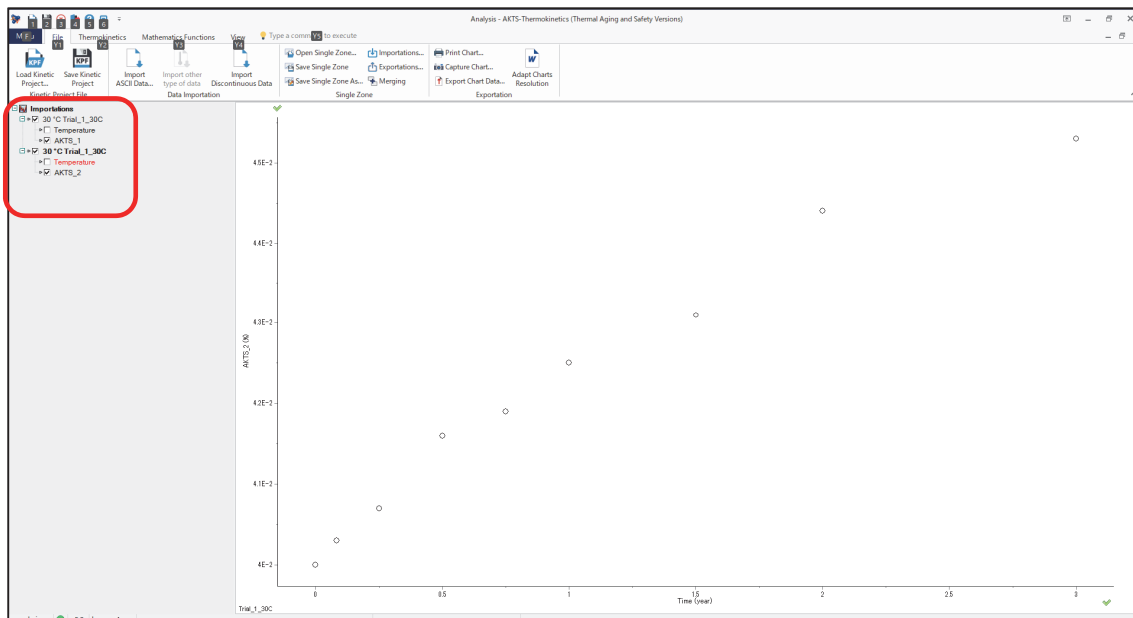
Name: AKTS_2

File Templates: Enter a name... [] [Choose...]

[Import] [Cancel] [?]

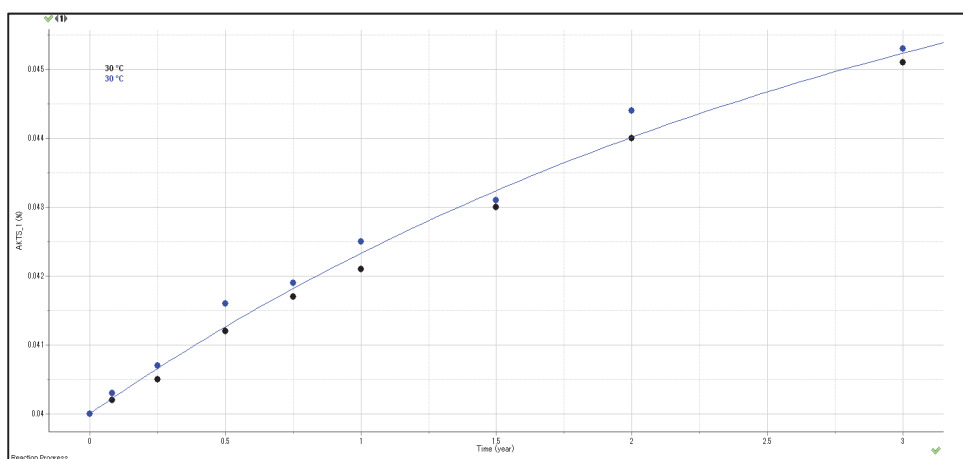
08： 操作_06 と同様に 4 列目の濃度データ（単位%）が表示される。
赤線枠は 2 つの測定データが読み込まれたことを表示している。

Fig_08 :



09： 同一温度条件で 2 系列それぞれの測定データから濃度変化を推定することになります。
同一温度条件で測定データが 2 系列ある時、平均処理して 1 系統の測定データにしないこと。
平均化処理すると解析精度が低下します。

Fig_09



10 : 同様に 40°C、60°Cの測定データを読み込む。

注 : 読み込んだファイルに温度データが含まれていない場合、赤線枠の If no column with Temp の手動で 40°Cの温度データを記入します。

Fig_10

Current File
D:\2020_03\AKTS_pharm\Trail_1_40C.csv

File Header

	1	2	3
1	0	0.04	0.04
2	3	0.0415	0.0414
3	6	0.0424	0.0423
4	9	0.0435	0.0433
5	12	0.0441	0.0442

Melting Temperature
Introduce melting temperature (if available) °C

Temperature
 Column 2
 Units °C
 If no column with temp.
 Set temperature as 40 °C
 Open temperature from file

Time
 Column 1
 Units month
 Filter 1 points

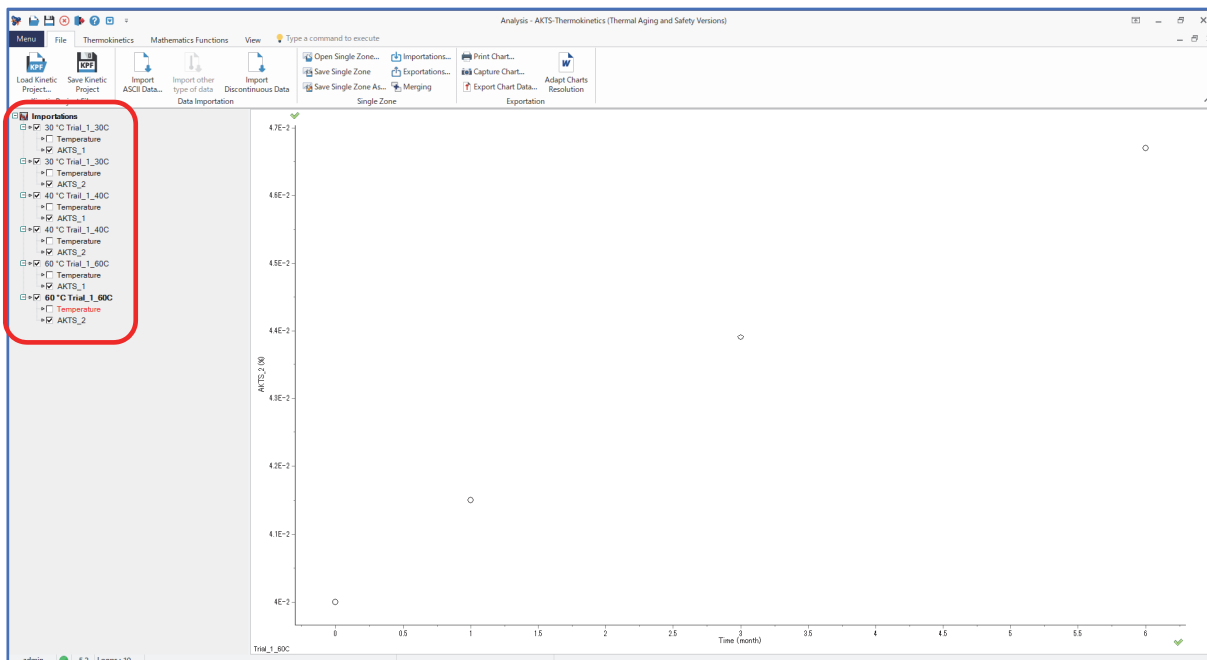
Signal
 Column 2
 Continuous data collection
 Discontinuous data collection
 Units %
 Name AKTS_1

Relative Humidity
 Column -
 Unit %
 If no column with relative humidity, set relative humidity as 50 %

File Templates
 Enter a name... Choose... Import Cancel ?

