

ガスジェット浮遊法による熔融金属酸化物の熱物性値測定法の確立

静的液滴形状のモデルと Physics-Informed Neural Network を用いた逆問題による物性値同定法

白鳥 英 (都市大), 吉野 裕斗 (都市大・院), 碓井 択郎 (都市大・院), 小澤 俊平 (千葉工大), 清宮 優作 (千葉工大・院), 河口東平 (千葉工大・学), 高橋 勇太 (千葉工大・学), 小島秀和 (同志社大), 杉岡健一 (富山県立大), 石川毅彦 (JAXA)

Measurement framework for thermophysical properties of molten metal oxides by aerodynamic levitation

Identification procedure of surface tension from static drop shape based on physics-informed neural network

Suguru Shiratori*, Yuto Yoshino, Takuro Usui, Shumpei Ozawa, Yusaku Seimiya, Tohei Kawaguchi, Yuta Takahashi, Hidekazu Kobatake, Ken-ichi Sugioka, Takehiko Ishikawa

*TokyoCity Univ. Tamazutsumi Setagaya, Tokyo 158-8557

E-Mail: sshrator@tcu.ac.jp

Abstract: When measuring thermophysical properties by the gas-jet levitation method, there is a problem of uncertainty due to the fact that a part of the levitated droplet is hidden by the nozzle. In this paper, we propose a method to identify thermophysical properties of a droplet by minimizing the effect of concealment by the nozzle, based on a data assimilation method using a Physics-Informed Neural Network, and a physical model of the droplet surface shape under pressure from the gas jet in addition to Laplace pressure and gravity. The proposed method identifies the physical properties by minimizing the effect of nozzle concealment.

Keywords; Aerodynamic levitation, static droplet shape, data assimilation

1 はじめに

近い将来に月面で人類が生活する構想が多方面から議論されている。JAXA からは約 10 年後に 500 日間の長期有人月面探査が掲げられており¹⁾, その場資源を用いた持続的な有人活動の足掛かりを得ようとしている。月面での有人探査拠点における外壁には、気密性・耐熱性・耐放射性などが要求される。その場資源を用いた建材の製法として、焼結によるレゴリスブロックの研究例²⁾があるが、外壁に関しては焼結製法では強度に関して懸念があり、熔融・再凝固プロセスを用いた製法が不可欠と考えられる。十分なエネルギーが確保されない段階で金属の熔融を伴う製法を実現するには、事前に十分なシミュレーションを行って利用エネルギーを最小限に抑えつつ、要求強度を達成できる製法を確立する必要がある。このようなシミュレーションを行うためには、月レゴリスに関する熱物性値のデータベースが不可欠である。月レゴリスの材料組成に関しては過去のサンプルリターンミッションのデータに基づいた分析結果³⁾があり、 SiO_2 , Al_2O_3 , FeO などの金属酸化物が多く含まれることが分かっている。しかし、金属酸化物に関しては熱物性値データの整備が進んでおらず、この点が熔融凝固プロセスの設計における数値シミュレーション活用の障壁となっている。

酸化物を含めた金属融液の熱物性値測定法として、電磁浮遊法・静電浮遊法・ガスジェット浮遊法の 3 種類の浮遊法が知られている。いずれも、浮遊した液滴を観察して静的・動的な表面形状の解析から密度・表面張力・粘性係数等を同定する方法である。中でもガスジェット浮遊法は、ノズルから噴出されたガスによる流体力によ

