

Investigation and Optimization of Bubble Parameters Governed Laser-induced Microjet

東京農工大学 工学府 機械システム工学専攻

石川達将

(2023年2月)

要旨

本論文では、レーザー誘起マイクロジェットの生成効率向上に向けて、マイクロジェット 速度を支配する気泡パラメータを特定し、そのパラメータがマイクロジェット速度に与え る影響を調査することを目的とする.さらに、マイクロジェット速度を最大化する最適気泡 パラメータを調査することを目的とする.

本研究では初めに、マイクロジェット速度を支配する気泡パラメータの1 つであると示 唆されている気泡数にのみ着目し、数値解析による調査を行った.本調査では、レーザー誘 起マイクロジェットの生成元であるレーザー誘起気泡から伝播する圧力波の数値解析を行 い、圧力波の経路や構造を明らかにした.更に、気泡の体積膨張履歴を用いた考察から、気 泡数を増やすほど圧力波干渉により気泡膨張が阻害され、インパルスが小さくなることを 確認した.

次に、最適化アルゴリズムを用い、マイクロジェット速度にかかわるインパルス最大化を 目的とした気泡最適化を行った.更に、気泡最適化の過程で得た解の集合を、データ解析手 法を用いて解析することで、マイクロジェット速度を支配する気泡パラメータの同定を行 った.これらの結果から、壁面に半円状の気泡を付着させるような気泡配置が最適解として 得られた.本調査によって、気泡の位置、個数、体積がマイクロジェット速度を支配するパ ラメータとして得られた.

最後に、気泡内のエネルギー総量EとインパルスIの比であるエネルギー効率I/Eの最大化 を目的とした気泡最適化とデータ解析を行った.本調査においても、壁面に半円状の気泡を 付着させるような気泡配置が最適解得られた.一方、気泡の位置、個数、体積、エネルギー 総量Eがマイクロジェット速度を支配するパラメータとして得られた. Eが支配パラメータ となることは、Eとエネルギー効率の関係を記述する解析解の導出からも確認された.

Abstract

The objective of this study is to investigate bubble parameters that govern the microjet velocity and their effect on a microjet velocity in order to improve the generation efficiency of a laser-induced microjet. Furthermore, this study is aimed to investigate the optimum bubble parameters that maximize the microjet velocity.

Initially, we numerically investigated pressure waves propagating from laser-induced bubbles, which are the source of laser-induced microjet generation, and clarified the pressure wave path and the pressure field structure. This study focused only on the number of bubbles, which has been suggested to be one of the bubble parameters governing microjet velocity. Furthermore, from a discussion using the volume expansion history of the bubbles, it was concluded that the impulse decreases as the number of bubbles increases due to inhibited bubble expansion caused by pressure wave interaction.

Next, we optimized the bubbles to maximize the impulse, which affects the microjet velocity by using an optimization algorithm. From these results, a semicircular bubble on the microchannel wall surface was obtained as the optimal solution. Furthermore, the set of solutions obtained during the bubble optimization process was analyzed using data analysis techniques to obtain the bubble parameters governing the microjet velocity. The position, number, and volume of bubbles were obtained as the governing parameters in this investigation.

Finally, bubbles were optimized to maximize energy efficiency (I/E), which is the ratio of total energy in the bubble E to impulse I, and data obtained in the optimization process was analyzed. A semicircular bubble on the microchannel wall surface was also obtained as the optimal solution in this optimization. On the other hand, the position, number of bubbles, volume, and total energy E were obtained as the governing parameters of the microjet velocity. The reason that E is the governing parameter was also confirmed by the derivation of an analytical solution that describes the relationship between E and energy efficiency.

目次

1章	序論	1
1.1.	レーザー誘起マイクロジェット	1
1.2.	先行研究	6
1.3.	本論文の目的	11
1.4.	本論文の構成	12
2章	支配方程式と数値解析法	15
2.1.	支配方程式	18
2.2.	数值解析法	
2.2.1.	有限体積法	18
2.2.2.	勾配計算法	19
2.2.3.	非粘性項評価法	20
2.2.4.	再構築法	25
2.2.3.	粘性項評価法	28
2.2.4.	表面張力項評価法	29
2.2.5.	境界条件	29
2.2.6.	時間積分法	30
2.3.	まとめ	31
3章	最適化手法	32
3.1.	関数最適化問題とその解法	33
3.2.	CMA-ES: Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy	34
4章	データ解析手法	35
4.1.	データ解析	35
4.2.	次元削減法	36
4.2.1.	PCA: Principal Component Analysis	36
4.2.2.	t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding	37
5章	気泡数がマイクロジェット生成に与える影響	39

5.1.		39
5.2.	数值解析条件	40
5.3.	結果及び考察	43
5.3.1.	マイクロジェット速度及び力積の時間発展	43
5.3.2.	単一気泡周りの圧力場時間発展	46
5.3.3.	複数気泡周りの圧力場時間発展	50
5.3.4.	考察	53
5.4.	まとめ	54
6章	気泡パラメータの最適化とマイクロジェット生成	5(
	を支配的するパラメータの解明	50
6.1.	諸論	56
6.2.	数值解析条件	56

6.3.	最適化問題の定式化及びデータ解析設定	58
6.4.	最適化結果	59
6.5.	最適化データの解析結果	60
6.6.	エネルギー削減率	64

65

66

6.7. まとめ

エネルギー効率最大化を目的とした 7章

気泡パラメータの最適化

7.1. 諸論 66 7.2. 数值解析条件 66 7.3. 最適化問題の定式化及びデータ解析設定 67 7.4. 最適化結果 68 最適化データの解析結果 7.5. 70 7.6 力積と気泡内部エネルギーEの関係 75 7.7. まとめ 76 8章 結言 77

参考文献	79
诊 方义\\\\	/9

	研究業績	89
A	数値解析手法のバリデーション	91

付録 B 格子収束性 93

付録

付録C	粘性及び表面張力が	0.4
	マイクロジェット速度評価に与える影響	94

図目次

図 1.1	レーザー誘起マイクロジェットの射出方法	2
図 1.2	Antkowiak らによる撃力によるマイクロジェット生成	3
図 1.3	Onuki らによる撃力を使用したマイクロジェット生成	3
図 1.4	Bergmann らの円盤を液中に侵入させた際に生ずる空隙を用いた	4
	マイクロジェット生成	
図 1.5	Fedorchenko らによる界面への液滴滴下による空隙発生を利用した	4
	マイクロジェット生成	
図 1.6	Tagawa らのレーザー誘起衝撃波を用いたマイクロジェット生成	5
図 1.7	Peters らによる接触角とジェット速度に関する数値的調査	7
図 1.8	Kyriazis らによるメニスカス形状がジェット速度に与える影響の数値的調査	8
図 1.9	Tagawa らによるレーザー誘起マイクロジェットの実験結果	9
図 1.10	Tagawa らによる圧力インパルス計測実験	10
図 2.1	有限体積法の概略図	18
図 2.2	面座標系の概略図	21
図 2.3	流束 F_n の概略図	21
図 2.4	x−tダイアグラムによる HLL 及び HLLC の模式図	23
図 2.5	構造格子におけるセル番号の並び順	24
図 3.1	CMA-ES の概略図	34
図 5.1	メニスカスがある場合のシミュレーション設定 (w-meniscus setting)	40
図 5.2	メニスカスがない場合のシミュレーション設定 (w/o-meniscus setting)	40
図 5.3	単一気泡のケースにおけるマイクロジェットの時間発展	43
図 5.4	マイクロジェット速度の時間履歴及び最終時刻におけるマイクロジェット形状	44
図 5.5	インパルスの時刻履歴	45
図 5.6	時間 t=0.0, t=0.9, t=1.8, t=3.3, t=4.5,及び t=5.4 における	46
	単一気泡周りの圧力場	
図 5.7	単一気泡におけるプローブで圧力の時刻履歴	47
図 5.8	気泡から圧力プローブまでの圧力波経路模式図	48
図 5.9	各気泡数における圧力場の時間発展	50

図 5.10	複数気泡における圧力プローブの時間履歴	51
図 5.11	気泡総体積の時間履歴	53
図 6.1	最適化に用いる数値解析条件	56
図 6.2	気泡設計パラメータbによる初期気泡分布生成の概念図	58
図 6.3	最適化の履歴	59
図 6.4	最適化過程における近似最適解の遷移	60
図 6.5	空間方の次元削減結果	60
図 6.6	図 6.5 中に示す軸 X1 及び軸 X2 の重みベクトル絶対値	61
図 6.7	空間pの次元削減結果	62
図 6.8	図 6.7 中に示す軸 X1 及び軸 X2 の重みベクトル絶対値	62
図 6.9	気泡の位置,個数,気泡体積の散布図	63
図 6.10	チャネル中心に配置した気泡とチャネル壁面に配置した気泡の	64
	圧力波伝播経路の比較	
図 7.1	IER を目的関数とした場合の最適化履歴	68
図 7.2	IER を目的関数とした場合に得られた最適解	69
図 7.3	気泡設計パラメータbの散布図	69
図 7.4	IER 最適化問題で得た解集合を用いて行った空間 Б の次元削減結果	71
図 7.5	抽出された気泡パラメータの散布図行列	72
図 7.6	IER と $\int_0^{t_{end}} V(t)^{-\frac{1}{3}} dt$ (式(7.6))の関係	74
図 7.7	力積と気泡内部エネルギーの関係	76
図 A.1	Gas-liquid shocktube 問題の数値解と厳密解の比較	92
図 B.1	格子収束性の調査結果	93
図 C.1	単一気泡における粘性及び表面張力を考慮した際と考慮しない際における	95
	マイクロジェット速度の評価結果	
図 C.2	粘性及び表面張力を考慮した場合における各気泡数における	96
	マイクロジェット速度の評価結果	

v

表目次

表 2.1	MUSCL のパラメータ κ	27
表 5.1	各ケースの気泡位置	43
表 5.2	式 (5.6)及び式 (5.7)の計算結果とシミュレーション結果(図 5.7)の比較	49
表 5.3	気泡数2における式 (5.9)及び式(5.10)の計算結果とシミュレーション結果	52
	(図 5.10)の比較	
表 5.4	気泡数3における式(5.9)及び式(5.10)の計算結果とシミュレーション結果	53
	(図 5.10)の比較	
表 5.5	プローブで観測された最大圧力値及びその到達時刻の比較	53
表 5.6	気泡と圧力波が初めて干渉した時刻の比較	54

1章

序論

1.1. レーザー誘起マイクロジェット

Tagawa らは、高速かつ先細形状を有する液体ジェットの生成方法として、レーザー誘起マイクロ ジェットを提案している [Tagawa 2012]. 図 1.1 にマイクロジェット射出の概念図を示す. 初めに、 パルスレーザを対物レンズで集光し、微細管内にレーザー誘起気泡を生成する (図 1.1 (a)). その際、 集光条件によっては複数のレーザー誘起気泡が生成される場合がある [Tagawa 2016]. 続いて、高圧 のレーザー誘起気泡から圧力波が誘起される (図 1.1 (b)). 圧力波は壁や気泡で反射しながら複雑な 圧力場を形成し、メニスカスへと伝播する. メニスカスは圧力波と干渉し、凹面中心方向への界面 運動 (集束効果)が生じる (図 1.1 (c)). 集束効果によってメニスカス中心から最小直径 30 [µm],最大 速度 850 [m/s]程度のマイクロジェットが生成される [Tagawa 2012].

レーザー誘起マイクロジェットと同じく,液体ジェットを生成する方法はいくつか存在する. Antkowiak らは液体を充填した試験管底部に対し、メニスカス方向へ撃力を加えることで圧力波を誘起し、マイクロジェットを生成している (図 1.2) [Antkowiak 2007]. Onuki らは Antkowiak らと同様の方法で高粘度流体の射出可能なデバイスを開発している (図 1.3) [Onuki 2018].また、気液界面付近で気泡や空隙を崩壊させ、空隙が崩壊する際の慣性力により液体ジェットを生成することも可能である [Longuet-Higgins 1983] [Duchemin 2002]. Bergmann らは気相から液相へと個体円盤を侵入させて空隙を生成し、空隙が崩壊する際にジェットが生成されることを報告している (図 1.4) [Bergmann 2009]. Fedorchenko らは液滴を気液界面へ滴下することで界面付近に空隙を発生、崩壊させ液体ジェットを生成している (図 1.5) [Fedorchenko 2004]. これらの方法[Antkowiak 2007] [Onuki 2018] [Longuet-Higgins 1983] [Duchemin 2002] [Bergmann 2009] [Fedorchenko 2004]と比較して、Tagawa 6の方法 (図 1.6) [Tagawa 2012]はジェット速度が1桁程度速く、ジェット径も小さい利点を持つ.このような利点により、インクジェット印刷 [Delrot 2016]やナノ液滴生成 [Xiong 2015]の他、無針注射器 [Tagawa 2013] [Kiyama 2019] [Krizek 2020] [Miyazaki 2021]等、工学及び医学的応用が期待されている. ー方、レーザー誘起マイクロジェットは適用範囲拡大や実用化の観点からいくつかの課題が存在する. Krizek らの無針注射器応用に関する研究によれば、人体の軟組織や脂肪のような組織では十 分な浸透深さを得るものの,弾性率の大きな乾燥皮膚,瘢痕組織,がん組織への注射は,現在のジ ェット出力では難しいとしている [Krizek 2020]. このことから,現在用いられているパルスレーザ ー出力でも大きなマイクロジェット出力を得る効率的な射出方法の検討が望まれる.また,現在超 音速マイクロジェットの生成には出力の高いレーザー装置が必要とされており,先行研究では 100mJのNd:YAG レーザー装置が採用されている [Tagawa 2013].マイクロジェットの生成効率を高 めレーザー出力を低減させることは,装置価格の低下や安全性向上に繋がるため,装置の実現可能 性を高めるための重要な試みであると考えられる.