10 : 30, 40, 60℃の温度 3 水準、測定データが合計 6 個 読みこまれた。

Fig_10

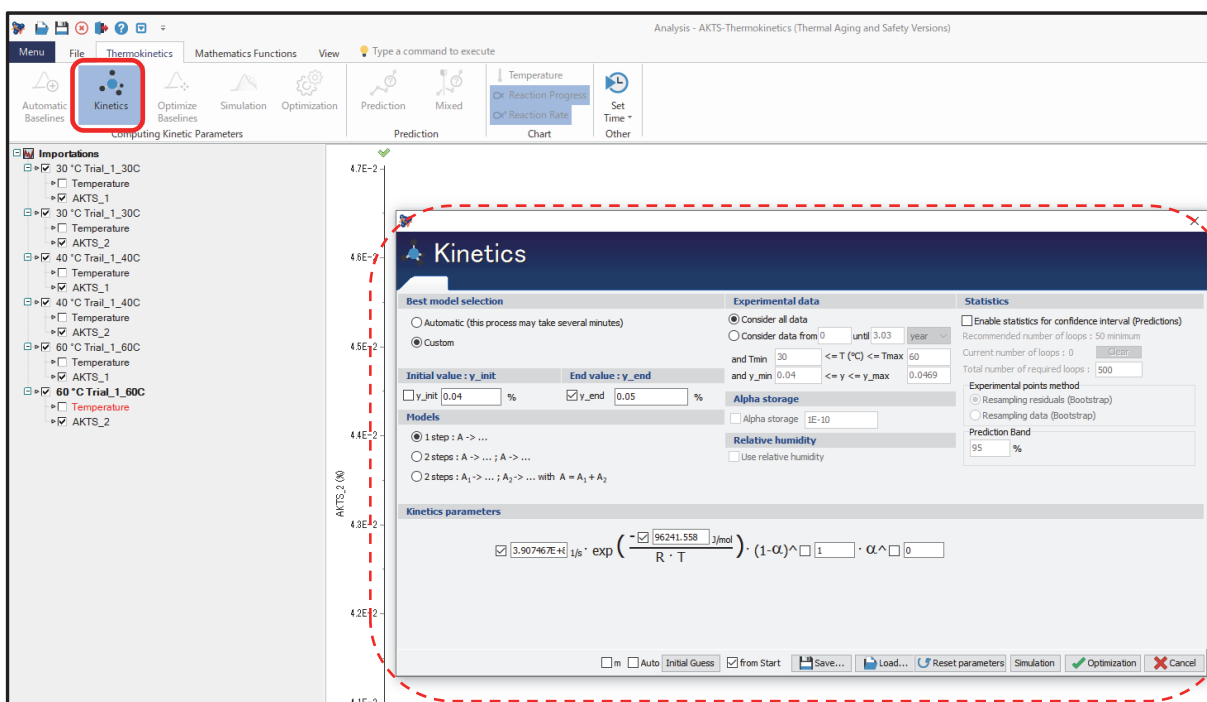


10

11 : 解析操作 (反応モデルの探索) に移るには **Kinetics** コマンドをクリックする。

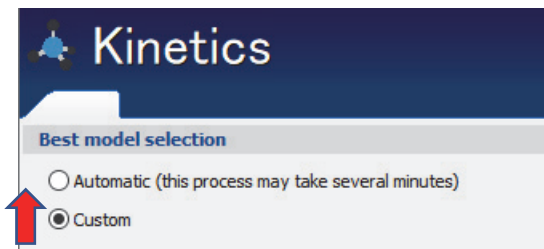
赤破線枠の上部は **Kinetics** 解析方法の選択 および
下部は推定された反応モデル式 (反応モデル解析結果)

Fig_11



12 : Best models_selection の Custom から Automatic をアクティブにする。

Fig_12



Model は 最初は 1step を選択する。

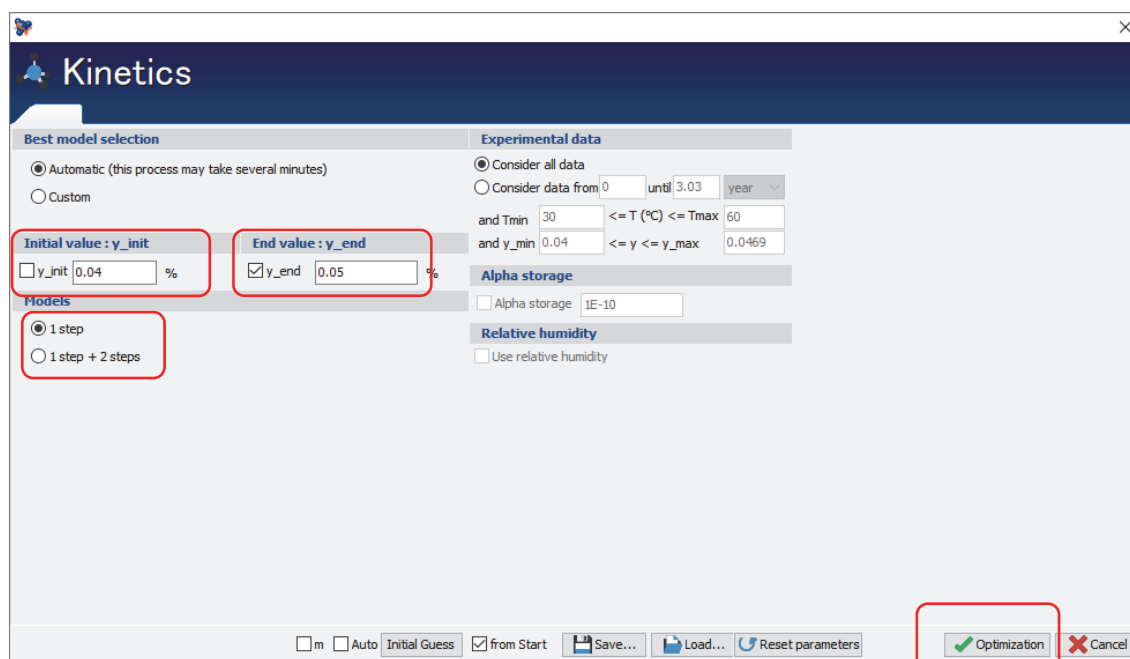
Initial_value は初期濃度が既知の場合、その濃度を入力し、レ点を解除する。

レ点はその値が **unknown** であることを示す。

End_Value 通常は未知なので、最終値の推定値を入力し、レ点を設定し、確定値でないことを定義する。

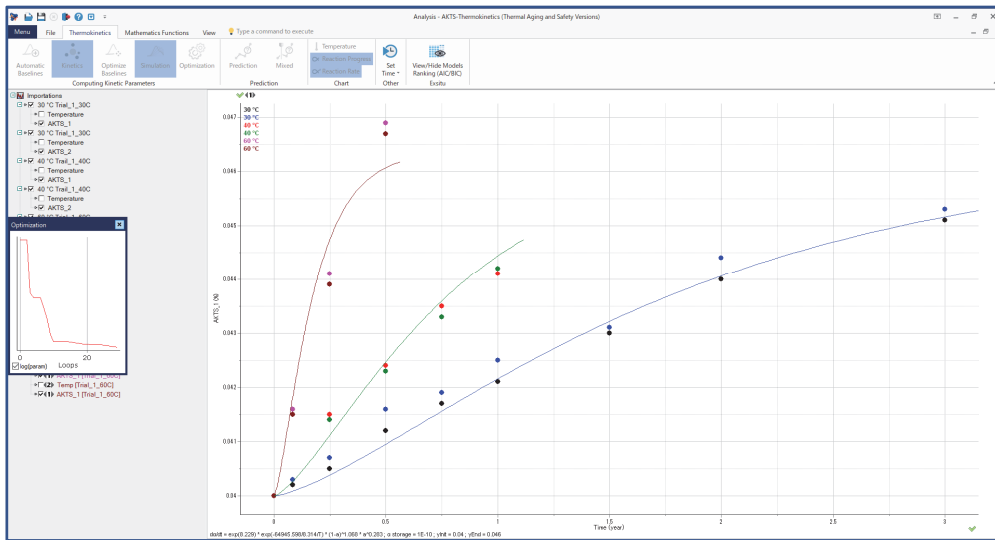
Initial_End の値を設定したら **Optimization** をクリックする。 解析がスタートする。