て液滴を浮遊させる方法であり、他の浮遊法と比較して原理が極めて単純で安価に装置を構成できる。浮遊させる試料や雰囲気に関する制約もなく、浮遊力と試料の加熱も独立しているため、高温条件での測定も可能である。一方で、現状のガスジェット浮遊法には Fig. 1 に示すような課題がある。まず、構造上、浮遊液滴のかなりの部分がノズルに隠れるため、液滴形状の一部が観察できない。液滴形状が真球であれば、部分的に観察した形状から液滴の体積を同定できるが、液滴形状は少なからず真球からの偏差があるため、同定する液滴体積に不確かさが残る。液滴形状が真球から変形するのは、液滴の自重による効果に加えて、吹き付けガスによって液滴表面に圧力が掛かるためであり、これらすべてを考慮した表面形状の物理モデルが定式化されていない。さらに、吹き付けガスによって液滴表面にせん断力が掛かり、これによる内部流動が発生する。また、試料を融解させるためにレーザーで加熱するが、温度分布が生じるためにマランゴニ対流も発生する。これらの内部流れが強い場合は表面振動の周波数や減衰時定数が変化すると考えられ、

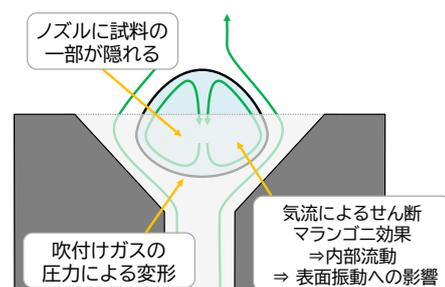


Fig.1 ガスジェット浮遊法の課題

内部流れがない場合の振動論を用いて表面張力・粘性係数を同定すると、実際の値と乖離する懸念がある。実際、粘性係数に関しては、ガスジェット浮遊法による振動の減衰が、ISSのELFで測定した値よりも有意に速く、見かけの粘性係数が大きく算出されるとの報告がある⁴⁾。表面張力と粘性係数に関しても、ガスジェット浮遊法ではRayleigh振動やLambの時定数からの補正が必要であるとの指摘⁵⁾があるが、詳細な補正法は殆ど研究されていない状況にある。ガスジェット法は原理的には試料の種類や雰囲気との制約がなく、簡素で安価な装置構成であるため、上記の課題が解決されれば、極めて適用性の高い物性値測定法になり得る。

本研究は、ガスジェット浮遊法に関する前述の課題を解決し、酸化物を含めた熔融金属の熱物性値（密度・粘性係数・表面張力）を高精度に測定する技術確立することを最終的な目標とし、その足掛かりとして静的な液滴形状から密度と表面張力を同定する方法を検討したので本稿にて報告する。

2 密度の同定

液滴浮遊法での密度同定は、一般的に液滴を側面や上面から撮影し、輪郭抽出等の画像処理から液滴体積を算出することで行われる。ガスジェット浮遊法の場合は、側面からの観察では液滴の一部がノズルによって不可視となるのが課題である。そこで本研究では、Fig. 2に示すような分割型のノズルを試作して浮遊実験を行った。液滴を安定浮遊させて加熱した後にノズルを分割し、分割直後に自由落下してカメラの画角から外れるまでの短時間であれば液滴の側面全域を観察することができる。

この方法の妥当性を検証するため、反応性の低い白金を用いた実験を行った。取得した液滴画像から、次の手順で密度を同定した。1) 液滴画像に仮中心を設定し、半径方向の1次元の輝度値分布に対してtanh関数でフィッティングし、輪郭位置 $r_e(\varphi)$ を算出する。2) 画素の離散