図 1.1 レーザー誘起マイクロジェットの射出方法. (a) 対物レンズを通してパルスレーザーを微 細管内の液体に集光し,高圧のレーザー誘起気泡を生成する. (b) レーザー誘起気泡から圧力波が 誘起され,メニスカスに向かい伝播する. (c) メニスカスにて圧力波が干渉し,界面が駆動する. 界面の凹面により,凹面中心方向への界面運動が生じ,マイクロジェットが生成される.



図 1.2 Antkowiak らによる撃力によるマイクロジェット生成. 図は, [Antkowiak 2007]より引用した.



図 1.3 Onuki らによる撃力を使用したマイクロジェット生成. 図は, [Onuki 2018]より引用した.



図 1.4 Bergmann らによる円盤を液中に侵入させた際に生ずる空隙を用いたマイクロジェット生成. 図は, [Bergmann 2009]より引用した.



図 1.5 Fedorchenko らによる界面への液滴滴下による空隙発生を利用したマイクロジェット生成. 図は[Fedorchenko 2004]より引用し、本論文にあわせて体裁を改変した.



図 1.6 Tagawa らのレーザー誘起衝撃波を用いたマイクロジェット生成. 図は, [Krizek 2020]よ り引用した.

1.2. 先行研究

マイクロジェット生成に関する先行研究では、メニスカス形状やレーザー誘起気泡の体積、個数 等のパラメータがジェット速度に与える影響について調査されている. Peter らは表面張力によって 微細管内液体と壁面の間に生ずる接触角がジェット速度に与えるについて、数値解析により調査し ている [Peters 2013]. 文献 [Peters 2013]では、接触角が小さいほどマイクロジェット速度が大きくな るとしている (図 1.7). この結果は、Tagawa らの実験 [Tagawa 2012]で得られた結果と同様の傾向を 示している. Kyriazis らは、成型炸薬の形状に示唆を得ていくつかのメニスカス形状を提案し、マイ クロジェット生成数値解析を実施している [Kyriazis 2019]. 数値解析の結果、トランペット形状の界 面が最も速いマイクロジェットを生成するとしている (図 1.8). このように、メニスカスがジェット 速度に与える影響に関しては、マイクロジェットを効率よく射出するための指針がある. 一方、レ ーザー誘起気泡のパラメータとジェット速度の関係については、いくつかの示唆に留まっている. Tagawa らはレーザーの集光位置とジェット速度の関係について実験により調査を行っている [Tagawa 2012]. また、レーザー光路を考慮した幾何光学的近似により気泡体積を推定し、ジェット 速度との比較を実施している. 幾何光学的近似による気泡体積の推定は、以下の手順で行われる.

- (1) レーザーはガウシアンビームを仮定し,近似のためレーザー光を複数の光線に分割する.また,管内の液体を,複数のセルに分割する.
- (2) それぞれの光線が通る経路を、管壁での反射を含め追跡する.
- (3) 光線が入射した液体セルにて、Beer-Lambertの法則を用いて液体に与えられるエネルギー E_{in} を計算する. E_{in} が液体が蒸発するエネルギーのしきい値 E_{boil} を超えたとき、対象セルの液体は全て蒸発したと判定する. また、光線のもつエネルギー E_{ray} は E_{in} だけ損失する.
- (4) 液体が蒸発セルの体積を合計し、気泡体積を求める.

文献[Tagawa 2012]では、上記の推定に基づき、気泡体積が大きいほどジェット速度が速くなるとしている (図 1.9). Tagawa らは水槽内の液体内にレーザーを集光する実験 (図 1.10 (a))を行い、集光に利用する対物レンズの倍率によって生じるレーザー誘起気泡の個数が変化することを報告している (図 1.10 (b)). また、対物レンズの倍率によってレーザー誘起気泡から伝播する圧力波の圧力インパルス [Batchelor 2000]、

$$I_p = \int_t p dt \tag{1.1}$$

が変化することを報告している (図 1.10 (c)) [Tagawa 2016]. これら 2 つの結果を考慮すると,レーザ - 誘起気泡の個数によって圧力インパルスが変化すると考えられる.レーザー誘起気泡から伝播す る圧力波の圧力インパルスはジェット速度と相関があるため [Peters 2013] [Hayasaka 2017],気泡数は マイクロジェット速度に影響を及ぼすパラメータであると考えられる.以上の背景より、気泡のパ ラメータがマイクロジェット速度に与える影響を調査することは、マイクロジェットの生成効率を 向上させるために重要である.



図 1.7 Peters らによる接触角とジェット速度に関する数値的調査. (a)は数値解析設定であり, は表面張力による接触角を示している. (b)はcos(θ)とマイクロジェット速度との比較を示してお り,実験,数値解析,モデルとの一致を確認できる.また, θが小さいほど,マイクロジェット 速度が速くなる傾向を示している. 図は, [Peters 2013]より引用した.



図 1.8 Kyriazis らによるメニスカス形状がジェット速度に与える影響の数値的調査. (a)は調査対象のメニスカス形状であり, (b)は界面を赤線で,ジェット速度を黒矢印で示した数値解析結果である.トランペット形状で最も速いマイクロジェット速度となることが確認できる.図は, [Kyriazis 2019]より引用し,改変を加えている.



図 1.9 Tagawa らによるレーザー誘起マイクロジェットの実験結果. (a)は微細管中心からレーザ ー集光点までの距離*l_vとマイクロジェット速度及び幾何光学的近似により推定される気泡体積の* 関係を示している. (a)の第 1 縦軸はマイクロジェット速度であり、緑色の点で示される. 一方、 第 2 軸は正規化された気泡体積であり、黒色の実線で示される. (a)より、推定される気泡体積が 大きいほど、マイクロジェット速度が速くなる傾向が確認できる. (b)はレーザー集光点までの距 離*l_vとマイクロジェット*速度の関係を示している. *l_vによって、マイクロジェット*速度に大きな 差が現れる. 図は、[Tagawa 2012]より引用し、一部を改変した.



(c)

図 1.10 Tagawa らによる圧力インパルス計測実験.(a)は実験セットアップ,(b)は対物レンズを変 更した際の観測される気泡数変化,(c)は対物レンズ及びレーザーエネルギーに対する実験で観測 された圧力インパルスを示している.(b)の対物レンスにより気泡数が変化する結果と,(c)の対物 レンスにより圧力インパルスが変化する結果を考慮すると,気泡数によって圧力インパルスが変 化することが示唆される.図は,[Tagawa 2016]より引用し,改変を加えた.

レーザー誘起気泡によって発生する圧力波や圧力場に関しても多くの研究がなされている. Vogel らは、水中へのレーザー集光時に生ずる発熱、プラズマ放射、衝撃波及びキャビテーション生成へ のエネルギー分配について調査している [Vogel 1999]. Sankin らはレーザー誘起気泡と結石破砕機衝 撃波の干渉について実験による調査を実施し、気泡崩壊時間と結石破砕機衝撃波の圧縮パルス間隔 が一致するとき、最も強い圧力が観測されるとしている [Sankin 2006]. Klaseboor らは、数値解析に よりレーザー誘起気泡と結石破砕機衝撃波の干渉による気泡運動について調査している [Klaseboer 2007]. Quinto-Su らは, 2 つのレーザー誘起気泡の間に発生するキャビテーション気泡雲を調査した [Quinto-Su 2013]. 文献 [Quinto-Su 2013]では、実験と数値解析により、キャビテーション気泡雲中の 気泡と圧力波の時間発展について調査した結果を報告している. Hsiao らは, 2 平板間に配置した複 数気泡の運動と気泡周りの圧力場を境界要素法により数値解析した [Hsiao 2013]. Supponen らは非球 形気泡から生じる圧力波に関して実験的調査を行い、周囲に伝播する圧力波のピーク圧力値に関す る経験式を導出している [Supponen 2017]. Beig は壁近傍に生じた 2 気泡の崩壊を数値解析し, 2 気 泡間の相互作用により非球形な崩壊や、気泡内に歪んだジェットが生ずることを指摘している [Beig 2018]. このように、これまでのレーザー誘起気泡に関する先行研究は、気泡配置や形状等、様々な 気泡パラメータに関する調査を行っているものの、その対象は気泡自身の崩壊現象や周囲の圧力場 形成に限定されている.

1.3. 本論文の目的

本論文は、マイクロジェット速度を支配する気泡パラメータを特定し、そのパラメータがマイク ロジェット速度に与える影響を調査すると同時に、マイクロジェット速度を最大化する最適気泡パ ラメータを調査することを目的とする.

本研究では、気泡体積、気泡数、位置といったレーザー誘起気泡のパラメータを制御する必要が ある.実験においては、集光位置の調整や、対物レンズの変更によるスポット径の調整、緑色レー ザーを吸光しやすい金ナノ粒子の導入等の工夫によりある程度気泡位置や大きさを制御できると考 えられる.しかし、緻密な気泡パラメータの制御は難しいと考えられる.そこで、本研究では数値 解析による検討を行う.

また,いくつかの示唆はあるものの [Tagawa 2012] [Tagawa 2016],実際にどの気泡パラメータが マイクロジェット生成に影響を与えるかは未知である.このような状況下で,仮説検証やパラメト リックスタディを通して影響を与える気泡パラメータを特定し,マイクロジェット速度を最大化す る最適気泡パラメータを求めるのは,困難を伴うと考えられる.そこで,本研究では,気泡の形状, 個数,位置,体積等を自由に変更できるような最適化問題を設定し,設定した問題を最適化アルゴ リズムによって求めることで最適気泡パラメータの探査を行う.また,最適化の過程で得られた解 の集合をデータ解析手法で分析することにより,マイクロジェット速度に影響を与えるパラメータ の抽出を行う.

1.4. 本論文の構成

本論文の構成は以下の通りである.

2章では、圧縮性混相流を記述する支配方程式についていくつか触れた後、本研究で用いる five-equation model [Kapila 2001]について述べる.また、有限体積法を用いた支配方程式の数値解法について説明する.

3章では、最適化問題を解くための最適化アルゴリズムについて述べる.また、本研究で用いる 最適化アルゴリズムである CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy) [Hansen 1996]に ついて説明する.

4章では、最適化過程で得た解の集合を解析するデータ解析手法について述べる.データ解析を 行ういくつかの方法について述べた後、本研究で用いる次元削減法について説明する.

5章では、気泡数がマイクロジェット生成に与える影響について調査した結果を述べる.本研究 では、気泡郡が有する総内部エネルギーや総体積を一定とし、気泡数が与える影響にのみ注視す る.得られた数値解析結果から、圧力波の伝播経路を明らかにし、圧力波伝播の観点から気泡数が マイクロジェット生成に与える影響を考察する.

6章では、マイクロジェット生成に関わるメニスカス方向に伝わる圧力の力積Iを目的関数とした 最適化を実施する.また、データ解析によりマイクロジェット生成に影響を与えるパラメータの抽 出を行う.

7章では、力積Iと気泡の総内部エネルギーEの比I/Eで定義されるエネルギー効率の最適化を行う.また、データ解析によりエネルギー効率に影響を与えるパラメータの抽出を行う.

8章は、本論文の結言である.

12

2章

支配方程式と数値解析法

2.1. 支配方程式

本研究では、レーザの集光により得られる超高圧気泡から伝播する圧力波や、圧力波と気泡の干 渉現象,及び圧力波とメニスカス干渉によるジェット生成を扱う.これらの現象をシミュレーショ ンするために、圧縮性混相流を記述する支配方程式が必要となる。圧縮性混相流を記述する支配方 程式は、大きくシャープ界面法 (Sharp Interface Method: SIM)と拡散界面法 (Diffuse Interface Method: DIM)に分けられる. レベルセット法 [Osher 2001], ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian)法 [Luo 2004], フロントトラッキング法 [Terashima 2010]に代表される SIM では、界面を幾何的に扱い、界面に境界 条件を設定して、それぞれの相を単相の支配方程式により解くことで流れ場をシミュレーションす る.界面変形の少ない系において,SIM は界面とその幾何的情報を急峻かつ適切に扱える.一方, 大きな界面変形を伴う系においては、リメッシュや、幾何再構築、熱力学的処理等の特別な処理を 施す必要がある.本研究ではジェット生成のような大規模界面変形を扱うため、これらの欠点は望 ましくない.一方, DIM は方程式系に各相の体積分率や,界面までの距離 (Level set 関数)の保存則 を組み込むことで界面追従を行う. DIM は大規模界面変形を安定に扱うことが可能である. 圧縮性 混相流を記述する DIM としては,完全非平衡 Baer-Nunziato model [Baer 1986]に対し,各種平衡条件 を加え方程式数を削減した, six-equation model [Saurel 2009], five-equation model [Kapila 2001]等の reduced model が有名である.特に, five-equation model は微細管現象のシミュレーションで必要とな る粘性,表面張力項の導入[Perigud 2005] [Garrick 2017a]や界面追従を適切に行うための界面再構築法 の開発 [Shukla 2010] [Garrick 2017b]等, 改良研究が盛んに行われている. また, 衝撃波気泡干渉や, 気泡崩壊,水中水蒸気爆発等を対象とした応用研究も盛んである[Daramizadeh 2015] [Rasthofer 2017] [Beig 2018] [Yu 2021]. 以上の背景の元,本研究では支配方程式として five-equation model を用いる.