11



13 : 解析スタートしたときの画面 計算時間は5~30min (PCの計算能力による) 程度である。

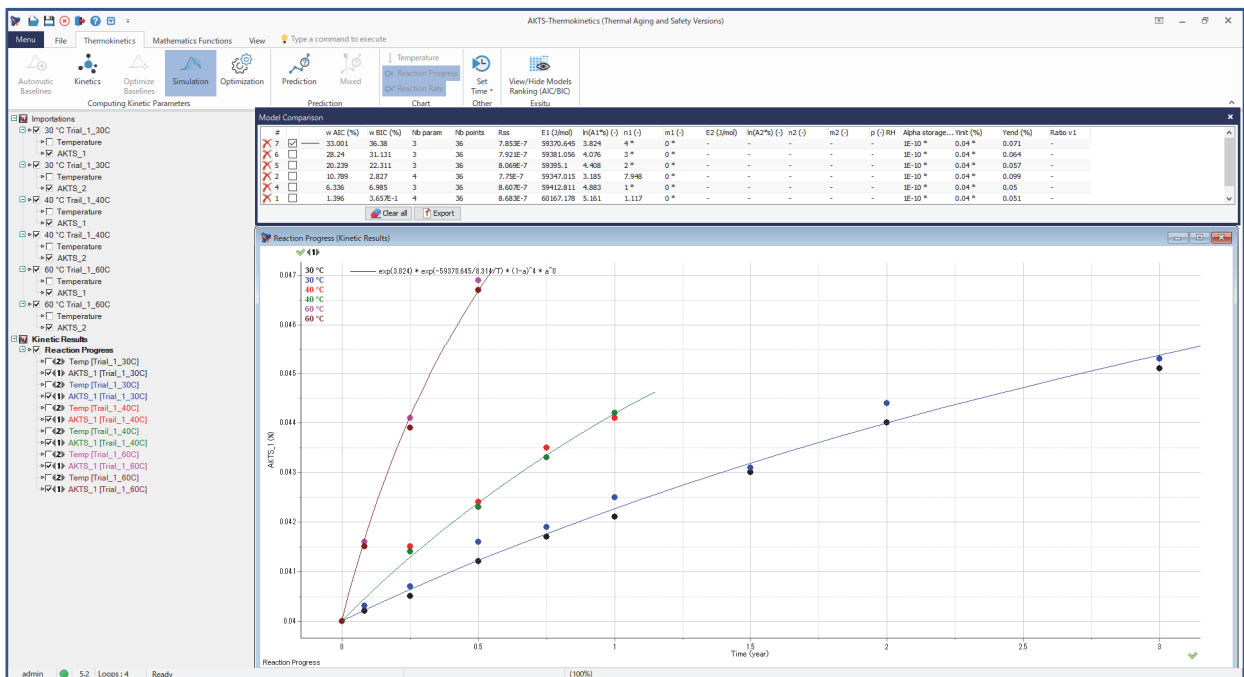
Fig_13:



12

14 : 5分~30分後に解析終了した時の画面

Fig_14



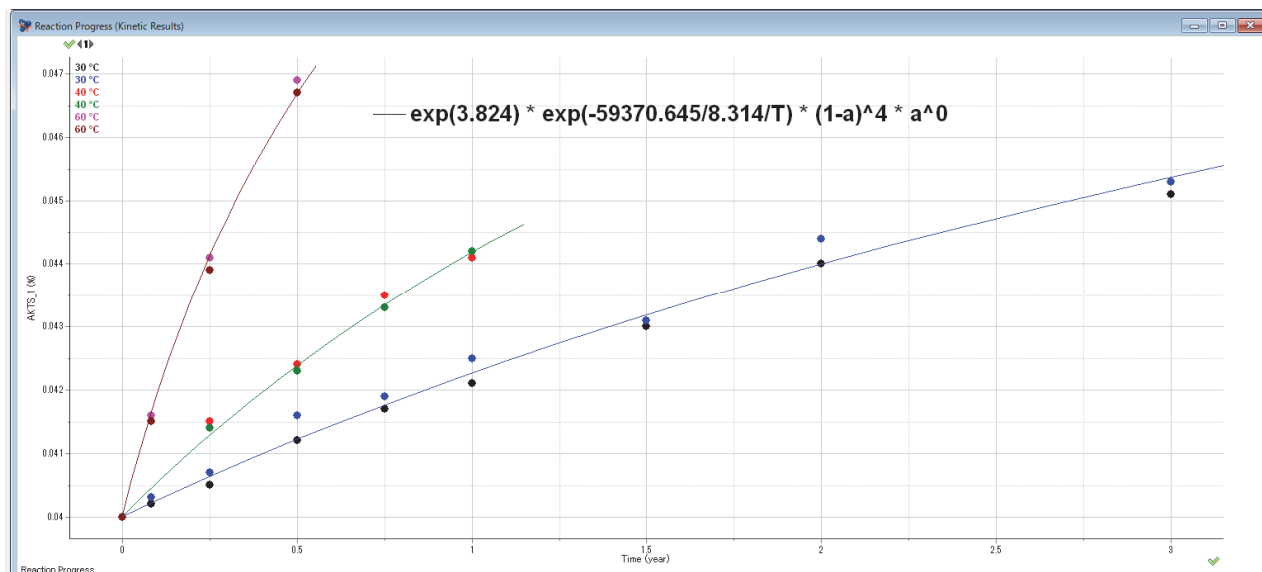
14_1 : 反応モデルの確度の高いものから順番に反応モデルが配列される。

Fig_14_1

#	<input type="checkbox"/>	w AIC (%)	w BIC (%)	Nb param	Nb points	Rss	E1 (J/mol)	ln(A1*s) (-)	n1 (-)	m1 (-)	E2 (J/mol)	ln(A2*s) (-)	n2 (-)	m2 (-)	p (-) RH	Alpha storage... Yinit (%)	Yend (%)	Ratio v1	
7	<input checked="" type="checkbox"/>	33.001	36.38	3	36	7.853E-7	59370.645	3.824	4*	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.071	-
6	<input type="checkbox"/>	28.24	31.131	3	36	7.921E-7	59381.056	4.076	3*	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.064	-
5	<input checked="" type="checkbox"/>	20.239	22.311	3	36	8.069E-7	59395.1	4.408	2*	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.057	-
2	<input type="checkbox"/>	10.789	2.827	4	36	7.75E-7	59347.015	3.185	7.948	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.099	-
4	<input checked="" type="checkbox"/>	6.336	6.985	3	36	8.607E-7	59412.811	4.883	1*	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.05	-
1	<input checked="" type="checkbox"/>	1.396	3.657E-1	4	36	8.683E-7	60167.178	5.161	1.117	0*	-	-	-	-	-	1E-10*	0.04*	0.051	-

最も可能性のある反応モデルは 4 次式、活性化エネルギーは 59.37k/mol が選択された。

Fig_14_2



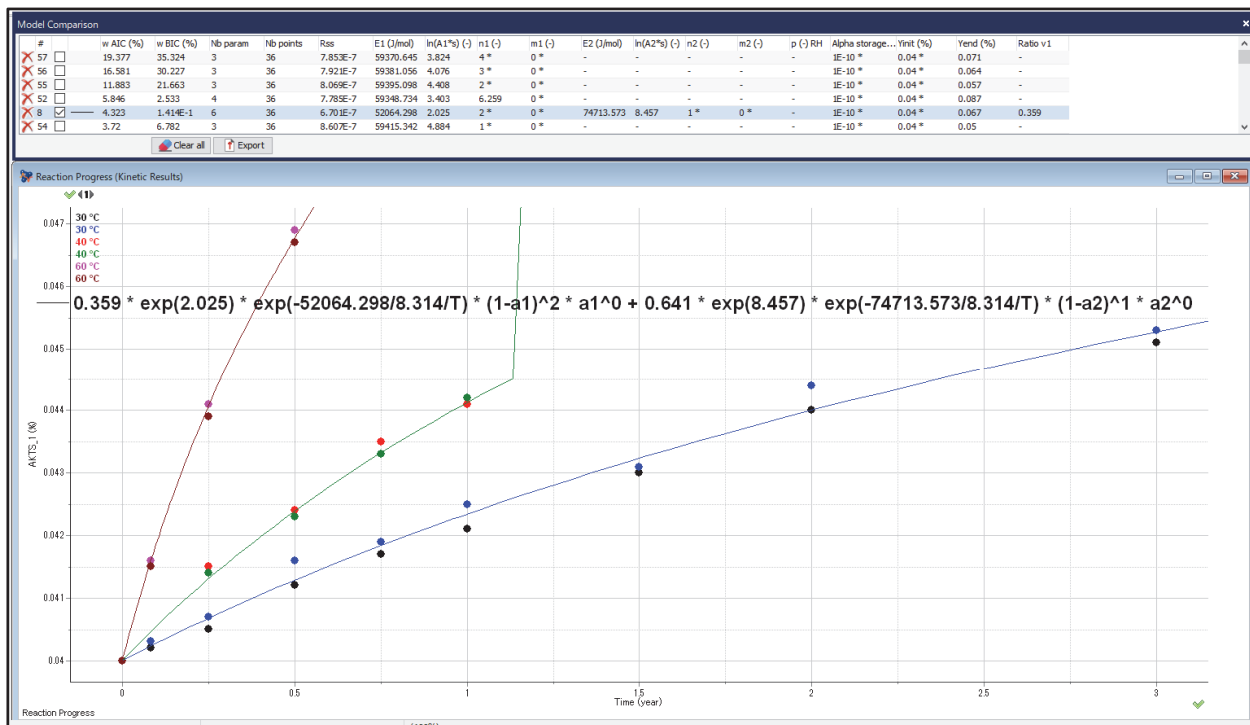
15 : 反応モデルが 2step の可能性を点検するために再度、1step+2steps を選択して再計算する。