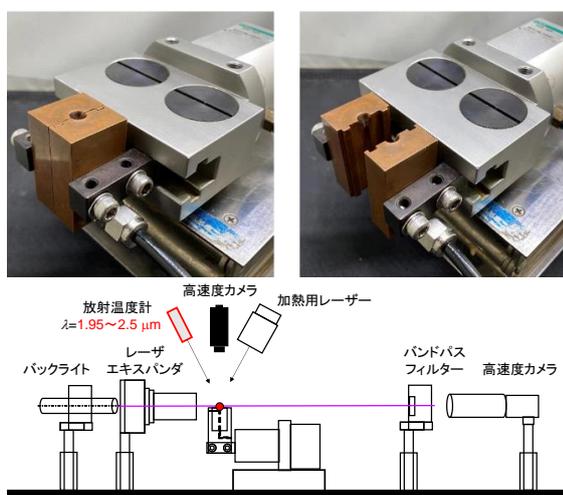


Fig.2 密度計測用の装置構成. 分割型のノズルを用いて液滴全域を観察する。

性に起因した高調波成分を除去するために、Legendre級数を用いてフィッティングする。3) 最大半径となる方向を回転対称軸と仮定し、輪郭分布から数値積分して体積を計算する。尚、寸法が既知の固体真球を用意し、これを浮遊させた際の画像を、カメラの画角と光源設定を液滴浮遊時と同一にして撮影しておくことで画素と実寸法の関係を事前に得た。これらの方法は、分割ノズルを用いた点以外は、密度測定で一般的に行われている手法に準じている。

分割ノズルを用いた密度同定の妥当性を検証するため、反応性の低い白金を用いた実験を行った。Fig. 3(a)は、前述の方法で同定した密度を温度の関数として示したものである。図中の赤線は、Ishikawa *et al.*⁶⁾によって静電浮遊法により測定されたデータである。比較的低温側 ($T < 2200$ K) の条件においては、Ishikawa *et al.*⁶⁾との相対誤差が約6%以内であるのに対し、高温側 (2200 K $< T$) では誤差が大きい。Fig. 3(b)は、Fig. 3(a)における各点に対応する液滴画像を示したものである。Ishikawa *et al.*⁶⁾との誤差が大きい条件では、液滴の側面画像は真円から扁平している傾向が見取れる。液滴側面画像の最大半径 r_{max} と最小半径 r_{min} を用いて、液滴の扁平度を $f = 1 - r_{min}/r_{max}$ と定義し、扁平度に対して密度をプロットしたものがFig. 3(c)である。扁平度が大きいほど密度値が大きく算出されていることが分かる。本研究では液滴が軸対称性を有することを仮定して体積を算出しているが、扁平度が大きい条件では軸対称性が低下している可能性がある。この点の改善余地としては、分割ノズルの形状や分割手順の調整等により軸対称性を高めることや、側面と上面から同期撮影することで軸対称性の程度を判断することなどが考えら

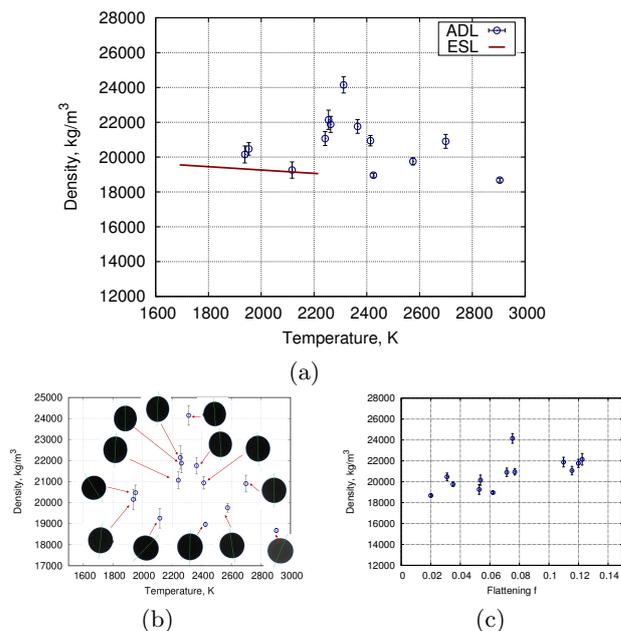


Fig.3 密度の同定状況. (a) 同定した密度の温度依存性. (b) 各同定結果に対応する液滴画像. (c) 液滴の扁平率に対する同定密度。

れる。

3 表面張力の同定

3.1 概要

液滴がノズルに隠れ、液面形状が部分的にしか得られていない状況であっても、観測された部分の液面形状には表面張力の影響が反映されていると期待できる。本研究では、Fig. 4 に示す方法で部分的な液面形状から表面張力を同定する方法を提案する。まず、液滴が安定浮遊している状態では、重力、ラプラス圧、ガスジェット圧力が平衡していると仮定し、これを記述する数理モデルを立てる。液滴の表面張力を適当に初期化し、この数理モデルを用いて液滴形状を予測する。実際にガスジェット浮遊させた液滴の部分的な形状を取得し、モデルによる予測分布との誤差を評価する。この誤差が最小となるように表面張力の値を決定する。