支配方程式は Kapila らにより提案された five-equation model に、粘性項及び CFS モデル[Brackbill 1992]による表面張力項を導入した、

13

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \boldsymbol{u}) = 0, \qquad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u} + p \boldsymbol{I}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \sigma \kappa \nabla \alpha_l, \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot \left((\rho e + p) \boldsymbol{u} \right) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{u}) + \sigma \kappa (\nabla \cdot (\alpha_l \boldsymbol{u}) - \alpha_l \nabla \cdot \boldsymbol{u}),$$
(2.3)

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u}\alpha_l) = (\alpha_l + K)\nabla \cdot \boldsymbol{u}$$
(2.4)

を用いる.ここで、 α_i は体積分率、 ρ_i は密度、 $u = (u, v, w)^T$ は速度、eは全エネルギー、pは圧力、 τ は粘性応力テンソル、 κ は界面の曲率、 σ は表面張力係数、 $i \in \{l, g\}$ は液相(l)及び気相(g)を表す添字である.Johnsenらは計算安定化のため移流項の速度とソース項及び拡散項の速度を整合させる必要があることを指摘している [Johnsen 2006].そこで、本研究では式(2.3)の表面張力項を交換則、

$$\nabla(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}) = \boldsymbol{\phi}\nabla\boldsymbol{u} + (\nabla\boldsymbol{\phi})\cdot\boldsymbol{u} \tag{2.5}$$

を用いて,

$$(\sigma \kappa \nabla \alpha_l) \cdot \boldsymbol{u} = \sigma \kappa (\nabla \cdot (\alpha_l \boldsymbol{u}) - \alpha_l \nabla \cdot \boldsymbol{u})$$
(2.6)

と一般的な表記から書き改めている[Garrick 2017a]. また,式(2.4)に関しても Coralic の研究 [Coralic 2014]に従い,

$$\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\alpha}_l = \nabla (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\alpha}_l) - \boldsymbol{\alpha}_l \nabla \cdot \boldsymbol{u}$$
(2.7)

と準保存的表記に改めている. five-equation model では式(2.1)のように、 N_p 相の流体に対し N_p 本の質量保存則を個別に解く. また、式(2.4)に示す体積分率の移流方程式に関しても、

$$\sum_{i \in \{l,g\}} \alpha_i = 1 \tag{2.8}$$

の条件に基づき $N_P - 1$ 本の方程式を解く.一方,式(2.2)の運動保存則及び式(2.3)のエネルギー保存 則に関しては,混合則,

$$\rho = \sum_{i \in \{l,g\}} \rho_i \alpha_i \tag{2.9}$$

$$\rho e = \sum_{i \in \{l,g\}} \rho_i e_i \alpha_i \tag{2.10}$$

に基づきそれぞれ1本の方程式を解く. five-equation model は圧縮性混相流を記述する非平衡モデル である Baer-Nunziato model に対し,速度平衡及び機械的平衡を仮定し得られるモデルであり,

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{g}} \tag{2.11}$$

$$p = p_l = p_g \tag{2.12}$$

である. また, Kは,

$$K = \alpha_g \alpha_l \left(\frac{\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2}{\alpha_l \rho_g c_g^2 + \alpha_g \rho_l c_l^2} \right)$$
(2.13)

であり、 c_i は各相の音速である. $K\nabla \cdot u$ は混合領域での界面圧縮を表す項であり、気泡の膨張収縮運動を正確に記述するための重要な項である[Kapila 2001] [Tiwari 2013] [Schmidmayer 2020]. 一方で、 強い膨張及び収縮が発生する領域で不安定になることが知られている. これは、方程式を純粋な双 曲線形式に変換できず、Riemann 解が一意に定まらないことに起因する[Maso 1995] [Saurel 2007] [Schmidmayer 2020]. したがって、強い膨張波が生成される一部の問題、例えば水面下爆発問題など では、 $K\nabla \cdot u$ を無視する場合がある [Daramizadeh 2015] [Yu 2021]. なお、 $K\nabla \cdot u$ 項を無視した方程式 系は Allaire の five-equation model [Allaire 2002]と同じである. 粘性応力テンソル τ は、

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$$
(2.14)

であり, Stokesの仮定,

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \tag{2.15}$$

を用いて,

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z})$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z})$$

$$\tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z})$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right)$$

(2.16)

と、粘性係数 $\mu = \alpha_g \mu_g + \alpha_l \mu_l c$ 用いて書き表せる[Perigaud 2005]. 表面張力項に現れる界面曲率は、 CFS モデルのカラー関数を液相の体積分率 α_l として、

$$\kappa = -\nabla \cdot \boldsymbol{n}_{\text{interface}} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_l}{|\nabla \alpha_l|}\right)$$
(2.17)

で与えられる. 界面法線ベクトル**n**_{interface}は重い流体(本研究では液体)の方向を向く必要がある. 本研究では,方程式系を閉じるために Stiffened gas 状態方程式 (Stiffened Gas Equation of State; SG EoS),

$$p_i = (\gamma_i - 1)\rho_i \epsilon_i - \gamma_i p_{ref,i}$$
(2.18)

$$c_i = \sqrt{\frac{\gamma_i(p_i + p_{ref,i})}{\rho_i}} \tag{2.19}$$

を用いる.ここで、 ϵ_i は比内部エネルギーである.内部エネルギー密度 $\rho_i\epsilon_i$ に関しても混合則、

$$\rho\epsilon = \sum_{i \in \{l,g\}} \rho_i \epsilon_i \alpha_i \tag{2.20}$$

が成立する.式(2.18)は式(2.12)に示す平衡仮定及び式(2.20)の混合則を用いて,

$$\rho \epsilon = \Gamma(p + \Pi) \tag{2.21}$$

$$\Gamma = \frac{1}{\gamma - 1} = \sum_{i \in \{l,g\}} \frac{\alpha_i}{\gamma_i - 1}$$
(2.22)

$$\Pi = \gamma p_{ref} = \frac{1}{\Gamma} \sum_{i \in \{l,g\}} \frac{\alpha_i \gamma_i p_{ref,i}}{\gamma_i - 1}$$
(2.23)

と書き表せる. Kapila の five-equation model において, 音速は Wood の音速,

$$c_w = \left(\rho \sum_{i \in \{l,g\}} \frac{\alpha_i}{\rho_i c_i^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.24)

が用いられる[Kapila 2001]. 一方, $K\nabla \cdot u$ を無視, すなわち Allaire の five-equation model を用いた場合は, 混合音速,

$$c_m = \sqrt{\frac{p - \Pi}{\rho}} \tag{2.25}$$

が用いられる[Allaire 2002]. 各変数は以下に示す無次元化が施されている.

$$\boldsymbol{x} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{x}}}{L} \tag{2.26}$$

$$\rho = \frac{\tilde{\rho}}{\rho_{ref}} \tag{2.27}$$

$$\boldsymbol{u} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{u}}}{c_{ref}} \tag{2.28}$$

$$p = \frac{\ddot{p}}{\rho_{ref} c_{ref}^2} \tag{2.29}$$

$$\rho e = \frac{\tilde{\rho}\tilde{e}}{\rho_{ref}c_{ref}^2} \tag{2.30}$$

$$\mu = \frac{\tilde{\mu}}{\rho_{ref} c_{ref} L} \tag{2.31}$$

$$\sigma = \frac{\tilde{\sigma}}{\rho_{ref} c_{ref}^2 L}$$
(2.32)

ここで、**x**は位置、チルダ(~)は有次元量、添字refは代表値を示す。本研究では細管内現象とマイクロジェット生成に着目するため、一貫して、 $L = 35[\mu m]$ 、 $\rho_{ref} = 1.204 [kg/m^3]$ 、 $c_{ref} = 341.0 [m/s]$ を用いる.

2.2. 数值解析法

2.2.1. 有限体積法



図 2.1 有限体積法の概略図.任意の物体(黒斜線)周りの閉空間を多面体セルにより分割した様 子を示している.

有限体積法とは、図2.1に示すように任意の空間を複数の微小なセルに分割し、各セルに対して積 分型の保存方程式を適用することで、任意の保存方程式を離散化する数値解析手法である.説明の ため、保存量φの保存方程式、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{f} = 0 \tag{2.33}$$

を考える.ここで、fは保存量φに対する流束である.式(2.26)の体積分をとれば、積分形の方程式、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \phi dV + \int_{V} \nabla \cdot \boldsymbol{f} dV = 0$$
(2.34)

を得る.式(2,27)の左辺第2項は,Gaussの発散定理,

$$\int_{V} \nabla \cdot \boldsymbol{f} dV = \int_{S} (\boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{n}) dS$$
(2.35)

によって面積分へ変換され,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \phi dV + \int_{S} (\boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{n}) dS = 0$$
(2.36)

を得る.ここで,**n**は微小面dSの単位法線ベクトルであり,体積Vの空間に対し外向きに定義される.式(2.36)を微小セルiに適用し,面積分を総和記号で置き換えれば,半離散式,

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi_i V_i + \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} (f_j \cdot n_j) S_j = 0$$
(2.37)

を得る.式(2.37)に示される通り、有限体積法による離散化では面での流束 f_j を如何にして得るかが 重要な要素となる.

2.2.2. 勾配計算法

運動量保存則の粘性項や表面張力項の評価には速度勾配テンソル $\nabla \times u$ や体積分率勾配 $\nabla \alpha_l$ が必要 となる.そこで、本節では各項の評価法に先んじて勾配計算法を説明する.有限体積法における勾 配計算法としては、最小二乗法や Green-Gauss 法 [Mavriplis 2003]、ハイブリッド法[Shima 2013]が知 られているが、本研究では five-equation model で粘性計算を行う文献[Perigaud 2005] [Coralic 2014]で 標準的に用いられる Green-Gauss 法を用いる.Green-Gauss 法では Green-Gauss の定理、

$$\int_{dV} \nabla \phi dV = \int_{dS} \phi \mathbf{n} dS \tag{2.38}$$

からφの勾配∇φを次式で計算する.

$$\nabla \phi = \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} \phi_j \, \boldsymbol{n}_j S_j \tag{2.39}$$

勾配計算ではセル境界での値 ϕ_i が必要となる.本研究では ϕ_i の計算に中点則,

$$\phi_j = \frac{1}{2}(\phi_L + \phi_R) \tag{2.40}$$

を用いる.ここで、 ϕ_L および ϕ_R は面*j*を挟む両側セルの値を示す.

2.2.3. 非粘性項評価法

式(2.1)~(2.4)に示す支配方程式の非粘性項を有限体積法により離散化すると、

$$\begin{pmatrix} \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \boldsymbol{u}) \\ \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u} + p\boldsymbol{I}) \\ \nabla \cdot ((\rho \boldsymbol{e} + p)\boldsymbol{u}) \\ \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \cdot \alpha_l) \end{pmatrix} = \nabla \cdot \boldsymbol{F} = \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} (\boldsymbol{F}_j \cdot \boldsymbol{n}_j) S_j$$
(2.41)

となる.非粘性流束 F_i は以下のように求めることができる.

$$F_{j} = T^{-1}F_{n}$$

$$(2.42)$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_{x} & n_{y} & n_{z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{1x} & t_{1y} & t_{1z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{2x} & t_{2y} & t_{2z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$F_{n} = \begin{pmatrix} \alpha_{l}\rho_{l}u_{n} \\ \alpha_{g}\rho_{g}u_{n} \\ \rho u_{n}^{2} + p \\ \rho u_{n}u_{t1} \\ \rho u_{n}u_{t2} \\ (\rho e + p) \\ u_{n}\alpha_{l} \end{pmatrix}$$

$$(2.42)$$

ここで、 $t_1 = (t_{1x}, t_{1y}, t_{1z})$ 及び $t_2 = (t_{2x}, t_{2y}, t_{2z})$ は面の単位接線ベクトル、Tは n, t_1, t_2 を基底とする面座標系への回転行列、 F_n は面に垂直な方向への非粘性流束である.面座標系及び流束 F_n の概略図をそれぞれ図 2.2、図 2.3 に示す.



図 2.2 面座標系の概略図.



図 2.3 流束 F_n の概略図. 図の F_n はセルRから見た場合の面に垂直な非粘性流束を示している.

本研究では F_n を近似 Riemann ソルバーにより,

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{n}} = \operatorname{Reimann}(\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{L}},\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{R}}) \tag{2.45}$$

と求める.ここで、 $q_{n,L}$ および $q_{n,R}$ は面を挟む両側セルの面座標系基本量である.一般には空間高次 精度化のため、 $q_{n,L}$ および $q_{n,R}$ はセル内の基本量qを再構築することで得られるセル境界面の値 $\widehat{q_L}$ 、 $\widehat{q_R}$ を使用し計算する.なお、再構築法については 2.2.4.項にて述べる.基本量qは保存量、

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \alpha_l \rho_l \\ \alpha_g \rho_g \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \\ \alpha_l \end{pmatrix}$$
(2.46)

を構成する物理量の組み合わせとして、本研究では、

$$\boldsymbol{q} = \begin{pmatrix} \rho_l \\ \rho_g \\ u \\ v \\ w \\ p \\ \alpha_l \end{pmatrix}$$
(2.47)

を選択する.一般座標系から面座標系への変換は,

$$\boldsymbol{q_n} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{q} \tag{2.48}$$

と計算できる.



図 2.4 x - tダイアグラムによる HLL 及び HLLC の模式図. HLL では時刻 Δt における Riemann フ アン $x \in [s_L\Delta t, s_R\Delta t]$ を一定値 Q_* で近似している. 一方, HLLC は接触不連続面の速度 s_* を導入し, $x \in [s_L\Delta t, s_*\Delta t]$ を Q_{*L} , $x \in [s_*\Delta t, s_R\Delta t]$ を Q_{*R} にて近似する.