Fig_15

16 : 1step+steps 反応モデルは、順位 5 番目に探索された

しかし、mAIV%と mBIC%のレートが低いので 1step+2steps 反応モデルはほぼできる。

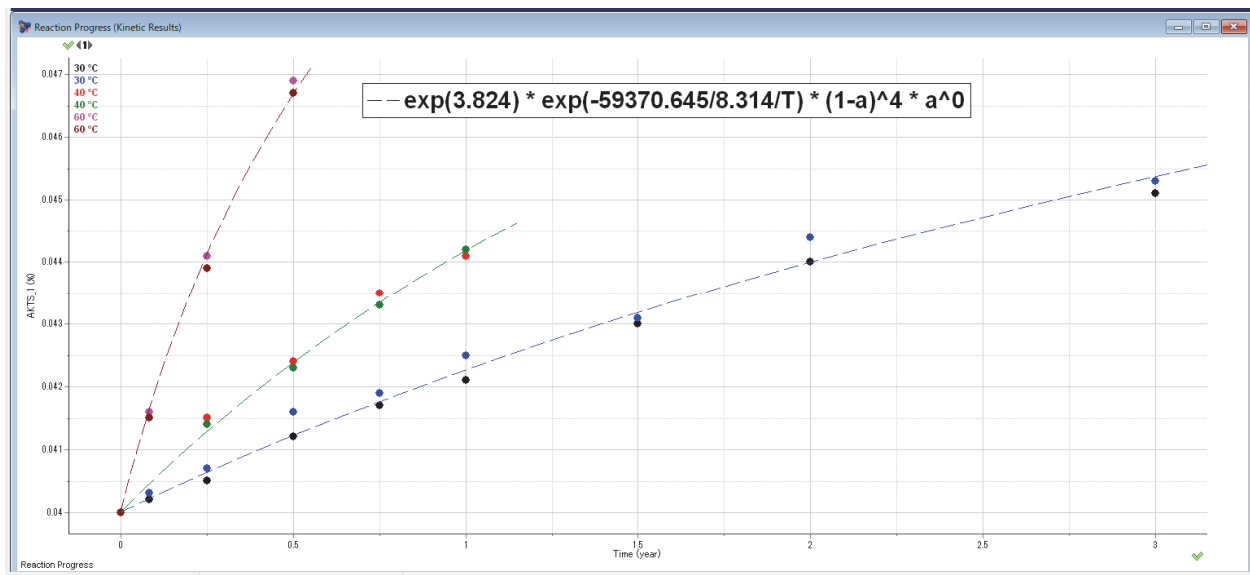
Fig_16



17 : 探索された反応モデル式は活性化エネルギー59.37J/mol 反応次数 4 次式 (1-α) ^4

$$\text{45.786945 } 1/s \cdot \exp\left(\frac{-59370.645 \text{ J/mol}}{R \cdot T}\right) \cdot (1-\alpha)^4 \cdot \alpha^0$$

Fig_17



18：得られた加速試験データの誤差がどの程度であるかを統計計算するには赤破線枠の confidence interval を計算する。

計算結果を Fig_19 に示す。

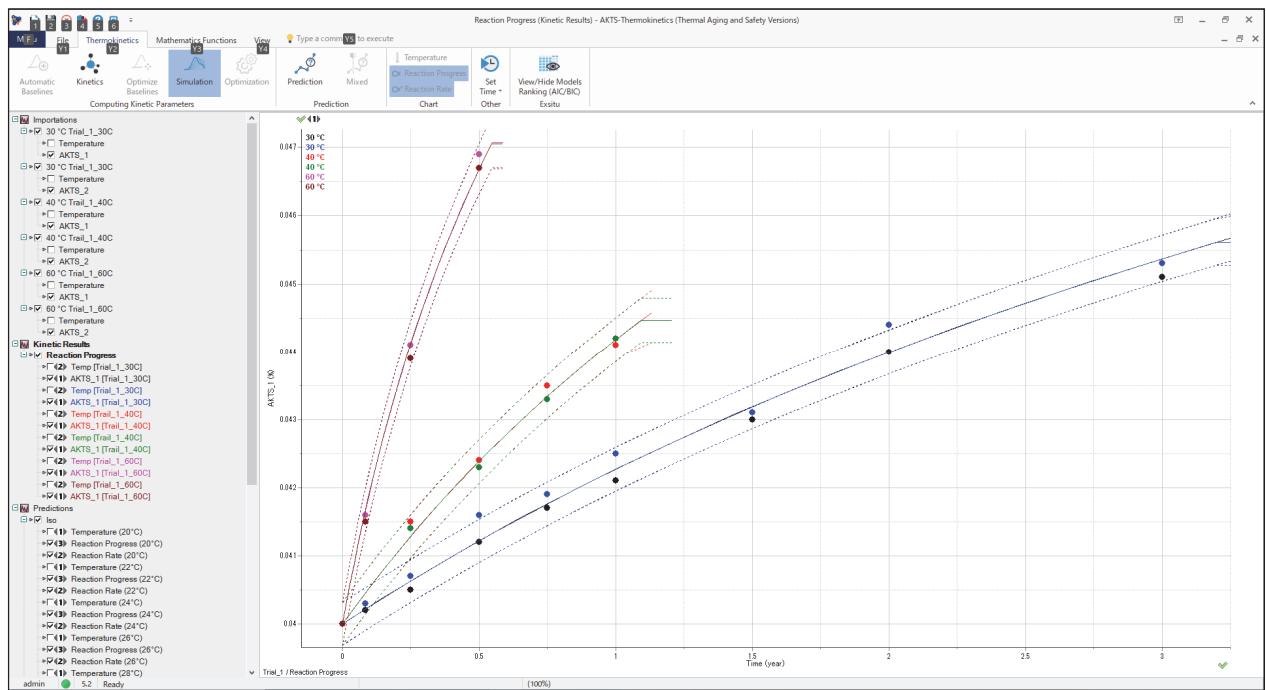
Fig_18

The screenshot shows the Kinetics software interface. The 'Statistics' panel is highlighted with a red dashed box and contains the following settings:

- Enable statistics for confidence interval (Predictions)
- Recommended number of loops : 50 minimum
- Current number of loops : 0
- Total number of required loops :
- Experimental points method
 - Resampling residuals (Bootstrap)
 - Resampling data (Bootstrap)
- Prediction Band
 - %

Other visible settings include: Best model selection (Custom), Initial value (y_init: 0.04, y_end: 0.071), Models (1 step: A -> ...), Kinetics parameters (45.786945 1/s, 59370.645 J/mol, (1-α)^4 · α^0), and a Prediction Band of 95%.

Fig_19 :



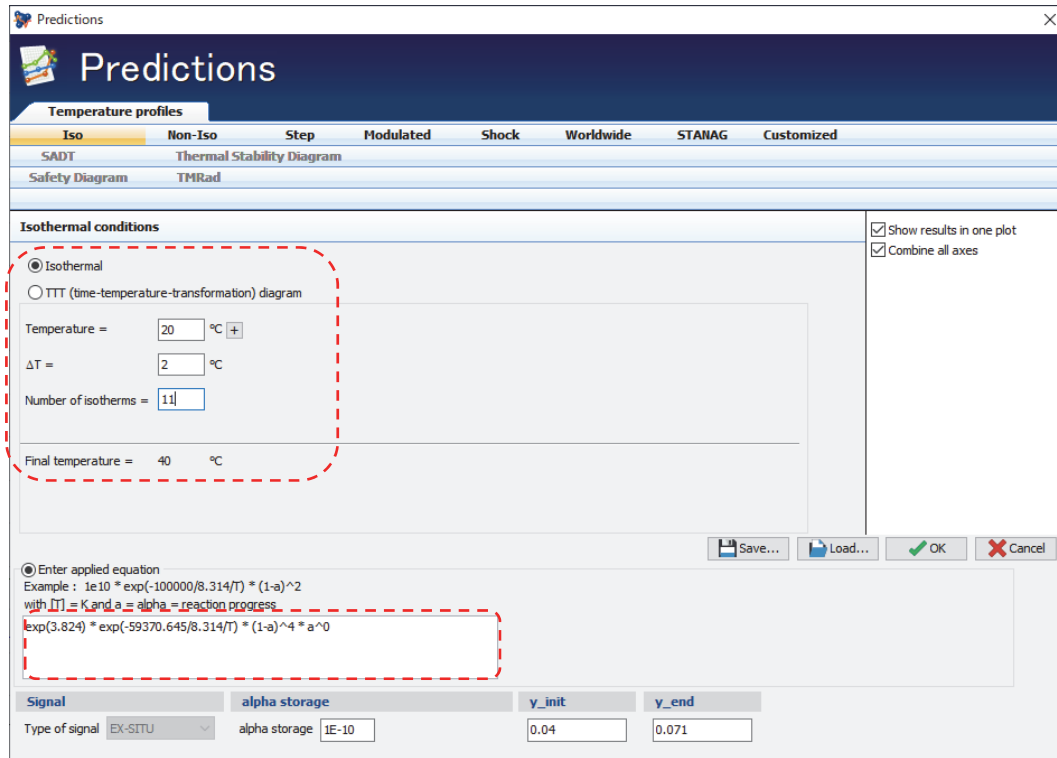
Prediction 機能を使って得られた反応モデル式によりさまざまな条件下の反応プロセスを予測する。