3.2 静的表面形状の数理モデル

液滴は重力方向に軸対称と仮定し、球座標系 r, φ を導入すると、液滴の静的形状に対して下記の微分方程式が得られる。

$$K - \frac{2}{\Gamma} - Bo(1 - Z) + BoP_s C_p(\varphi) = 0 \quad (1a)$$

$$K = \frac{R^2 + 2R'^2 - RR''}{(R^2 + R'^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{R + R' \tan(\varphi)}{R(R^2 + R'^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (1b)$$

式 (1a) はラプラス圧と重力の平衡として知られる Young-Laplace の式にガスジェット圧力の項を追加したものであり、式 (1b) は球座標系における曲率 K である。方程式は、長さスケールを真球相当半径 R_0 、圧力のスケールを $\rho g R_0$ として無次元化しており、登場する無次元数は下記の通りである。

$$R = \frac{r}{R_0}, Z = \frac{z}{R_0}, Bo = \frac{\rho g R_0^2}{\sigma}, P_s = \frac{p_s}{\rho g R_0}, \Gamma = \frac{R_s}{R_0} \quad (2)$$

R_s は液滴上面における曲率半径、 p_s はガスジェット圧力分布のよどみ点圧であり、 $C_p(\varphi)$ はよどみ点圧力で規格化したガスジェット圧力分布 (圧力係数) である。

3.3 ガスジェット圧力のモデル

ガスジェット圧力の分布 $C_p(\varphi)$ は、本来は液滴の形状に依存して複雑に変わり得るが、本研究では簡単のために $C_p(\varphi)$ を液滴形状やガス流量に依らない固定の関数形であると仮定した。関数形は、液滴を真球とした場合の

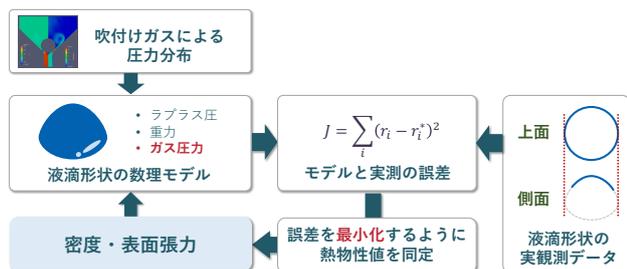


Fig.4 データ同化による物性値同定方法の構成

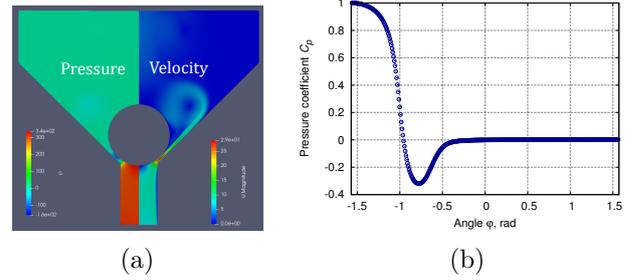


Fig.5 OpenFoam による液滴周りの気流の計算結果. (a) 圧力 (左) と速度の分布, (b) 液滴表面の圧力係数分布. よどみ点圧で規格化.

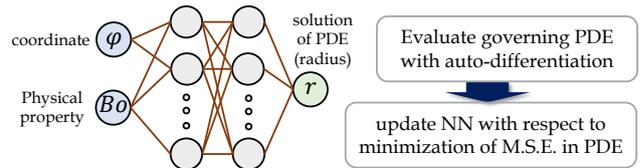


Fig.6 Physics-informed network

気流分布を汎用の流体計算ソルバー OpenFoam を用いて計算し (Fig. 5(a)), 液滴表面に掛かる圧力分布をよどみ点圧で規格化したもの (Fig. 5(b)) を C_p とした。