本研究では Riemann ソルバーとして HLLC (Harten–Lax–van Leer Contact approximate Riemann solver) [Toro 1994] [Tian 2011]を用いる. HLLCは HLL (Harten–Lax–van Leer approximate Riemann solver) [Haten 1983]の派生手法である. HLL では 2 つの特性速度 $u_n - c$ 及び $u_n + c$ を考慮し非粘性流束を決定する. 一方, HLLCでは図 2.4 に示すように HLL で考慮する 2 つの特性速度に加え,接触不連続面の速度 s_* も考慮する. 接触不連続面の考慮により界面や衝撃波面の解像に優れるため,HLLC は five-equation model の非粘性流束評価法として標準的に用いられる [Tian 2011] [Tiwari 2013] [Coralic 2014] [Garrick 2017a] [Schmidmayer 2020]. HLLC は以下のように流速を計算する.

$$F_{n} = \frac{1 + \operatorname{sign}(s_{*})}{2} (f_{L} + s_{-}(\boldsymbol{Q}_{*L} - \boldsymbol{Q}_{L})) + \frac{1 - \operatorname{sign}(s_{*})}{2} (f_{R} + s_{+}(\boldsymbol{Q}_{*R} - \boldsymbol{Q}_{R}))$$
(2.49)

ここで、 $K \in \{L, R\}$ はセル境界の左側及び右側を指す.また、 f_K はセル境界左右の数値流速、 Q_{*K} は接触不連続面前後の状態であり、具体的に書き下せば、

$$\boldsymbol{f}_{\boldsymbol{K}} = \begin{pmatrix} (\alpha_{l}\rho_{l}u_{n})_{K} \\ (\alpha_{g}\rho_{g}u_{n})_{K} \\ (\rho u_{n}^{2} + p)_{K} \\ (\rho u_{n}u_{t1})_{K} \\ (\rho u_{n}u_{t2})_{K} \\ (\rho e + p)_{K} \\ (u_{n}\alpha_{l})_{K} \end{pmatrix}$$
(2.50)

$$\boldsymbol{Q}_{*K} = \frac{s_{k} - u_{n,K}}{s_{K} - s_{*}} \begin{pmatrix} (\alpha_{l}\rho_{l})_{K} \\ (\alpha_{g}\rho_{g})_{K} \\ \rho_{K}s_{*} \\ (\rho u_{t1})_{K} \\ (\rho u_{t2})_{K} \\ (\rho e)_{K} + (s_{*} - u_{n,K})(\rho_{K}s_{*} + \frac{p_{K}}{s_{K} - u_{K}}) \\ \alpha_{l,K} \end{pmatrix}$$
(2.51)

である. 波速度s_, s+及びs*は,

$$s_{-} = \min(0, s_{L})$$
 (2.52)

$$s_{+} = \max(0, s_{R})$$
 (2.53)

$$s_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_{n,L} (s_L - u_{n,L}) - \rho_R u_{n,R} (s_R - u_{n,R})}{\rho_L (s_L - u_L) - \rho_R (s_R - u_R)}$$
(2.54)

と計算できる. s_L および s_R は Einfeldt らに従い,

$$s_L = \min(u_{ave} - c_{ave}, u_{n,L} - c_{n,L})$$
 (2.55)

$$s_R = \max(u_{ave} + c_{ave}, u_{n,R} + c_{n,R})$$
(2.56)

とする [Einfeldt 1991]. *u_{ave}*, *c_{ave}*は Roe 平均により算出する場合もあるが(例えば, [Johnsen 2006]), 本研究では算術平均,

$$u_{ave} = \frac{1}{2}(u_{n,L} + u_{n,R}) \tag{2.57}$$

$$c_{ave} = \frac{1}{2}(c_{n,L} + c_{n,R}) \tag{2.58}$$

を用いて計算する.

式(2.49)~(2.58)にて説明した標準的な HLLC では, Riemann ファン内の圧力を一定, すなわち,

$$p_{*R} = p_{*L} \tag{2.59}$$

と仮定する.一方,Garrickらは表面張力の存在下では接触不連続面で圧力が跳躍,すなわち,

$$p_{*R} - p_{*L} = \sigma \kappa (\alpha_{l,R} - \alpha_{l,L}) \tag{2.60}$$

となることを指摘し、 Q_{*K} 及び s_* を,

$$\boldsymbol{Q}_{*K} = \frac{S_{k} - u_{n,K}}{S_{K} - S_{*}} \begin{pmatrix} (\alpha_{l}\rho_{l})_{K} \\ (\alpha_{g}\rho_{g})_{K} \\ \rho_{K}S_{*} \\ (\rho u_{t1})_{K} \\ (\rho u_{t2})_{K} \\ (\rho e)_{K} + (s_{*} - u_{n,K})(\rho_{K}S_{*} + \frac{p_{K} - \sigma\kappa\alpha_{l,K}}{S_{K} - u_{K}}) \\ \alpha_{l,K} \end{pmatrix}$$

$$s_{*} = \frac{p_{R} - p_{L} + \rho_{L}u_{n,L}(s_{L} - u_{n,L}) - \rho_{R}u_{n,R}(s_{R} - u_{n,R}) - \sigma\kappa(\alpha_{l,R} - \alpha_{l,L})}{\rho_{L}(s_{L} - u_{L}) - \rho_{R}(s_{R} - u_{R})}$$

$$(2.61)$$

で計算することを提案した [Garrick 2017a]. 本研究でも表面張力を考慮して計算を行うことがあるため, Garrick らに倣い式(2.61), (2.62)を採用する.

セル界面での面に垂直な流速 ûnは、HLLCによる風上近似により、

$$\widehat{u_n} = \frac{1 + \operatorname{sign}(s_*)}{2} \left(u_L + s_- \left(\frac{s_L - u_{n,L}}{s_L - s_*} - 1 \right) \right) + \frac{1 - \operatorname{sign}(s_*)}{2} \left(u_R + s_+ \left(\frac{s_R - u_{n,R}}{s_R - s_*} - 1 \right) \right)$$
(2.63)

で得られる [Coralic 2014]. 本研究では Johnsen らの指摘[Johnsen 2006]に従い移流項の速度とソース 項の速度を整合させるため,式(4)の体積分率保存則に現れる右辺ソース項を,

$$(\alpha_l + K)\nabla \cdot \boldsymbol{u} = (\alpha_l + K) \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} (\boldsymbol{u}_j \cdot \boldsymbol{n}_j) S_j = (\alpha_l + K) \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} \widehat{u_{n,j}} S_j$$
(2.64)

と離散化する [Coralic 2014].

2.2.4. 再構築法

本研究では,解く問題や目的に合わせ,以下の2つの再構築法を使い分ける.

MUSCL (Monotone Upstream-centered Scheme for Conservation Laws) [van Leer 1979]とρ-THINC (ρ Tangent of Hyperbola INterface Capturing method) [Garrick 2017b]のカップリング再構築法 (ρ-THINC-MUSCL)

Jiang らの 5 次精度 WENO (Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes) [Jiang 1996]に MP (Monotonicity Preserving)法 [Suresh 1997]の単調性維持関数を導入した MP-WENO5-JS [Balsara 2000]

上記 2 つの手法をそれぞれ説明する. なお,本研究では高次精度再構築のため,構造格子を利用する.構造格子においては図 2.5 に示すように,近似 Reimann ソルバーを実行する面*j*に対し,左側に セル*i*,右側にセル*i*+1がくるようにセル番号が付与されている.



図 2.5 構造格子におけるセル番号の並び順.

(1) ρ -THINC-MUSCL

初めに, MUSCL について説明する. 任意のセル平均量φについて, MUSCL では以下のように再 構築を行う.

$$\widehat{\phi_L} = \phi_i + \frac{1-\kappa}{4} \Phi(r_L)(\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{1+\kappa}{4} \Phi(r_L)(\phi_{i+1} - \phi_i)$$
(2.65)

$$\widehat{\phi_R} = \phi_{i+1} - \frac{1-\kappa}{4} \Phi(r_R)(\phi_{i+1} - \phi_i) - \frac{1+\kappa}{4} \Phi(r_R)(\phi_{i+2} - \phi_{i+1})$$
(2.66)

$$r_L = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i} \tag{2.67}$$

$$r_R = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\phi_{i+2} - \phi_i} \tag{2.68}$$
ここで, $\kappa \in [-1,1]$ はスキームの特性を制御するためのパラメータ, $\Phi(x)$ は空間分布の単調性を維持するための勾配制限関数である. パラメータ κ の意味を表 2.1 にまとめる.

表 2.1 MUSCL のパラメータκ

к	意味
-1	等間隔格子での風上差分勾配を用いた空間2次精度再構築
0	等間隔格子での風上差分と風下差分の平均勾配を用いた空間2次精度再構築
1/3	等間隔格子での区分的放物線近似による空間3次精度再構築
1	面を挟む左右セルの平均値による再構築

本研究では、空間 3 次精度を達成するため、 $\kappa = 1/3$ を選択する.また、勾配制限関数 $\Phi(x)$ は minmod リミター、

$$minmod(x) = max(0, min(1, x))$$
 (2.69)

を用いる [Roe 1986].

続いて、 ρ -THINC について説明する. ρ -THINC は代数的な界面再構成法である THINC [Shyue 2014] [Nonomura 2014]の派生手法である. ρ -THINC では、体積分率だけではなく、界面で不連続となる密度も再構築を行う.

本研究は MUSCL で基本量のu, pを再構築した後, ρ -THINC にて ρ_l , ρ_g , α_l の再構築を行う.

(2) MP-WENO5-JS

面に対し左側セルの再構築について説明する.なお、WENO は対称性を有するため右側セルの再 構築に関してもすぐさま得ることができる.5次精度 WENO 法では、ステンシルS \in [*i* - 2,*i* + 2]を 3 つのサブステンシルS₁ \in [*i* - 2,*i*],S₂ \in [*i* - 1,*i* + 1],S₃ \in [*i*,*i* + 2]に分割し、各サブステンシルで 線形 Lagrange 補間を行う.この補間により、セル左側境界での値は、

$$\widehat{\phi_{L,S_1}} = \frac{2\phi_{i-2} - 7\phi_{i-1} + 11\phi_i}{6}$$
(2.70)

$$\widehat{\phi_{L,S_2}} = \frac{-\phi_{i-1} + 5\phi_i + 2\phi_{i+1}}{6}$$
(2.71)

$$\widehat{\phi_{L,S_3}} = \frac{2\phi_i - 5\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{6}$$
(2.72)

と求まる.これらを重みwiで平均することにより最終的な再構築値,

$$\widehat{\phi_L} = \sum_{i=1}^3 w_i \widehat{\phi_{L,S_i}}$$
(2.73)

を得る.重みw_iは、補間が滑らかなサブステンシルほど大きくなり、重みの総和が必ず1となるよう設計される.本研究では Jiang らが提案する重みを採用する [Jiang 1996].更に、格子のストレッチングに対応できるよう、格子位置を考慮した定式を採用する [Coralic 2014].本研究では不連続面や圧力波近傍での数値振動を避けるため、MP法で開発された単調性維持のための制限関数を導入している [Suresh 1997] [Balsara 2000].

2.2.5. 粘性項評価法

式(2.1)~(2.4)に示す支配方程式の粘性項を有限体積法により離散化すると,

$$\begin{pmatrix} 0\\ \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}\\ \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{u})\\ 0 \end{pmatrix} = \nabla \cdot \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{v}} = \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} (\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{v}, \boldsymbol{j}} \cdot \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{j}}) S_{\boldsymbol{j}}$$
(2.74)

となる. $F_{\nu,j}$ は,

$$F_{vj} = T \cdot F_{vn}$$
(2.75)
$$F_{vn} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \\ \beta_x & \beta_y & \beta_z \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_j$$
(2.76)

と、面*j*上での面に垂直な粘性フラックス F_{vn} により計算する.粘性フラックスの計算には面上での 勾配が必要になる. five-equation モデルにおける研究で一般に利用される中点則,

$$(\nabla \phi)_j = \frac{1}{2} (\nabla \phi_L + \nabla \phi_R) \tag{2.77}$$

を用いる[Perigaud 2005] [Coralic 2014].

2.2.6. 表面張力評価法

式(2.2)に示す運動量保存則の表面張力項 $\sigma\kappa\nabla\alpha_l$,は、Green-Gauss 法により求めた体積分率勾配 $\nabla\alpha_l$ により求められる.一方,式(2.3)に示すエネルギー保存則の表面張力項は,

$$\sigma\kappa(\nabla \cdot (\alpha_l \boldsymbol{u}) - \alpha_l \nabla \cdot \boldsymbol{u}) = \sigma\kappa \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} (\alpha_l \widehat{u_n})_j \cdot S_j + \sigma\kappa\alpha_l \sum_{j \in \{\text{Faces of cell } i\}} \widehat{u_{n,j}} \cdot S_j$$
(2.78)

と離散化する.界面曲率 κ は、 $\nabla \alpha_l$ を Green-Gauss 法で得た後、界面法線ベクトル $n_{interface}$ を計算、さ らに**∇**·**n**_{interface}を Gauss の発散定理にて計算し得られる.

2.2.7. 境界条件

境界条件はゴーストセル(Ghost)に対し、インナーセル(Inner)の値を基にした量を代入することで 実現する.滑り壁面及び対称境界条件は,

~

Slip wall condition /
Symmetric condition:
$$\begin{pmatrix}
\rho_{l} \\
\rho_{g} \\
u_{n} \\
u_{t1} \\
u_{t2} \\
p \\
\alpha_{l}
\end{pmatrix}_{Ghost} = \begin{pmatrix}
\rho_{l} \\
\rho_{g} \\
-u_{n} \\
u_{t1} \\
u_{t2} \\
p \\
\alpha_{l}
\end{pmatrix}_{Inner}$$
(2.79)

である.滑りなし壁面条件は,

Non-slip wall condition:

$$\begin{pmatrix}
\rho_{l} \\
\rho_{g} \\
u_{n} \\
u_{t1} \\
u_{t2} \\
p \\
\alpha_{l}
\end{pmatrix}_{\text{Ghost}} = \begin{pmatrix}
\rho_{l} \\
\rho_{g} \\
-u_{n} \\
-u_{t1} \\
-u_{t2} \\
p \\
\alpha_{l}
\end{pmatrix}_{\text{Inner}} (2.80)$$

であり, 流出境界には,

$$\begin{pmatrix} \rho_l \\ \rho_g \\ u_n \\ u_{t1} \\ u_{t2} \\ p \\ \alpha_l \end{pmatrix}_{\text{Ghost}} = \begin{pmatrix} \rho_l \\ \rho_g \\ u_n \\ u_{t1} \\ u_{t2} \\ p \\ \alpha_l \end{pmatrix}_{\text{Inner}}$$
(2.81)

Outflow condition:

を設定する.

表面張力項に現れる界面曲率 κ の算出に際し、 $n_{interface}$ に関しても境界条件を適用する必要がある. 壁面では、表面張力の接触角 θ_s を考慮して、

$$t_{\text{interface}} = n - \frac{n \cdot (n_{\text{interface}})_{\text{Inner}}}{\|n\|}, \qquad (2.82)$$

$$(\boldsymbol{n}_{\text{interface}})_{\text{Ghost}} = \boldsymbol{n}_{\text{COS}}(\theta_s) + \boldsymbol{t}_{\text{interface}}\sin(\theta_s), \qquad (2.83)$$

で与える.一方,対称境界では,n, t_1 , t_2 を基底とする面座標系で,

$$\begin{pmatrix} n_{\text{interface},n} \\ n_{\text{interface},t_1} \\ n_{\text{interface},t_2} \end{pmatrix}_{\text{Ghost}} = \begin{pmatrix} -n_{\text{interface},n} \\ n_{\text{interface},t_1} \\ n_{\text{interface},t_2} \end{pmatrix}_{\text{Inner}}$$
(2.84)

を与える.本研究では体積分率が流出境界を通して系の外に出ることがないため,流出境界では *n*_{interface}に対する境界条件処理を施さない.