Fig_20 では 20°Cから 2°Cステップで 40°Cまで 11 本の等温条件で反応プロセスを予測する。

下段の Enter applied equation に記載された反応モデルに基づき予測する。

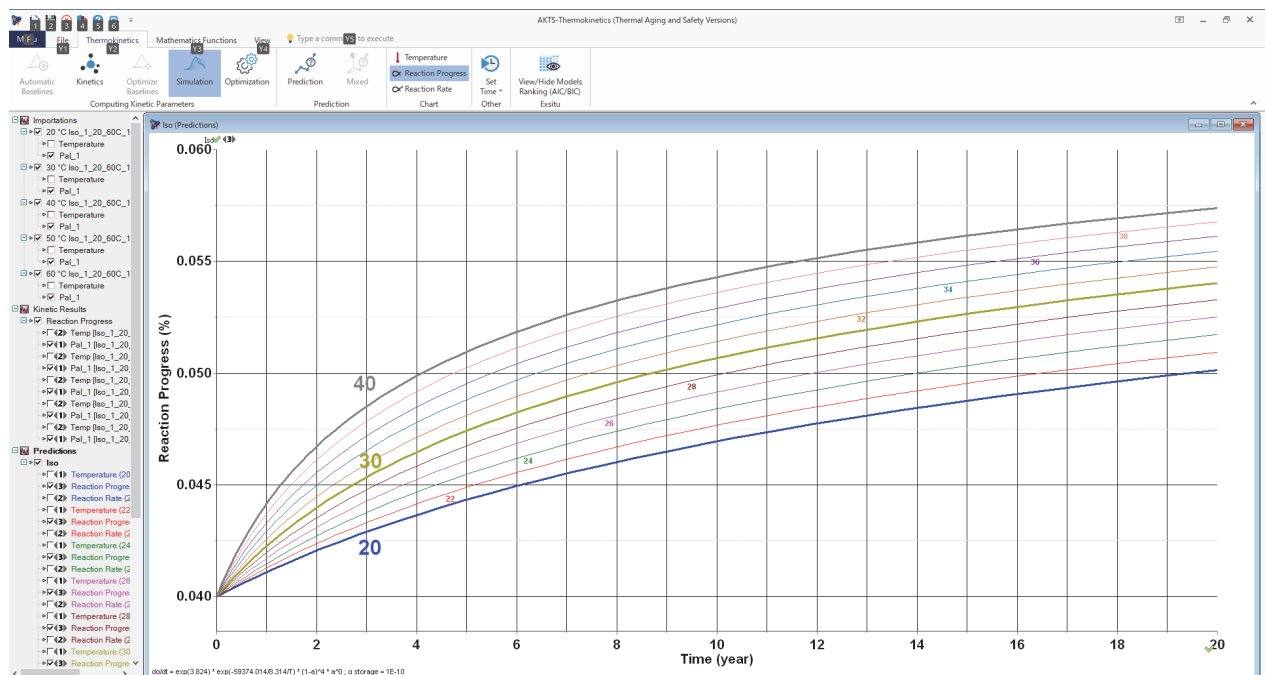
重要：手動で入力した反応モデルでも反応プロセスを予測することができます。

Fig_20:



次ページの Fig_21 は Fig_20 の設定条件で予測された反応プロセス Progress Progress%

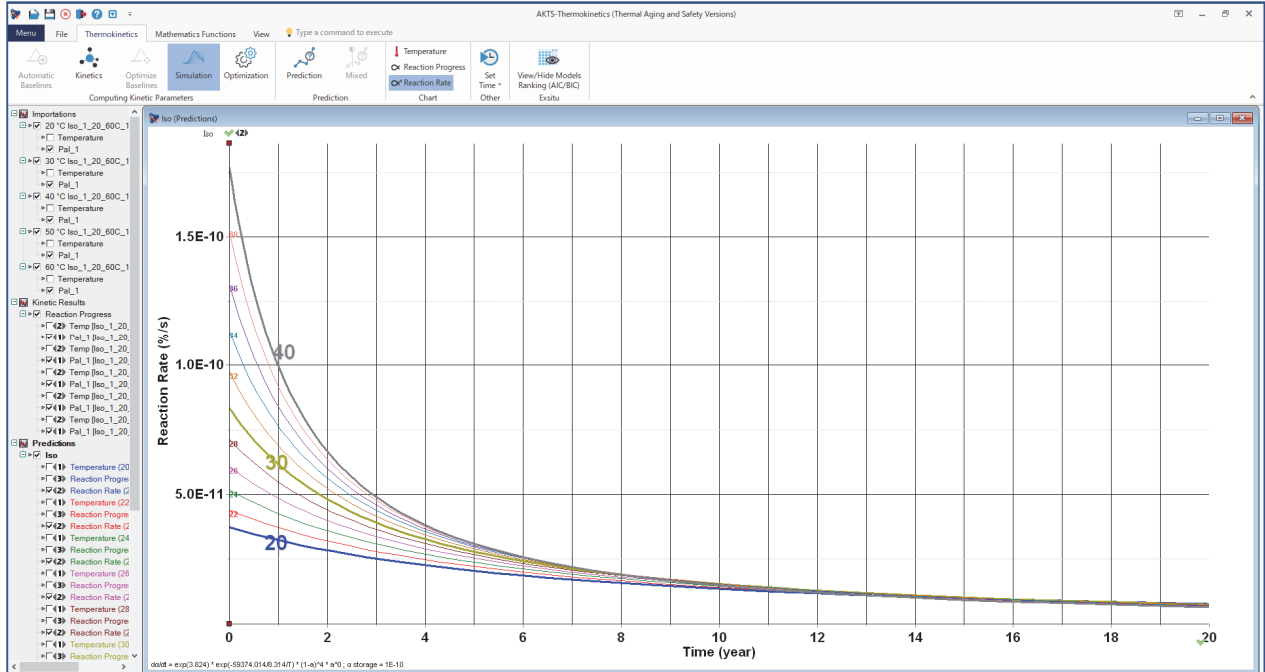
Fig_21



反応式は 4 次式であり、反応速度は時間経過とともに指数関数的に減少する。

Fig_22 は Fig_20 の設定条件で予測された反応速度 Reation_Rate %/s

Fig_22



II : 測定データ数や温度水準と解析精度の関係

測定データの数や温度水準で反応モデル式はどのようになるか？

I の操作手順で予測された反応モデル式を使って等温条件 30,40,60°C で予測される Fig_101,102,103 を作成します。これらの予測データは反応モデル式から計算されているので原理上、測定誤差がありません。Table_101,102,103 すべての測定データ（合計 36 個）から I の操作手順に従って反応モデルを求めたらどうなるでしょうか？

Table_101: 30°C 12 個 19 month

Time(month)	Temp(° C)	Reaction Progress (%)
0	30	0.04
1.286685	30	0.040277
2.78076	30	0.040587
4.337015	30	0.040897
5.958718	30	0.041207
7.649346	30	0.041517
9.4126	30	0.041827
11.252422	30	0.042137
13.173015	30	0.042447
15.178859	30	0.042757
17.274737	30	0.043067
19.465759	30	0.043377

Table_102: 40°C 11 個 9 month

Time_month	(° C)	Reaction Progress (%)
0	40	0.04
1.31061	40	0.040587
2.044093	40	0.040897
2.808424	40	0.041207
3.605239	40	0.041517
4.436285	40	0.041827
5.303418	40	0.042137
6.208619	40	0.042447
7.154	40	0.042757
8.141816	40	0.043067
9.174474	40	0.043377

Table_103: 60°C 12 個 3.5month

Time(month)	Temp(° C)	ReactionProgress (%)
0	60	0.04
0.917044	60	0.041517
1.128433	60	0.041827
1.349	60	0.042137
1.579251	60	0.042447
1.819723	60	0.042757
2.070988	60	0.043067
2.333659	60	0.043377
2.608392	60	0.043687
2.895885	60	0.043997
3.19689	60	0.044307
3.512208	60	0.044617

注目

操作手順で使用した実測データの有効数字は Example 0.0402% のように 3 桁でした。今回使用する予測データは使用された反応モデル式から算出され、誤差が zero です。したがって有効数字も 5 桁あります。

この事例では測定データの非常に精度が高い場合について記述しています。

言い換えると測定データの精度が非常に高い場合には、測定データや温度水準の数により予測精度が大きく影響がないことを示しています。

逆に言えば、測定精度が低い場合には測定データ点数や温度水準が多いことが必要になります。

Table_101, 102, 103 の合計 35 個の予測濃度データを使用して、反応モデル式を求めた。
その結果が Fig_17 であり、下記の青線枠内の反応モデル式から算出されている。