3.4 数値計算法: Physics-informed neural network

本研究では、Bond 数 Bo が与えられた時の液滴形状を支配方程式 (1) を解くことで計算する順方向の計算と、式 (1) による形状と浮遊液滴の画像から得た液滴形状との誤差を最小化することで Bo を同定する逆問題の計算が必要である。逆問題では Bo を変えた時の液滴形状の変化、つまり勾配 $\partial r / \partial Bo$ を頻繁に計算する必要があるが、式 (1) は強い非線形性を持つため解析的に勾配を得ることは難しい。差分法等の一般的な微分方程式の数値計算法の場合、勾配 $\partial r / \partial Bo$ は数値微分で計算することになるが、これには計算コストが掛かる。本研究では、近年提案された Physics-Informed Neural Network (PINN)⁷⁾ という物理法則の機械学習法を用いて式 (1) を計算した。PINN の特徴は、入力から出力を得る非線形写像を、Neural Network という、線形結合と初等的な非線形関数の組み合わせの形態として得られるという点にある。PINN では支配方程式の評価の際に自動微分を用いるが、この自動微分は学習後に解のパラメータ依存性を計算する際にも利用できる。筆者らはこの点に着目して、新たなデータ同化法の枠組みを提案し、応用を進めている^{8,9)}。

本研究では、データ同化の評価関数を

$$J(Bo) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} [(R_i^m - R_{\text{PINN}}(\varphi_i, Bo_*))^2] \quad (3)$$

と定義する。ここで R_i^m は観測した液滴半径の離散データ、 $R_{\text{PINN}}(\varphi_i, Bo_*)$ は予測値 Bo_* を用いて PINN で計算した液滴半径である。式 (3) の Bo に対する勾配

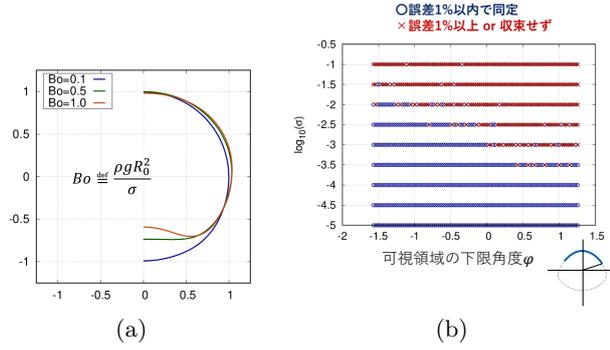


Fig.7 (a) 順問題の計算結果, (b) 逆問題の双子実験の結果

$\partial J / \partial Bo$ は, 下記のように変形できる.

$$\frac{\partial J}{\partial Bo} = - \sum_{i=1}^N [(R_i^m - R_{\text{PINN}}(\varphi_i, Bo_*))] \frac{\partial R_{\text{PINN}}}{\partial Bo} \quad (4)$$

この式中の $\partial R_{\text{PINN}} / \partial Bo$ は, PINN の自動微分によって計算できるため, 効率的な同化計算が可能になる.

3.5 計算結果

本研究で用いた PINN は, 全結合型の隠れ層を 6 層, 各層毎のニューロン数を 15 とし, 活性化関数には \tanh 関数を用いた. 学習計算には L-BFGS-B 法を用いた. Fig. 7(a) は, $Bo = 0.1, 0.5, 1.0$ と 3 通り変えた場合の液滴形状を PINN によって計算したものである. Bo が大きいと相対的に表面張力の寄与が小さくなり, 液滴の変形が激しくなることが分かる.