2.2.8. 時間積分法

時間積分法には以下に示す2段2次精度のTVD Runge-Kutta法(TVDRK2)を用いる.説明のため,式(2.37)にて示した半離散式を,

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi_i V_i + \sum_{j\in\{\text{Faces of cell }i\}} (f_j \cdot n_j) S_j = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi_i = -\frac{1}{V_i} \sum_{j\in\{\text{Faces of cell }i\}} (f_j \cdot n_j) S_j = R_i(\phi_i)$$
(2.85)

と変形した式に対し TVDRK2 を適用する.また,簡単のためセル番号を表す下添え字iを省略する.ある時間tにおける保存量 ϕ は,

$$\phi_{1st,t} = \phi_t + \Delta t R(\phi_t) \tag{2.86}$$

$$\phi_{t+\Delta t} = \frac{1}{2}\phi_t + \frac{1}{2}\left(\phi_{1st,t} + \Delta t R(\phi_{1st,t})\right)$$
(2.87)

で更新される.ここで、 Δt は微小時間である. Δt については、粘性を加味したスペクトル半径 r_j より、

$$\Delta t = C_N \min_{i \in \{\text{Cells}\}} \frac{V_i}{\max_{j \in \{\text{Surfaces of }i\}} r_j S_j}$$
(2.88)

$$r_{j} = c_{j} + \|\boldsymbol{u}_{j}\| + \frac{\mu}{\rho_{j}l_{j}}, l_{j} = \frac{V_{i}}{S_{j}}$$
(2.89)

で求める.ここで、 C_N はクーラン数である.

2.3. まとめ

本章では、本研究で採用する支配方程式と数値解析法について述べた.本研究では、支配方程式 として five-equation model を採用し、有限体積法により離散化する.勾配は Green-Gauss 法により求 め、非粘性流束評価には HLLC、時間積分には TVDRK2 を用いる.再構築法は目的に応じて*ρ*-THINC-MUSCL3 と MP-WENO5-JS を使い分ける.なお、本章で説明した数値解析法のバリデーショ ン結果は付録 A にて述べる.

3章

最適化手法

3.1. 関数最適化問題とその解法

一般に、単目的最適化問題は以下のように定式化される.

minimize
$$f(\mathbf{x})$$

subject to $\mathbf{x} \in \mathbb{S} \subseteq \mathbb{R}^{D}$ (3.1)

ここで、 $\mathbf{x} = (x_1, ..., x_D)^T$ は設計変数である.また、 $S = \prod_{i=1}^{D} [\mathbf{x}_i^{min}, \mathbf{x}_i^{max}]$ はD次元の解空間であり、 各変数 $x_i, i \in \{1, ..., D\}$ について $x_i^{min} \le x_i \le x_i^{max}$ となる.Dは次元数と呼ばれる. $f: S \to \mathbb{R}$ は最小化す べき目的関数である.式(3.1)は最小化問題に限定しているが最大化問題を扱う場合でも、 maximize $f(\mathbf{x}) = (\text{minimize} - f(\mathbf{x}))$ と変換可能であるため一般性を失わない.一般に、最適解が解 析的に求まる最適化問題は少ないため、式(3.1)は何らかの近似アルゴリズムを用いて最適解を求め ることとなる.

本研究では、fを式として明示的に与えない.代わりに、2章で構築したソルバーを用いたシミュ レーションによりfを求める.このような最適化環境は Black-box optimization 環境 [Hansen 2009]と 呼ばれる.Black-box optimization 環境において、fの関数性質を調査するためには Landscape analysis [Jones 1995] [Lunacek 2006]が必要となる.しかし、Landscape analysis は複数回の解評価が必要とな るため、本研究のようなfの評価に時間がかかる場合、関数性質を知ることは難しい.また、fの勾 配情報を利用することはできない.これらの観点から、関数性質にかかわらず適用可能であり、f の勾配情報を利用しないアルゴリズムを用いることが望ましい.

目的関数fが単峰性関数かつ微分可能である場合は、ニュートン法といったfの勾配情報を利用する手法が有用である.しかし、fが微分不可、または困難な場合は適用が難しい.また、多峰性関数においては大域的最適解への収束が保証されない.Nelder-Mead 法 [Nelder 1965]はfのみを利用して探査を行う手法であり、次元数が比較的小さい($D \leq 5$)場合は有用である [Hansen 2010][Pošík 2012].しかし、次元数の増加とともに他のアルゴリズムに比べ性能が劣るようになる.また、多峰性関数

においては大域的最適解の探査能力に劣る. ランダムサーチ [Brooks 1958]や焼き鈍し法 (Simulated Annealing: SA) [Kirkpatrick 1983]は計算資源を限りなく無限に与えた場合は大域的最適解への収束が 保証される.また、fの勾配情報を利用しないため、どのような問題へも適用可能である.しかし、 SA において大域的最適解の収束が保証されるのは冷却スケジュールを非常に遅くした場合に限られ るため、現実的な計算時間で大域的最適解を得ようとすることは難しい、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) [Holland 1975], 進化戦略(Evolution Strategy: ES) [Bäck 2013], 差分進化 (Differential Evolution: DE) [Storn 1997], 粒子群最適化法(Particle Swarm Optimization: PSO) [Kennedy 1995]は進化アルゴリズム(Evolutionary Algorithm: EA)の枠組みに属するアルゴリズムである. EA は fの勾配情報を使用しない.また,複数の最適解候補を保持しながら探査を進める多点探査法であ るため、多峰性関数においても局所解に陥らず探査が可能であることが期待されている.一方で、 GA, ES, DE, PSO などの EA の欠点として, 探査性能は制御パラメータに大きく依存してしまう 事が挙げられる [Eiben 1999] [Eiben 2011] [Eiben 2015]. 本研究で扱うような Black-box optimization 環 境では関数性質を事前に知ることができないため、探査性能が制御パラメータに大きく依存してし まう性質は受け入れ難い. 1990 年代後半からは EA の欠点を解決すべく, 推奨パラメータが次元数 Dに応じて決まる Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES) [Hansen 1996]や, 適応的 パラメータ制御を取り入れた L-SHADE [Tanabe 2014]が開発されている.特に, CMA-ES は state-ofthe-art な手法として知られており、2010年代以降様々な最適化問題の近似解法として利用されてい る [Hasenjager 2005] [Gregory 2011] [Gorman 2013] [BouDaher 2015] [Fujii 2018] [Moghadam 2021]. 本 研究でも、CMA-ESを用いて最適化を行う.

3.2. CMA-ES: Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy



図 3.1 CMA-ES の概略図

図 3.1 に CMA-ES の概略図を示す. CMA-ES は,正規分布 $\mathcal{N}(m,\sigma^2 C)$ に従う乱数を用いた突然変 異により新たな子個体xを生成し(図 3.1 (a)),規定の数となるまで個体を淘汰する(図 3.1 (b)).淘汰 後の個体分布に従いm, σ , Cを更新することで探査を進める(図 3.1 (c)).ここで,m = $(m_1, ..., m_D)^T$ は正規分布の中心を示す平均ベクトルであり、 σ は分布の大きさ、Cは分布の形状を表 す $D \times D$ の共分散行列である.このように自己適応的に共分散行列を学習しながら探査を進めるた め、個々の最適化問題の性質に依存せず、多峰性、変数分離不可、不連続性といった関数性質に対 しても有効に機能する[Hansen 2010] [Hansen 2016].また、推奨されるハイパーパラメータが次元数 Dのみに応じて決まるため[Hansen 2014],パラメータチューニングが困難な Black-box optimization 環境でも利用しやすい.本研究でも文献[Hansen 2014]の推奨パラメータを用いる.また、CMA-ES の実装として pymoo [Blank 2020]を用いる.

34

4章

データ解析手法

4.1. データ解析

データ解析とは、与えられたデータセット $P = \{x_1, x_2, ..., x_{N_d}\}$ から有用な情報を抽出し、予測や意 思決定に役立てるための分析、データクレンジング、モデリング等の一連の作業を指す.ここで、 xは解、 N_d はデータ数である.また、データ解析手法とは、データ解析を行うための種々のアルゴ リズムを指す.本論文では最適化の過程で得られた解の集合を解析することで、どのようなパラメ ータが目的関数fの改善に役立つかを分析するためにデータ解析手法を用いる.したがって、本研 究で行うデータ解析は、データセットから有用な情報を抽出する狭義のデータ解析である.

データセットから有用な情報を抽出するデータ解析手法としては, 相関係数や MIC (Maximal Information Coefficient) [Reshef 2011]を用いた統計的指標による分析,決定木 [Press 1969] [Breiman 1984]や、単純パーセプトロン [Rosenblatt 1958], Deep Neural Network (DNN) [Lecun 1989], 遺伝的プ ログラミング (Genetic Programming, GP) [Koza 1993]による回帰分析, PCA (Principal Component Analysis) [Hotelling 1933]や t-SNE (t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding) [van der Maaten 2008]に 代表される次元削減法によるデータセットPの特徴量抽出が挙げられる.相関分析では、2変数間の 相関係数によって線形な関係性を可視化することができる.また、データ間の非線形な関係を量る 指標である MIC を用いれば、2 変数間の非線形な関係性を可視化することが可能である. これらの 統計的指標による分析は 2 変数間の関係のみを明らかにし、複数の変数間の関係を可視化すること は難しい、決定木は木構造を用いて分類や回帰を行う機械学習法である、ここでは回帰を行うため の決定木である回帰木について説明する.回帰木では、木構造の内部ノードにルール (x1 ≥ 1など), 葉ノードにfの値域 (f > 1など) が配置されたグラフが得られる.得られたグラフの葉ノードからル ートノードを辿れば、fが特定の値域となるためのルールが得られる.単純パーセプトロンや DNN による回帰分析ではfを Neural Network (NN)により近似した関数 \tilde{f} 得られる. 単純パーセプトロンの 場合、入力層から出力層への重みを可視化することで、どの変数 x_i が \tilde{f} の近似に貢献したか、即ち重 要なパラメータであるか判断できる. 多層パーセプトロンや DNN のような NN であっても, SHAP (SHapley Additive exPlanations) [Lundberg 2017] LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations)

[Ribeiro 2016]を用いて重要なパラメータを可視化できる. GP は回帰や分類等を行うための EA である. GP では各個体の遺伝子情報が木構造により表現され,木構造の各ノードには変数,定数,式 (sin (*x*), cos(*x*)など),演算子等が配置される. したがって,NN とは異なり,木構造を解釈すること で *f*を明示的に得ることが可能である. 次元削減法は高次元データをできる限りデータ間の関係を 保持したまま低次元空間へ投影する手法である. 低次元空間においてデータセット**P**を観察するこ とで,パラメータと*f*の関係を可視化することが可能である.

本研究では、特徴量抽出に注視するため、次元削減法を用いたデータセット**P**の解析を行う.次 元削減法は、線形法と非線形法に分類される.次節では線形法として代表的な PCA (Principal Component Analysis) [Hotelling 1933]と非線形法として代表的な t-SNE (t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding) [van der Maaten 2008]について説明する.

4.2. 次元削減法

4.2.1. PCA: Principal Component Analysis

PCA は、データ数 N_d のデータセットPが与えられたとき、D次元の解 $x \in P$ を、次元数 D_L の低次元 空間 S_L へ射影するアルゴリズムである。 S_L の第1軸は、データセットPの分散が最大化される方向に 負荷重ベクトル w_1 が選択される。即ち、

$$\operatorname{argmax}_{w_{1}} \operatorname{Tr}(\boldsymbol{w_{1}^{T}}\boldsymbol{D_{1}^{T}}\boldsymbol{D_{1}}\boldsymbol{w_{1}})$$
subject to $\boldsymbol{w_{1}^{T}}\boldsymbol{w_{1}} = 1$

$$(4.1)$$

を解くことで w_1 を得る. D_1 はデータ行列であり、各行が $x \in P$ の成分を持つ $N_d \times D$ 行列である.以降の第n軸に関しては、

$$D_{n} = D_{1} - \sum_{n=1}^{n-1} D w_{n} w_{n}^{T}$$
(4.2)

とn-1までの主成分をデータ行列から取り除いた後,

$$\operatorname{argmax}_{w_n} \operatorname{Tr}(w_n^T \boldsymbol{D}_n^T \boldsymbol{D}_n w_n)$$
subject to $w_n^T w_n = 1$
(4.3)

を解くことで w_n を得る.式(4.2),(4.3)の操作は、これまで得たn-1個の負荷重ベクトル w_n に直行 する条件のもと、分散が最大化される方向を選ぶことに相当する. w_n , $n \in \{1, ..., D_L\}$ の負荷重ベクトルを求めた後、

$$y_{i,n} = \boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w_n} \tag{4.4}$$

とすれば、各解 x_i , $i \in \{1, ... N_d\}$ に対して射影後の空間 S_L における解 y_i が得られる.