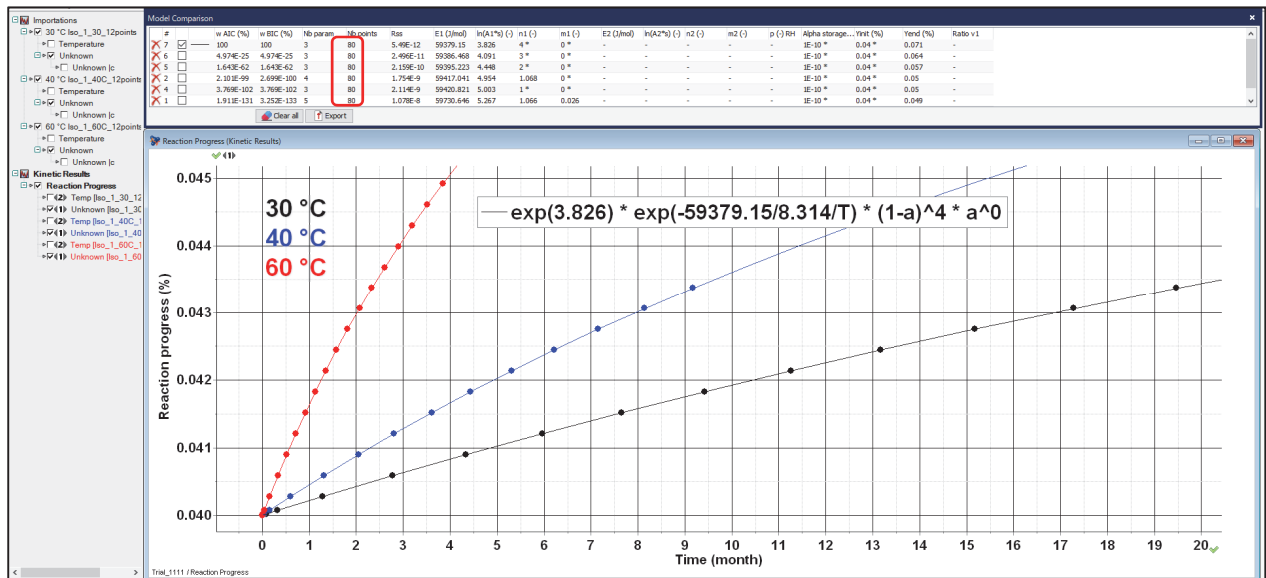
$$\boxed{45.786945} \text{ 1/s} \cdot \exp\left(\frac{-59370.645 \text{ J/mol}}{R \cdot T}\right) \cdot (1-\alpha)^4 \cdot \alpha^0$$

ここで 30, 40, 60°C の等温予測データは 430 個得られるが、反応初期の 80 個のみ抽出している。
(80/430) × 100 = 18.6% のデータを使って得られた反応モデル式は下段の緑色枠である。

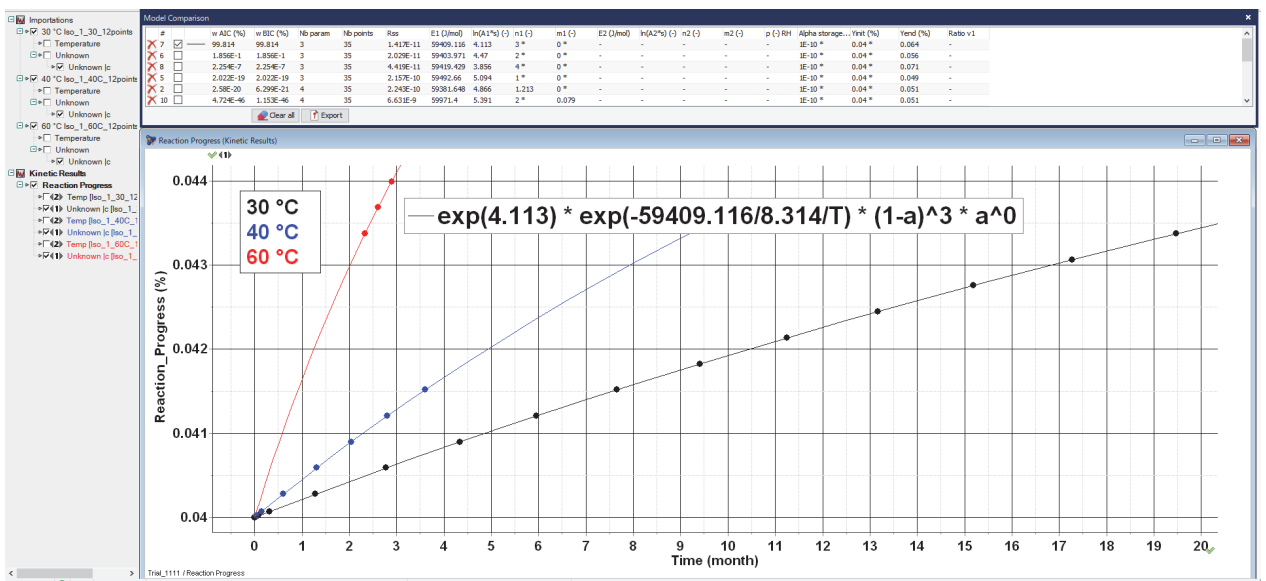
$$\boxed{45.895634} \text{ 1/s} \cdot \exp\left(\frac{-59379.15 \text{ J/mol}}{R \cdot T}\right) \cdot (1-\alpha)^4 \cdot \alpha^0$$