逆問題, つまり液滴形状から Bo を同定する問題の妥当性検証は, 今回は実測データは用いずに双子実験にて行った. まず, Bo の真値 Bo_{true} を設定し, これを学習済みの PINN に入力して得た液滴形状に正規分布 $\mathcal{N}(0, \sigma_N)$ のノイズを加えて, 上面側の一部のデータのみを観測値とする. Bo_{true} は伏せておき, Bo の推測値 Bo_* を適当に初期化し, これを同様に学習済みの PINN に入力して液滴形状の予測値を得る. 観測値と予測値の誤差の二乗和が最小となるように Bo_* を $Bo_*^{\text{opt}} = \text{argmin} J(Bo)$ と決定した時, 予測値との相対誤差

$$\epsilon = \frac{Bo_*^{\text{opt}} - Bo_{\text{true}}}{Bo_{\text{true}}}$$

を評価した. Fig. 7(b) は, 横軸に観測データの偏角範囲の下限, 縦軸に観測値に与えたノイズの標準偏差 σ_N を取り, データ同化した際の真値との誤差が $\epsilon \leq 0.01$ となった条件を青○, 誤差が $\epsilon > 0.01$ であるか同化計算が収束しなかった条件を赤×で示している. ノイズが十分小さい場合は液滴の上面付近のみ観測できれば Bo を同定できており, ノイズレベルが大きくなると液滴の下方まで観測できなければ同定精度が下がることが分かる. たとえば, 液滴の上部側の半分が観測できている場合 ($\varphi = 0$), 十分な精度で同定するにはノイズレベルが 0.1% 以下である必要がある. 仮に液滴形状の不確かさが画像の解像度のみで決まるとした場合, 不確かさは 1

ピクセル程度と考えられるが, ノイズレベルを 0.1% 以下とするには液滴の半径を 1000 ピクセルで捉える必要がある. 上面側の形状をかなり高解像度で観測できなければ十分な精度での同定は難しいと言える.

同定精度を高めるための方策としては, 観測可能な上面側で表面張力による応答感が低いため, これを高くすることが有効と考えられる. 例として, ノズル形状や吹き出し機構の工夫により, 液滴の側面側に掛かるガス圧力を高くするなどが考えられる.

4 まとめと今後の課題

ガスジェット浮遊法による熱物性値の測定方法の確立に向けて, ノズルによる液滴形状の隠蔽の課題に対して 2 つのアプローチで取り組んだ. 密度については分割型ノズルを用いて液滴側面全域を観測する方法を用い, 液滴の扁平度が小さい場合には既往研究と同程度の精度で密度を導出できた. 扁平度が大きい条件での密度同定については液滴の軸対称性を高めるなどの改良が必要と考えられる.

液滴の上面側の一部の形状から, データ同化法によって表面張力を同定する方法を提案した. Young-Laplace 方程式にガスジェット圧力項を追加することで数理モデルを立て, このモデルを PINN によって学習させることで効率的に逆問題を計算する方法を構築した. 構築した方法によって, ノイズが小さい条件であれば十分な精度で表面張力を同定できることを確認し, 提案手法の原理自体は検証できた. 一方, 表面張力を十分な精度で同定するには, 極めて高い解像度で液滴形状を観測する必要があり, 現実的にはガスジェット圧力分布を意図的に変更するなど, 液面上部の形状に対する表面張力の感度を高めるような改良が必要である.

謝辞

本研究の一部は 2022 年度宇宙環境利用専門委員会 フロントローディング研究の助成を受けて行われた. 記して謝意を表する.

参考文献

- 1) JAXA 国際宇宙探査センター; 日本の国際宇宙探査シナリオ (案)2021.
- 2) 金森・篠田, 第 34 回宇宙エネルギーシンポジウム (2015).
- 3) Schreiner et al., Adv. in Space Res. 57(5), pp.1209-1222 (2016).
- 4) T. Ishikawa et al. Int. J. Microgravity Sci. Appl. 39(1) 390101 (2022).
- 5) 石原 他: 日本鉄鋼協会第 183 回春季講演大会 J22(324) (2022).
- 6) T. Ishikawa et al.; Jpn. J. Appl. Phys. 45 1719 (2006).
- 7) M. Raissi et al.; J. Comp. Phys. 378, pp.686-707 (2019).
- 8) Y. Nakamura et al.; Int. J. Numer. Method Fluid 94(9) pp.1359-1378 (2022).
- 9) 白鳥 他: 日本流体力学会 年会 2020 No.012 (2020).