PCAの利点は、 S_L における各軸が負荷重ベクトル w_n によって意味づけされる点である。 S_L における解の変化を各軸の意味に沿って理解できるため、データセットの解釈性に優れる。一方、線形分離不可なデータセットに対しては局所的な構造をうまく変換できない欠点を持つ。

4.2.2. t-SNE: t-distributed Stochastic Neighbor Embedding

t-SNE はD次元空間Sの解 $x \in P$ を、次元数 D_L の低次元空間S_Lへ埋め込む非線形次元削減法である. t-SNE では、Sでの解の類似度が低次元空間S_Lにおいても保たれるように非線形変換を行う.Sにお ける 2 つの解 x_i , x_i の類似度は、条件付き確率によって、

$$p_{j|i} = \frac{\exp{-\frac{\left\|\boldsymbol{x}_{i} - \boldsymbol{x}_{j}\right\|^{2}}{2\sigma_{i}^{2}}}}{\sum_{k \in \{1, \dots, N_{d}\} \setminus \{i\}} \exp{-\frac{\|\boldsymbol{x}_{i} - \boldsymbol{x}_{k}\|^{2}}{2\sigma_{i}^{2}}}}$$
(4.5)

と定義する.ここで、 σ_i はガウス分布の偏差である. σ_i は Perplexity がユーザ指定の値と一致するように求める.即ち、

Preplexiy =
$$2^{H_i}$$

 $H_i = -\sum_{j \in \{1, \dots, N_d\}} p_{j|i} \log_2 p_{j|i}$

$$(4.6)$$

を二分法により求める.ここで、 H_i は Shannon エントロピーである. x_i の周りに解が密集していれば、 σ_i は小さな値となる.また、Preplexiy には 5~50 の値を設定することが推奨されている [van der Maaten 2008].同時確率は、

$$p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2N_d} \tag{4.7}$$

により求める.低次元空間SLにおける2つの解yi, yjの類似度は、t分布による同時確率によって、

$$q_{ij} = \frac{\left(1 + \left\|\boldsymbol{y}_{i} - \boldsymbol{y}_{j}\right\|^{2}\right)^{-1}}{\sum_{k \in \{1, \dots, N_{d}\}} \sum_{l \in \{1, \dots, N_{d}\} \setminus \{k\}} (1 + \left\|\boldsymbol{y}_{k} - \boldsymbol{y}_{l}\right\|^{2})^{-1}}$$
(4.8)

で与えられる. p_{ij} の分布 Ψ と、 q_{ij} の分布 Ω についての Kullback–Leibler 情報量

$$KL(\Psi \parallel \Omega) = \sum_{i,j \in \{1,\dots,N_d\}, i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\tag{4.9}$$

を最小化するように、 S_L での解 y_i の分布を決定すれば、 $x_i \rightarrow y_i$ と次元削減できる.

t-SNE の利点は、Sでの解の類似度がS_Lにおいてもできる限り保たれるため、線形分離不可なデー タセットにおいても局所的な構造が保たれる点である.一方、非線形な変換を行うため、S_Lにおけ る軸や遠方に位置する解との距離に何ら意味を持たない.即ち PCA と比べ解釈性に劣る.

5章

気泡数がマイクロジェット生成に

与える影響

5.1. 諸論

1 章にて述べた通り、レーザー誘起気泡の体積、位置、個数といった気泡パラメータはマイクロ ジェット生成に影響を与えることが示唆される.本章では、気泡パラメータのうち、気泡数のみに 着目し、気泡数がマイクロジェット生成に与える影響について議論する.

本章では、気泡数にのみ着目するため、気泡の総体積や総内部エネルギー量は全てのケースで一 定とした数値的調査を行う.初めに、先行研究 [Peters 2013] [Hayasaka 2017]と同様に、メニスカスが ある場合とない場合のシミュレーションを行い、メニスカス方向に伝わる圧力波のインパルスとマ イクロジェット速度の関係を確認した.さらに、気泡数がマイクロジェット速度とインパルスに与 える影響を評価する.次に、メニスカス方向に伝播する圧力波の詳細な構造を調べ、圧力波の伝播 経路から特定点での圧力時間変化を説明する.最後に、気泡の膨張履歴を用いて、気泡の数によっ てマイクロジェットの速度が変化する理由を考察する.計算コスト削減のため、本研究では2次元 マイクロチャネル内の圧力波伝搬をシミュレーションした.微細管では、軸の中心で発生した圧力 波が周囲の管壁で反射して軸中心に戻るため、圧力波の収束効果が発生する.一方、2次元マイク ロチャネルでは、集束効果が弱くなり、圧力インパルス強度と噴流速度に定量的な差が生じる.し かし、2次元マイクロ流路においても、壁面での波の反射や気泡といった圧力場生成の基本プロセ スは考慮することが可能である.本研究では、圧力場生成の基本現象を定量的に議論し理解するこ とを目的とし、粘性及び表面張力を無視する.なお、本章で行う数値解析の格子収束性に関する調 査は付録 B で行う.また、粘性及び表面張力の影響は付録 C にて調査し、粘性及び表面張力を無視 しても定性的議論に影響が無いことを確認している.

39

5.2. 数值解析条件



図 5.1 メニスカスがある場合のシミュレーション設定 (w-meniscus setting). ジェット速度の評価 に用いる.



図 5.2 メニスカスがない場合のシミュレーション設定 (w/o-meniscus setting). メニスカス方向に 伝わる圧力波のインパルスを評価するために用いる.

本章では、2次元マイクロチャネル内の複数の高圧気泡(気泡数N ∈ {1,2,3})から伝播する圧力波の数値シミュレーションを行う.マイクロジェットの速度とメニスカスを評価するために、2つのシミュレーション条件を設定する.

図 5.1 に、マイクロジェットの速度を評価するために用いるメニスカスありのシミュレーション設定 (w-meniscus setting)を示す.気泡界面やメニスカスを捉えるため、 $x \in [-6.2,30]$ の範囲でセル間隔を 0.04 [-]と一定に設定した.w-meniscus setting では、メニスカスで強い膨張波が発生するため、 *K* $\nabla \cdot u$ の項は適用しない.本研究と同様に、強い膨張波を伴う水中爆発を扱う研究では、計算安定 化のために*K* $\nabla \cdot u$ の項を適用していない[Daramizadeh 2015] [Yu 2021] [Bryngelson 2021]. 図 5.2 に、メニスカスを評価するためのメニスカスのないシミュレーション設定 (w/o-meniscus setting)を示す.w/o-meniscus setting では、 $x \in [-12, 12]$ の範囲でセル間隔を 0.04 [-]と一様に設定する. ー方、x < -12及びx < 12の領域では、セルを左右の境界方向にストレッチングしている.本研究では、圧力メニスカスを検査面において評価する.圧力メニスカスを調べるための検査面は、気泡中心からx方向に 12 [-]の位置に設定する.メニスカスを以下の式で評価する.

$$I = \int_0^T \int_S p ds \, dt = \sum_{\Delta t \in [0,T]} \sum_{j \in \{\text{cell indexes}\}} p_j \Delta s_j \Delta t$$
(5.1)

ここで, Δ*t*は時間刻み, *j*は検査面上のセル番号, Δ*s_j*はセル面の面積である. 圧力の時間履歴を測 定するための圧力プローブは (12, 0)に配置する.

SG EoS のパラメータは、Shukla らに従い無次元値で、

$$\left(\gamma_{g}, \gamma_{l}, p_{ref,g}, p_{ref,l}\right) = (1.4, 6.12, 0, 2450), \tag{5.2}$$

と設定する [Shukla 2010]. 初期条件は,

$$(\rho_g, \rho_l, u, v, w, \alpha_g, p) = \begin{cases} (83.3, 0, 0, 0, 0, 1, 571.4) & \text{Laser-induced bubble} \\ (0, 833, 0, 0, 0, 0, 0, 0.7143). & \text{Liquid} \\ (1, 0, 0, 0, 0, 1, 0.7143) & \text{Air} \end{cases}$$

$$(5.3)$$

と設定する. これらの条件は, すべての計算ケースで同じである. 気泡圧力は, 実験で使用される パルスレーザー装置と同程度のレーザーエネルギー36 [µJ]を元に設定している[Tagawa 2013] [Kiyama 2019] [Krizek 2020] [Miyazaki 2021] [Gutiérrez-Hernández 2021]. 気泡の総内部エネルギーが全てのケー スで一定になるように, 気泡体積の和を一定とする. この制約から気泡の半径rは,

$$r = \sqrt{\frac{R^2}{N}} \tag{5.4}$$

で決定する. 気泡半径はパルスレーザーの典型的なスポットサイズに準拠している [Gutiérrez-Hernández 2021]. 気泡は表 5.1 に示すように等距離に配置する.

表 5.1 各ケースの気泡位置.

Number of Bubbles	1	2	3
Positions (x, y) [-]	(0,0)	(0, -3.5), (0, 3.5)	(0, -4.67), (0,0), (0,4.67)

通常, 気泡界面は計算の安定性のために平滑化処理される [Rasthofer 2017] [Garrick 2017a] [Beig 2018] [Tiwari 2013] [Schmidmayer 2020]. 平滑化された体積率は,

$$\alpha_g = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh\left(\frac{l(\boldsymbol{x}) - r}{h}\right) \right)$$
(5.5)

で与えられる [Tiwari 2013]. ここで, *x*はセル中心の位置, *l(x)*は気泡中心と*x*の距離である. 変数 *h* は計算セルの長さである.

本研究では対称境界条件によって、マイクロチャネルの下側のみ計算する.マイクロチャネルの 壁面には滑り壁面条件,左右には流出境界条件を設定する.流出境界は、反射が問題にならない十 分遠方に設定されている.

時間間隔は Courant 数 0.2 のもと、CFL 条件から $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ [-]に固定した.

5.3. 結果及び考察

5.3.1. マイクロジェット速度及びメニスカスの時間発展

本項では、インパルスとマイクロジェットの速度の関係を示す.さらに、マイクロジェットの時間発展、インパルスの時間履歴について述べる.本章では、安定シミュレーションを行うためにp-THINC-MUSCL3を用いる.



図 5.3 単一気泡のケースにおけるマイクロジェットの時間発展.

図 5.3 に単一気泡のケースにおけるマイクロジェットの時間発展を示す. 文献 [Tagawa 2012]と同 じく、メニスカスの中心からマイクロジェットが発生することが確認できる. 図 5.4 に、最終状態で のマイクロジェット速度とマイクロジェット形成の時間変化を示す. 図 5.4 (a)より、最終段階での マイクロジェット速度は、気泡数が増加するにつれて減少していることがわかる. また、マイクロ ジェット速度の時間履歴の違いに伴い、マイクロジェットの先端位置も異なっている (図 5 (b-d)).



(a) マイクロジェット速度の時間発展

(d) 気泡数 3 の場合の マイクロジェット形状

図 5.4 マイクロジェット速度の時間履歴及び最終時刻におけるマイクロジェット形状.図(b)-(d) 中のオレンジの破線は、気泡数1の場合のマイクロジェット先端部の位置を示している.



図 5.5 インパルスの時刻履歴.

次に,検査面に作用するインパルスについて述べる.図 5.5 にインパルスの時刻履歴を示す.図 5.5 より,時間 3.5 [-]までは,3 つの気泡がある場合に最もインパルスが大きいことがわかる.その後,3.5 [-]から 4.5 [-]までの時間では,気泡が 2 つの場合のインパルスが最も大きくなっている. *t*=4.5 [-]以降では,気泡が1つの場合が最も高いインパルスを示す.以上の結果をまとめると,初期 段階では気泡が複数あるほどインパルスが大きくなる.しかし,次第に気泡が1つの場合のインパ ルスが複数気泡の場合のインパルスを上回るようになる.

本節の結果をまとめると、最終段階での圧力インパルスは気泡数が多くなるにつれて減少する. この傾向は、マイクロジェットの速度と同じである.したがって、マイクロジェット速度は、気泡 からメニスカスへ伝播する圧力のインパルスと強い相関があると結論付けられる.これらの結果は、 メニスカスがない場合の圧力場の構造を調べることで、マイクロジェット速度に対する気泡数の影 響を議論することが可能であることを示している.

5.3.2. 単一気泡周りの圧力場時間発展



図 5.6 時間 (a) *t* = 0.0, (b) *t* = 0.9, (c) *t* = 1.8, (d) *t* = 3.3, (e) *t* = 4.5, 及び (f) *t* = 5.4 における単一気 泡周りの圧力場. 各図の上部には密度勾配値による圧力波及び界面位置の可視化結果を,下部に は圧力場を示している.

本項では、w/o-meniscus settingを用いて単一気泡から発生する圧力場の構造を調査した.また、圧力波を正確に捉えるために、MP-WENO5-JSを用いた.

図 5.6に、単一のレーザー誘起気泡によって生成された圧力場の発展を示す.まず,高圧のレーザー 誘起気泡によって球状の圧力波(圧縮波)が発生し(図 5.6 (a)),液体中を伝播する(図 5.6 (b)).次に, 圧縮波はマイクロチャネルの壁面に到達し,圧縮波として反射する(図 5.6 (c)).次に,壁面からの 圧力波が気泡界面で反射し,膨張波となる(図 5.6 (d)).その後,膨張波が壁で反射し(図 5.6 (e)), さらに気泡界面で圧縮波として反射する(図 5.6 (f)).この一連の波の反射の結果,マイクロチャネ ル内には複雑な圧力場が形成される.また,気泡と壁の間を繰り返し伝播する圧力波も観察できる.



図 5.7 単一気泡におけるプローブで圧力の時刻履歴.

図 5.7 はプローブでの圧力の時間履歴である.図 5.7 からわかるように,圧力の時間履歴は周期の 周期的な振動を示し,また,初期には固有の時間*t_nで圧力ピークが確認できる.*

圧力の時間履歴は、以下のようなプロセスで生成されていると考えられる.図5.8は、気泡から圧 カプローブまでの圧力波の経路を示したものである.圧力プローブに到達する圧力波の経路には2 種類の経路があると考えられる.一つは、壁面と気泡の間を繰り返し反射する経路である(図5.8 (a)).高圧気泡で発生した圧力波は、壁面での反射により気泡に戻る.さらに、気泡での反射で、一 部は圧力プローブ方向へ、一部は再び壁面方向へ伝播する.この経路によって、圧力プローブでは、 周期的な圧力振動が観測されると考えられる.第2の経路は、気泡から圧力プローブ方向に伝播す るものである(図5.8b).高圧気泡で発生した圧力波が直接、あるいは壁面で複数回反射してプロー ブに到達する.図5.7に示した圧力時間履歴の周期的振動は第一圧力経路によるものであり、初期に 見られる圧力ピークは第2の経路によって圧力波がプローブに到達したものであると考えられる.