元の反応モデル式とほぼ同じ反応モデル式が得られる。計算結果は当然の結果である。

Fig_101: データ点数合計 **80points**

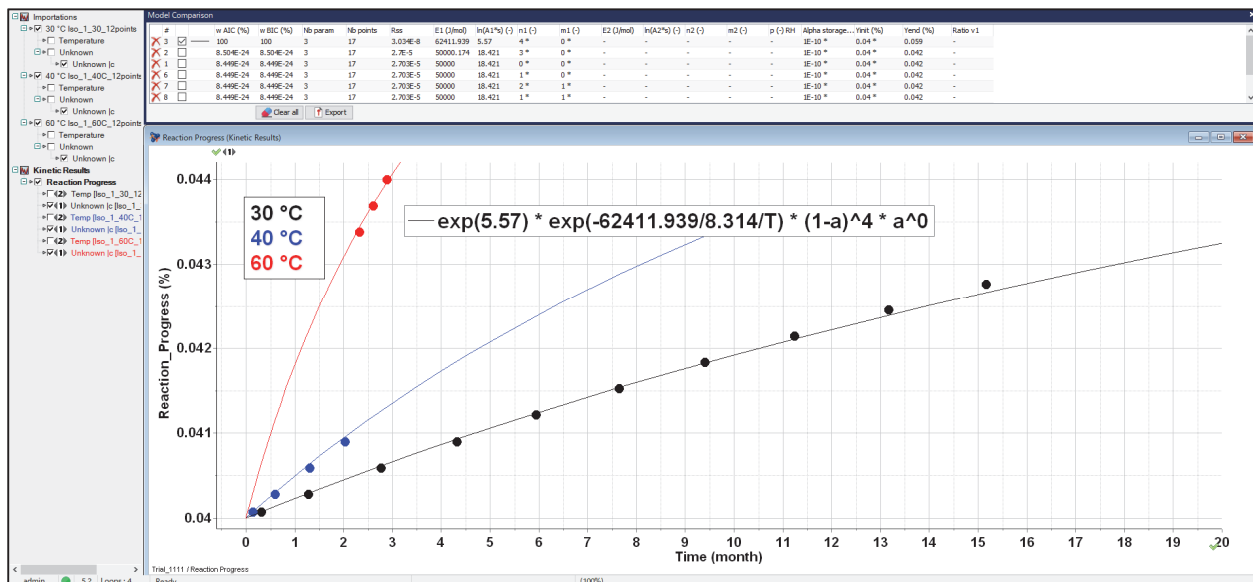


Fig_102: データ点数合計 **35points**



データ点数が少なくても 1 系列が広い範囲で測定データが高精度で採取されて入れた他の温度水準のデータ数が少なくても、反応モデル式の予測が可能と推定される。

Fig_103 : データ点数合計 17points



20

AKTS が推奨する測定データは

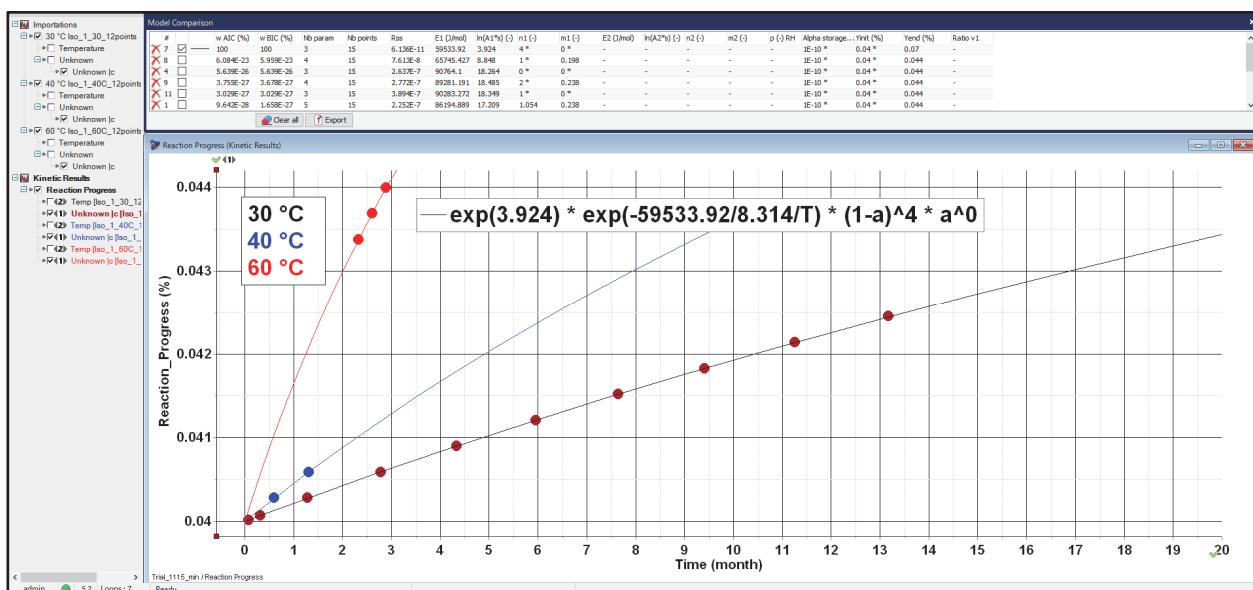
- 1) 高い温度条件で大きな変化量が測定できていること
- 2) 初期値が正確に求められていること
- 3) 低い温度の 1 系列はある程度の長期間測定データであること。