(b)

図 5.8 気泡から圧力プローブまでの圧力波経路模式図.(a)気泡と壁の間を繰り返し往復する圧力 波及び(b)プローブ方向へ伝播する圧力波の2つの圧力波経路を示している.

以上のような圧力振動のメカニズムを検証するために、まず、図 5.8 (a)で説明した圧力振動の周 期時間を幾何的にモデル化する. 圧力ピークの周期Tは、気泡と壁の往復距離である距離L_pを伝播 する圧力波が要する時間から、以下のように算出されると考えられる.

$$T = \frac{L_p}{c_l} = \frac{D}{c_l} \tag{5.6}$$

ここで、 c_l は液体の音速、D = 14はマイクロチャネルの幅である。本研究では、 c_l は無次元量により 4.8 とした.次に、図 5.8 (b)の破線で描かれているように、圧力経路の長さ L_n を考慮して、第2の圧 力波経路から来る圧力ピークの遅延時間を推定する。圧力波がプローブに到達するまでの遅延時間 t_n は、以下の式を用いて算出することができる。

$$t_{1} = \frac{L_{1}}{c_{l}} = \frac{L}{c_{l}}$$

$$t_{2} = \frac{L_{2}}{c_{l}} = \frac{\sqrt{L^{2} + D^{2}}}{c_{l}}$$

$$t_{3} = \frac{L_{3}}{c_{l}} = \frac{\sqrt{L^{2} + (2D)^{2}}}{c_{l}}$$
(5.7)

$$t_n = \frac{\sqrt{(L^2 + ((n-1)D)^2}}{c_l}$$

ここで,Lは気泡と検査面との間の長さである.式(5.6),式(5.7)の計算結果を表5.2にまとめた.式(5.6),式(5.7)の結果は、シミュレーションの結果と一致している.ただし、式はシミュレーション 結果よりも長い時間を評価している.レーザー誘起気泡から伝播する圧力波によって、液体中の音 速は4.8~5.0の範囲で変化している.この圧力波は、方程式で考慮されている音速よりも速く伝播 している.また、式(5.6)、(5.7)では気泡半径の時間発展は考慮されていない.したがって、式はシ ミュレーションより長い時間を評価する.

表 5.2 式 (5.6)及び式 (5.7)の計算結果とシミュレーション結果(図 5.7)の比較.

時間 [-]	Т	t_1	t_2	t_3
シミュレーション結果	2.9	2.6	3.7	6.2
式 (5.6), (5.7)による推定結果	2.9	2.5	3.9	6.4

最後に、マイクロチャネル内の単一レーザー誘起気泡から発生する圧力場の構造をまとめる. 圧 力波の伝播には 2 つのタイプがあることがわかる. 一つは、気泡からメニスカスへの伝播、もう一 つは、気泡と壁の間で発生する往復伝播である. この 2 種類の圧力波が、マイクロチャネル内の圧 力場の構造を作り出している.

5.3.3. 複数気泡周りの圧力場時間発展



(c) t = 2.25

図 5.9 各気泡数における圧力場の時間発展. 各図の上部には密度勾配値による圧力波及び界面位 置の可視化結果を,下部には圧力場を示している.

本節では、複数の気泡が存在する場合のシミュレーション結果について述べる. 3.2 節と同様に MP-WENO5-JS と w/o-meniscus setting を用いる.

図 5.9 に気泡数 1,気泡数 2,気泡数 3 の圧力場の時間発展を比較した結果を示す.図 5.9 (a)より,気泡数が増えるほど,圧力波が早期に重なり,高圧領域が発生することがわかる.図 5.9 (b)に示す

ように、2 つの気泡の場合は2 つの圧力波の重なりによって*p*=226 以上の圧力領域が発生し、3 つの 気泡の場合は3 つの圧力波の重なりによって*p*=455 以上の強い圧力領域が発生することがわかる. しかし、気泡数1の場合、他の気泡から発生した圧力波との重なりが起らないため、図 5.9 (c)の最 大圧力は*p*=161 程度である.このように、気泡の数が増えると、複数の圧力波の重なりが早期にお こり、より強い圧力波が検査面に早く到達する.



(a) 気泡数 2



図 5.10 に、プローブにおける圧力の時間履歴を示す. 図 5.10 に示すように、複数の気泡が存在する場合でも、周期Tの圧力振動が確認できる. また、周期Tは気泡の数によって異なることが確認できる.

式(5.6)及び式(5.7)は、複数の気泡に拡張することができる. 図 5.11 は、複数気泡の場合のプロー ブまでの圧力波の経路を示したものである. まず、周期 T の式 (式(5.6))を拡張する. 複数気泡の場 合、式(5.6)の圧力波の往復距離は、気泡間の距離または気泡と壁との距離の 2 倍である. 圧力波の 伝搬距離L_pは、

$$L_p = \frac{D}{N} \tag{5.8}$$

となり、周期 T は L_p を用いて、

図 5.10 複数気泡における圧力プローブの時間履歴.

$$T = \frac{L_p}{c_l} = \frac{D}{Nc_l} \tag{5.9}$$

と計算することができる.次に,遅延時間の式(式(5.7))を拡張する.単一気泡の場合と同様に,図 5.11 (b)の破線は,圧力波が気泡からプローブまで伝播する経路を示している.遅延時間*t_n*は,

$$t_{1} = \frac{\sqrt{L^{2} + s^{2}}}{c_{l}}$$

$$t_{2} = \frac{\sqrt{L^{2} + (D - s)^{2}}}{c_{l}}$$

$$t_{3} = \frac{\sqrt{L^{2} + (D + s)^{2}}}{c_{l}}$$
...
$$t_{n} = \begin{cases} \frac{\sqrt{L^{2} + s^{2}}}{c_{l}} \text{ If } n = 1 \\ \frac{\sqrt{L^{2} + s^{2}}}{c_{l}} \text{ If } n = 1 \\ \frac{\sqrt{L^{2} + ((n - 1)D - s)^{2}}}{c_{l}} \text{ If } n \text{ is an even number} \\ \frac{\sqrt{L^{2} + ((n - 2)D + s)^{2}}}{c_{l}} \text{ If } n \text{ is an odd number} \end{cases}$$
(5.10)

と計算できる. ここで, *s*はマイクロチャネル中心から気泡までの距離である. 複数気泡における式 (5.9),式(5.10)の計算結果を表 5.3,表 5.4 に示す. 遅延時間*t_n*については,各気泡について式(5.10) を計算し,最も少ない 3 つの時間を示している. 音速の変化や気泡の半径を考慮していないため,式(5.9),式(5.10)の結果とシミュレーション結果の間に若干のずれが生じている. しかし,その誤差 は 10%以下であり,解析結果はシミュレーション結果と整合している. これらの結果から,複数の 気泡がある場合でも、2 種類の圧力波の伝播,即ち気泡からメニスカスへの伝播と気泡の周りの往 復が確認できる.

表 5.3 気泡数 2 における式 (5.9) 及び式 (5.10) の計算結果とシミュレーション結果 (図 5.10) の比較.

時間 [-]	Т	t_1	t_2	t_3
シミュレーション結果	2.9	2.6	3.7	6.2
式 (5.9), 式(5.10)による推定結果	2.9	2.5	3.9	6.4

表 5.4 気泡数 3 における式 (5.9) 及び式(5.10)の計算結果とシミュレーション結果(図 5.10)の比較.

時間 [-]	Т	t_1	t_2	t_3
シミュレーション結果	2.9	2.6	3.7	6.2
式 (5.9), 式(5.10)による推定結果	2.9	2.5	3.9	6.4

表5.5に最大圧力値と、最大圧力ピークのプローブへの到達時間の比較を示す.気泡数の増加に伴い、最大圧力が増加していることがわかる.また、最大圧力の到達時間は気泡数が多いほど早くなっている.この結果は、図5.9で確認したように、気泡数が多くなると重なり合う圧力波の数が多くなることに起因している.図5.5では、初期段階において気泡数の増加とともにインパルスが大きくなっていることが確認できるが、これは図5.9及び表5.5にて確認できる圧力波のオーバーラップ効果によるものであると考えられる.

表 5.5 プローブで観測された最大圧力値及びその到達時刻の比較.

気泡数	1	2	3
最大圧力値 [-]	2.9	2.6	3.7
最大圧力値の到達時刻 [-]	2.9	2.5	3.9

5.3.4. 考察





気泡の膨張によって周囲の流体に加わる力は、気泡が液体になす仕事としてインパルスに転じる が予想される.ここでは、図 5.11 に示す気泡総体積の時間履歴から、気泡数の減少に伴いインパル スが増加した理由を議論する.

図 5.11 より, *t* ∈ [0.0, 1.2]では気泡が 3 つの場合が最も総体積が大きく, その後*t* ∈ [1.2, 2.4]では気 泡が 2 つの場合が最も総体積が大きくなっていることがわかる.しかし,最終的には気泡が 1 つの 場合の体積が最も大きくなっている.気泡体積の時間履歴は,図 5.5 に示したインパルス時間履歴と 同様の傾向を示している.図 5.11 (b)は,気泡の膨張勾配が変化するタイミングを拡大した図である. 気泡の膨張勾配が変化したタイミングは,気泡が最初に圧力波と干渉して気泡の膨張が抑制された タイミングと一致する.表 5.6 に,気泡が初めて圧縮圧力波に接触した時刻をまとめた.本研究の設 定では,気泡の数が増えるにつれて気泡の間隔が短くなる.したがって,気泡数が増加すると,圧 力波と気泡の干渉が早く起こり,気泡の膨張が小さくなる.したがって,インパルスが減少すると 考えられる.

表 5.6 気泡と圧力波が初めて干渉した時刻の比較.

気泡数	1	2	3
時間 [-]	2.5	1.0	0.6

Tagawa らは、レーザーのパルスエネルギーを一定にして、レーザーの集光に用いる対物レンズの 倍率を変える実験を行い、レンズ倍率が高くなると最初に発生する気泡の数が少なくなり、圧力イ ンパルスが大きくなることを確認した[Tagawa 2016]. この実験結果は、気泡数が少ないほどより大 きな圧力インパルスを発生させたと解釈できるが、本研究で得られた結果と一致する. この結果 [Tagawa 2016]は、図 5.11 に示すように、気泡数が多いほど気泡の膨張が抑制されることが理由であ る可能性がある.

5.4. まとめ

本章では、液体で満たされたマイクロチャネル内の複数のレーザー誘起気泡によって発生する圧 力波の伝搬を、5 方程式モデルを用いてシミュレーションした.まず、本章で定義したインパルス とマイクロジェット速度の関係について調査した.その結果、最終的なインパルスとマイクロジェ ット速度は、気泡の数が増加するにつれて減少することがわかった.また、インパルスはマイクロ ジェット速度と相関があることが確認された.この結果により、メニスカスがない場合の圧力場の 構造を調べることにで、マイクロジェット速度に対する気泡数の影響を議論できることが示唆され た.次に, 圧力場の時間発展を調べ, 気泡が1つの場合の圧力波の経路を調査した.その結果, 圧 力波の伝播には, 気泡からメニスカスへの伝播と, 気泡と壁を往復する伝播の2種類があることが 確認された.この2種類の伝播は, 複数の気泡がある場合にも観察された.さらに, プローブ位置 で観測される圧力ピークに着目すると, 気泡数の増加とともに最大圧力が増加し, ピーク圧力の到 達時刻が短くなることが確認された.最後に, 気泡体積の時間変化を調査した.気泡膨張履歴と気 泡圧力波干渉の時刻から, 気泡数の増加により気泡の膨張が早期に抑制され, インパルスが減少す ることが示唆された.本章で行った条件では, 気泡を複数配置すると, マイクロジェット生成に悪 影響を及ぼす結果が得られた.

6章

気泡パラメータ最適化とマイクロジェット 生成を支配的するパラメータの解明

6.1. 諸論

5 章では、気泡数の影響にのみ着目した調査を実施した.一方で、気泡体積や位置といった他の パラメータの影響については調査していない.また、いくつかの示唆はあるものの [Tagawa 2012] [Tagawa 2016]、実際にどのパラメータが影響を与えるかは未知であり、最適な気泡パラメータに関 する議論も十分に行われていない.そこで、本章では、気泡数の他、気泡体積、位置といった、ジ ェット生成に影響を与える気泡パラメータの特定と、最適気泡パラメータの探査を目的とする.

1 章で述べた通り,影響を与えるパラメータが未知であるため,パラメトリックスタディによる 調査は困難であると考える.そこで,本章では CMA-ES を用いたパラメータ最適化後,最適化で得 た解の集合を解析することでジェット生成に影響を与える気泡パラメータの特定を行う.

6.2. 数值解析条件



図 6.1 最適化に用いる数値解析条件.

数値解析では安定に計算を行うため、再構築法にρ-THINC-MUSCL3 を用いる.また、計算コストの削減のため、5章と同様に2次元マイクロチャネルを設定し、粘性及び表面張力を無視する.

図 6.1 に数値解析条件を示す. インパルスを計算するための計測面はx=10 [-]に設定されている.計 算領域は $[0,30] \times [-7,7]$ であり, 左側境界に対称境界条件, 右側は流出境界条件, 上面及び下面に は滑り壁面条件を設定する. 領域 $x \in [0,10]$ には等間隔にセルを配置し, $x \in [10,30]$ ではセルのx方 向長さを流出境界に向かって一定の伸縮比 1.2 で拡大している. $x \in [0,10]$ におけるセル幅は 0.04 [-] である. 液体の初期条件は以下のように設定されている.

$$(\rho_l, \boldsymbol{u}, p) = (10^3, \boldsymbol{0}, 0.7143), \tag{6.1}$$

また、気泡の初期条件を以下のように設定する.

$$\left(\rho_g, \boldsymbol{u}\right) = (10^2, \boldsymbol{0}),\tag{6.2}$$

$$\rho_g \epsilon_g = \frac{E}{\sum_k V_k},\tag{6.3}$$

ここで、Vは気泡体積、kは気泡番号を表す.総内部エネルギーEは 36.1 [mJ]とし、気泡内に内部エネルギーが均一に分布することを仮定する.気泡圧力pg は式(6.2)、(6.3)及び状態方程式(式(2.18))を用いて計算する.一般に、気泡界面の体積分率は計算の安定性のために双曲線正接関数で平滑化される [Tiwari 2013].しかし、最適化の際に非球形気泡が発生するため、双曲線正接関数による平滑化を適用することができない.そこで、本章では以下のようにガウスカーネルを用いた重み付き平滑化を行った.

$$\alpha_g = \frac{\sum_n \alpha_{g,n} \operatorname{kernel}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_n|, h)}{\sum_n \operatorname{kernel}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_n|, h)},\tag{6.4}$$

$$\operatorname{kernel}(d,h) = \frac{1}{2\pi h^2} \exp\left(-\frac{d^2}{2h^2}\right), \tag{6.5}$$

ここで、nは近傍セル番号である.変数hはセル間隔の1.2倍に設定されている.時間刻みは Courant-Friedrichs-Lewy 条件に基づいて $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ [-]とし、Courant 数は 0.2 に相当するものとした.