下記の例で言えば 60°C 等温で 0.044% までの測定データが得られている

30°C 等温では 13 か月間の長期間データ 初期値は 30, 40, 60°C 同一の 0.0400% と仮定している。

この場合、測定データが 15 点でも元の反応モデル式がほぼ探索されている。

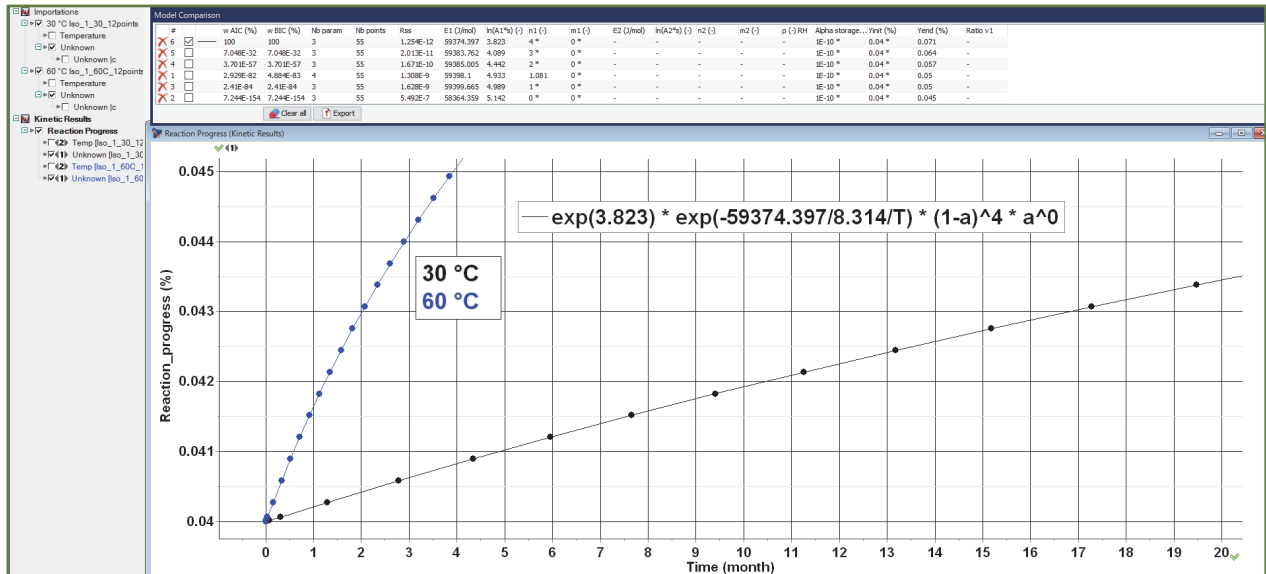
Fig_104 : データ点数合計 15points



温度が 2 水準ではどうなるか？

30, 60°Cの組み合わせでは、元の反応モデルはほぼ探索された。

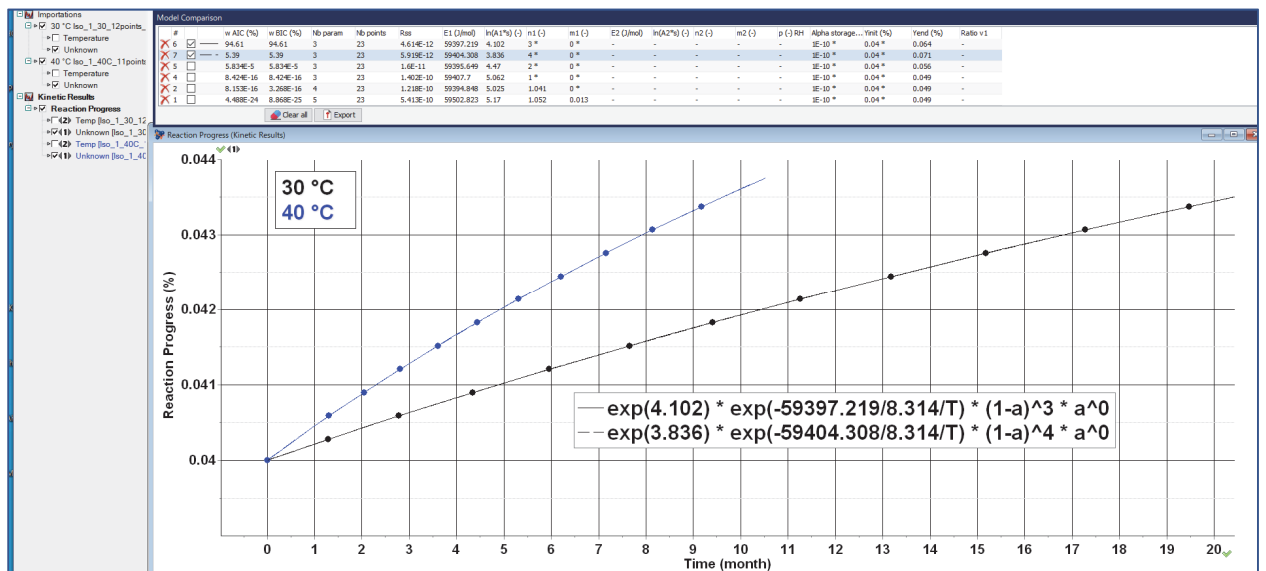
Fig_105



Fig_106 では 30, 40°Cの等温データでは反応モデル式は 3 次式となった。

化学反応プロセスの変化量が十分でないためか、あるいはデータ点数が 22 点と少ないためと推定される。

Fig_106



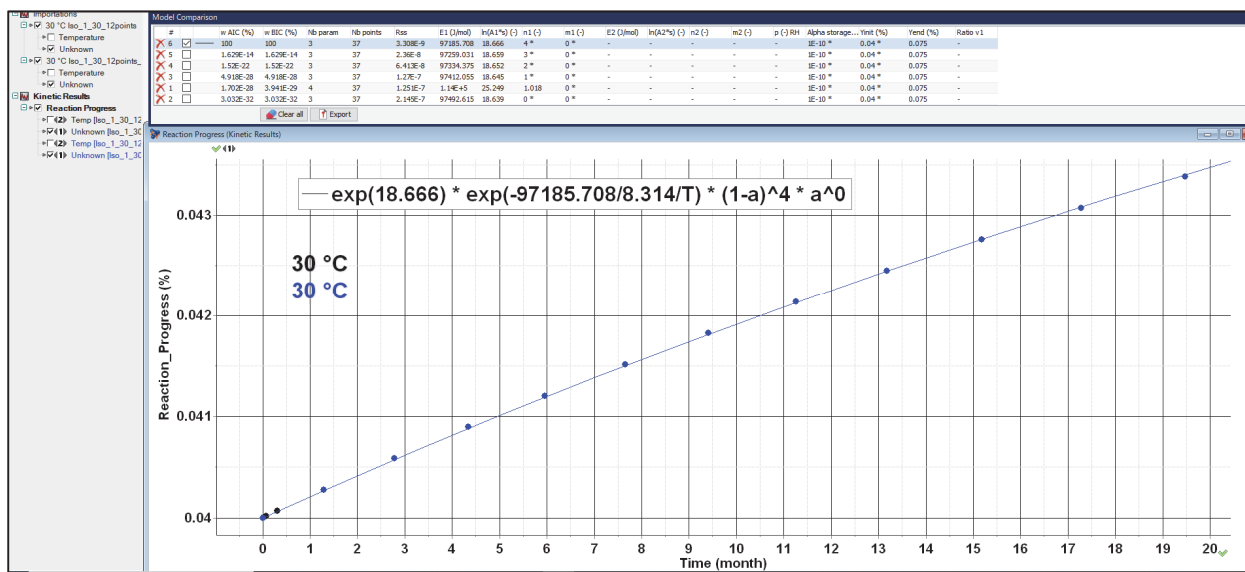
温度水準が 1 水準の場合は、推定されるように活性化エネルギーはうまく計算できないが、反応モデルが 4 次式であることは探索できている。

なお 1 水準の測定データ 1 点では反応モデル式は計算できない。

そこで同じ測定データを追加して読み込み、測定データが 2 点あるようにすれば Thermokinetics は一応、計算結果を算出する。

ただし活性化エネルギーに精度を求めることはできない。

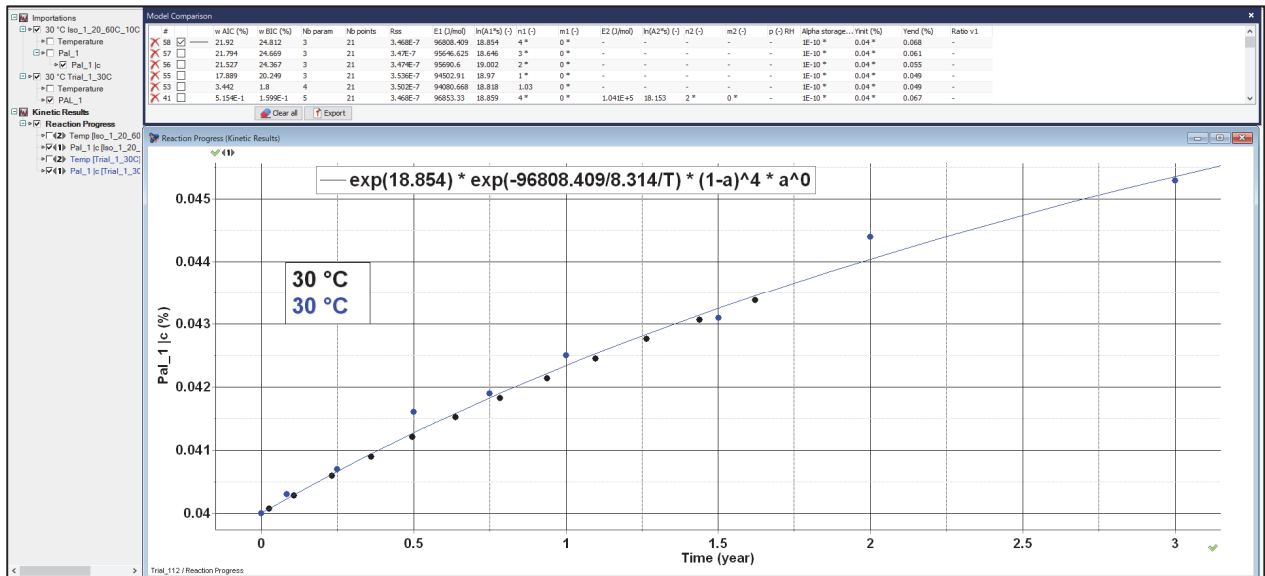
Fig_107



最後の Fig_108 の事例は操作手順書で想定した Fig_01 の 30℃等温測定データを使用して温度 1 水準、測定データ 2 系列で反応モデル式を探索した結果です。

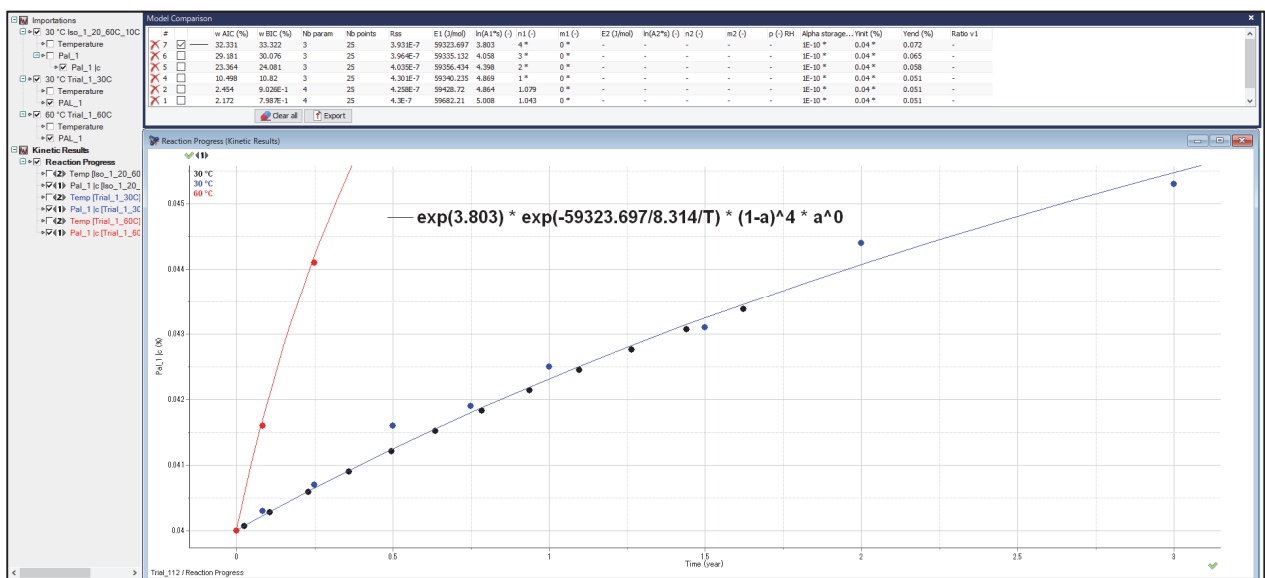
Fig_107 と同様に反応モデル式が 4 次式であることは探索できているが、活性化エネルギーは当然ながら求めることはできない。

Fig_108



そこで 60℃の等温測定データを初期値を含めて 3 点追加すれば、活性化エネルギーがほぼ正しく求めることができる。

Fig_109



追加情報：相対湿度データの取扱いについて

加速試験による劣化挙動は相対湿度により劣化が促進されることがあります。

加速試験が相対湿度の一定条件で測定している場合、相対湿度%情報を入力することができます。

ただし相対湿度条件のパラメータがそのまま計算されることはありません。

Discontinueous データ解析は相対湿度条件が含まれた状態での劣化挙動を反映したモデル反応式が計算されます。しかしこれら相対湿度%の値により劣化モデル反応式にどのようなようになるかを見極めるには下記のような測定データ群が必要になります。

1) 事例として例えば、下記のような測定データ群があるとすれば

データ群 1: 100 °C(等温)_0 RH%

データ群 2: 100 °C(等温)_50 RH%

データ群 3: 100 °C(等温)_100 RH%

データ群 1: 110 °C(等温)_0 RH%

データ群 2: 110 °C(等温)_50 RH%

データ群 3: 110 °C(等温)_100 RH%

データ群 1: 120 °C(等温)_0 RH%

データ群 2: 120 °C(等温)_50 RH%

データ群 3: 120 °C(等温)_100 RH%

データ群 1 の解析結果より

相対湿度 0RH%での劣化反応式が算出

データ群 2 の解析結果より

相対湿度 50RH%での劣化反応式が算出

データ群 3 の解析結果より

相対湿度 100RH%での劣化反応式が算出

2) 各等温条件で相対湿度条件が異なる時、それぞれの等温条件でそれぞれの相対湿度を入力します。

この場合、それぞれの等温条件で異なる相対湿度環境下での劣化挙動を反映する“劣化反応モデル式”が得られることとなります。

入力された湿度条件は実験条件情報であり、湿度情報の値が直接反応モデル式の探索計算に用いられている訳ではありません。