6.3. 最適化問題の定式化及びデータ解析設定

本章では以下の最適化問題を定義する.

maximize
$$I(\boldsymbol{b})$$
,
subject to $\boldsymbol{b} = (y_1, r_1, \dots, y_4, r_4)^T$, (6.6)

ここで、I(b)は検査面におけるインパルス、bは気泡設計パラメータ、 $y_i \in [-7R,7R]$ は気泡を定義 するための円の座標、 $r_i \in [0.4R,R]$ は気泡を定義するための円の半径、 $R = 35 [\mu m]$ は代表長さで ある.気泡設計パラメータbを元に初期気泡を設定し、数値解析を行うことでI(b)を求める.図 6.2 に示すように、変数bによって生成された円が互いに重なり合うと、重なり合った円を1つの気泡と して定義する.図 6.2に示される再定義操作によって、気泡の数や気泡形状、体積を自由に変更でき る.

本章では、2 つのデータセットの解析を行う.1 つ目は、**b**及び*I*(**b**)で定義される変数 $\overline{\mathbf{b}}$ = $(y_1, r_1, ..., y_4, r_4, I)$ のデータセットである.2 つ目は、気泡の初期圧力分布と*I*(**b**)で定義される変数 $\overline{\mathbf{p}} = (p_1, p_2, ..., p_n, I)$ のデータセットである.ここで、nは計算領域[0, 1.0] × [-7,7]に属するセル番号 を示している.本章では PCA を用いた解析を実施する.



図 6.2 気泡設計パラメータbによる初期気泡分布生成の概念図.

6.4. 最適化結果

図 6.3 に最適化の履歴を示す. 図 6.3 中に示した Baseline 解は, y=0 に置かれた半径 R の気泡であ り,実験で観測される典型的な解のインパルスを示している. CMA-ES は,図 6.3 に示すように, Baseline 解よりも優れた解を探索することに成功している. 図 6.4 に最適化過程における解の遷移を 示す. 図 6.4 から,最適化が進むにつれて,気泡が壁際に配置されていることが分かる. また,壁側 に配置された半球状の気泡が最適解を得られたことが確認できる.



図 6.3 最適化の履歴. Baseline 解は, y=0 に置かれた半径Rの気泡のインパルスを示している.



図 6.4 最適化過程における近似最適解の遷移. 227 回目の評価で得た解が本最適化で得られた近 似最適化となった.





図 6.5 空間 あの次元削減結果. 図中のいくつかの解に気泡分布をアノテーションしている.

図 6.5 に空間**b**の次元削減結果を示す.図 6.5 中の X1, X2 はそれぞれ第一主成分,第二主成分を 示し,図中のいくつかの解には気泡分布をアノテーションした.また,図 6.6 に,各主成分における 各変数の重みを示す.図 6.6 の重みの分布から,X1 はインパルス,X2 は気泡の位置を示しているこ とがわかる.これら結果から,CMA-ES は図 6.4 に示すように,インパルスを最大化するために気泡 を壁付近に配置したことが明らかである.したがって,管内の気泡位置はジェット生成に影響を与 えるパラメータであると推測される.さらに,図 6.5 のアノテーションより,複数気泡より単一の気 泡のほうがより高いインパルスを発生させることが確認できる.



図 6.6 図 6.5 中に示す(a)軸 X1 及び(b)軸 X2 の重みベクトル絶対値.



図 6.7 空間pの次元削減結果. 図中のいくつかの解に気泡分布をアノテーションしている.



図 6.8 図 6.7 中に示す(a)軸 X1 及び(b)軸 X2 の重みベクトル絶対値.
図 6.7 に空間**p**の次元削減結果示す.図 6.7 においても、いくつかの解に気泡分布を示すアノテーションを実施している.さらに、図 6.8 に各主成分に対する重みの絶対値を示す.図 6.8 (b)から、各セルの初期圧力の重みが壁面付近に分布していることがわかる.次元削減後の各軸におけるインパルスの重みの絶対値は X1 が 0.94, X2 が 0.2 である.したがって、図 6.8 の結果は、X1 がインパルスにほぼ対応することを意味する.一方、X2 は主に壁近傍の初期圧力に由来している.さらに、式(6.3)及び状態方程式(式(2.18))から、気泡の総体積と初期圧力対応するため、X2 は気泡の総体積と関係することが予想される.図 6.7 に示すように、気泡体積は X2 軸にほぼ沿って変化することが明らかである.この結果は、インパルスを最大化するための最適な気泡体積が存在することを示している.したがって、気泡体積はジェット生成に影響を与えるパラメータであると推測される.

これまでの検討結果から、気泡の初期パラメータ、気泡の位置、個数、気泡体積がインパルスに 影響を与えるパラメータであると考えられる.最後に、これらのパラメータに対する解の散布図を 図 6.9 に示す.図 6.9 から、より高いインパルスを発生させるには、壁際に最適な体積を持つ単一の 気泡を配置することが有効であることが明らかである.本章の結果から、レーザーの集光位置とス ポットサイズを調整することが、レーザー誘起マイクロジェット生成の有効な手段であることが示 唆される.



図 6.9 気泡の位置, 個数, 気泡体積の散布図.



図 6.10 チャネル中心に配置した気泡とチャネル壁面に配置した気泡の圧力波伝播経路の比較.

気泡の個数がインパルスに与える影響に関しては 5 章での調査結果と整合する.また,気泡位置 に関しても,壁付近に気泡を配置すると圧力波が気泡と干渉するまでの時間が最も長くなる,即ち 気泡膨張が阻害されにくくなるため (図 6.10),気泡膨張が阻害されにくい気泡配置が最もインパル スが大きくなるとする 5 章の考察結果に整合する.気泡体積に関しては,本章の結果では適切な気 泡体積が存在するという結果が得られている.一方,Tawaga らの実験では,気泡体積の光学幾何学 的推定結果から初期気泡体積が大きいほどジェット速度が速くなるとしている [Tagawa 2012].この ような違いが発生する原因としては,実験ではレーザー焦点のオフセット距離等のパラメータによ って,液体のレーザー吸光率が変化し,気泡の総内部エネルギーがすべての解で一定とする最適化 問題の仮定と一致していない可能性が挙げられる.このような違いを明らかにするため,実験と連 携したさらなる調査が必要である.

6.6. エネルギー削減率

最後に、本章で得られた最適解がベースライン解と同等のインパルスを生成するために必要なエ ネルギー E_R を示し、得られた最適解のエネルギー削減率を示す、 E_R は以下の式の根を二分法により 求めることで得る.

$$f(E) = I_{\text{baseline}} - I^*(E). \tag{6.7}$$

ここで、 I_{baseline} はベースライン解のインパルス、 $I^*(E)$ は気泡内部エネルギーEにおける最適解のインパルスである.本論文では $|f(E)| < \epsilon$ となるまで計算を行い、終了判定のしきい値は $\epsilon = 10^{-7}$ とした.計算の結果、 $E_R = 4.332$ [mJ]が得られた.この結果は、ベースライン解と比較してエネルギーを88%削減したことを意味する.この削減率は特定の条件のもと二次元チャネル内で最適化を実施した結果から得であるため、実際の削減率と定量的に一致しない可能性があるものの、本論文で示した壁面への気泡配置により大幅にエネルギーを削減できる可能性を示している.

6.7. まとめ

本章では、レーザー誘起マイクロジェットの生成に影響を与える気泡パラメータの探査と最適化 を行った.本章の結果から、気泡の位置、個数、気泡体積がマイクロジェットの生成に影響を与え る気泡パラメータであることが示唆された.また、壁に半球状の気泡を配置した結果が最適解とし て得られた.

7章

エネルギー効率最大化を目的とした 気泡最適化

7.1. 諸論

6 章では、インパルスIを指標とすることで、マイクロジェット生成に影響を与える気泡パラメー タや最適解の議論を行ってきた.一方、本研究の目的とするマイクロジェット生成の効率化という 観点からは、インパルスIだけではなく、気泡の総内部エネルギーEとインパルスインパルスIの比で あるエネルギー効率I/E (Impulse-to-Energy Ratio: IER)を指標とし議論を行うことも可能である.そこ で、本章では IER を目的関数とした最適化を行う.また、本章でも最適化過程で得られた解の集合 を解析することで、I/Eに影響を与える気泡パラメータについて議論する.

7.2. 数值解析条件





本章でも6章と同様に、数値解析では安定に計算を行うため、再構築法に*p*-THINC-MUSCL3を用いる.また、計算コストの削減のため、2次元マイクロチャネルを設定し、粘性及び表面張力を無視する.

解析条件,及び計算格子の設定も 6 章と同様のものを利用する.図 7.1 に計算条件の図を再掲する.気泡からインパルスを計測する計測面までの領域はセル幅 0.04 [-]で一定であり,計測面から流 出境界条件までの間はストレッチングレイシオ 1.2 で格子幅を拡大し,十分遠方に境界を設定した. また,初期条件設定に関係する式を以下に再掲する.

$$(\rho_l, \boldsymbol{u}, p) = (10^3, \boldsymbol{0}, 0.7143), \tag{6.1}$$

$$\left(\rho_{g},\boldsymbol{u}\right) = (10^{2},\boldsymbol{0}),\tag{6.2}$$

$$\rho_g \epsilon_g = \frac{E}{\sum_k V_k},\tag{6.3}$$

$$\alpha_g = \frac{\sum_n \alpha_{g,n} \operatorname{kernel}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_n|, h)}{\sum_n \operatorname{kernel}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_n|, h)},$$
(6.4)

$$\operatorname{kernel}(d,h) = \frac{1}{2\pi h^2} \exp\left(-\frac{d^2}{2h^2}\right).$$
(6.5)

時間刻みに関しても、6章と同様に $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ [-]を設定する.

7.3. 最適化問題の定式化及びデータ解析設定

本章で行う最適化問題を以下のように定式化する.

maximize IER(
$$\boldsymbol{b}$$
) = $\frac{I(\boldsymbol{b})}{E}$ (7.1)
subject to $\boldsymbol{b} = (y_1, r_1, \dots y_3, r_3, E)^T$

ここで, I(b)は検査面におけるインパルス, Eは気泡内に与えられる内部エネルギーの総量, bは気泡設計パラメータ, $y_i \in [-7R,7R]$ は気泡を定義するための円の座標, $r_i \in [0.4R,R]$ は気泡を定義するための円の半径, $R = 35 [\mu m]$ は代表長さである. 6 章での最適化と同様に, bを元に気泡を設計し, 初期条件を決定した後, 数値解析によってI(b)を算出しIER(b)を評価する (図 6.2 参照).

本章のデータ解析では**b**及び**I**(**b**)で定義される変数 $\overline{\mathbf{b}} = (y_1, r_1, \dots, y_3, r_3, \mathbf{I})$ のデータセットのみを解 析対象とする.

7.4. 最適化結果

図 7.1 に CMA-ES の最適化履歴を示す.図 7.1 に示すように、IER の最適値は 14711.43 である.図 7.2 は、CMA-ES により得られた近似最適解を示したものである.図 7.2 に示すように、近似最適解は壁面に半円形の気泡を1つ配置したものとなった.この結果は、6章の最適化結果とほぼ同様である.また、近似最適解の気泡エネルギー総量は、ほぼ設定した値域の下限値であることがわかる.図 7.3 は、気泡設計パラメータの空間における解の分布を散布図によって示したものである.図 7.3 が示す通り、y値が小さいほど IER が高くなることから、気泡を壁側に配置すると IER が向上することがわかる.この結果から、気泡の位置が IER に影響を与えていることが示唆される.次に、各円のr値を確認する.図 7.3 に示すように、円1と円3のr値が小さいと IER が高くなることがわかる. 一方、円2の半径については、0.5~0.7 のときに IER が最大となる.したがって、IER を最大化する気泡体積が存在することが示唆される.最後に、Fig.6 に示す気泡総内部エネルギーE の散布図を確認する.図 7.3 に示すように、CMA-ES は設定可能な気泡総内部エネルギーEの下限を集中的に探索していることがわかる.したがって、エネルギーが小さいほど IER が高くなることが示唆される.



図 7.1 IER を目的関数とした場合の最適化履歴.



図 7.2 IER を目的関数とした場合に得られた最適解.



図 7.3 気泡設計パラメータbの散布図. bの各変数と IER の関係を示している.

7.5. 最適化データの解析結果

図 7.4 に PCA による空間**b**の次元削減結果を示す. 図 7.4 の一部の解には、実際の気泡分布がわか るようにアノテーションを施している. 図 7.3 の考察と同様に、図 7.4 は気泡を壁面に配置すること で IER が向上し、エネルギーが低いほど IER が向上することを示唆している.さらに、図 7.4 は、気 泡の数が少なくなると、IER が向上することが見て取れる.

本研究で得られた最適化結果を分析した結果, IER に影響を与える気泡パラメータの候補として, 気泡位置,気泡体積,気泡数,および気泡の総内部エネルギーが確認できた.しかし,図 7.3,図 7.4 で観察した気泡設計パラメータbは,気泡パラメータを直接示すものではない.これらの気泡パ ラメータと IER の関係を明らかにするために,図 7.5 に散布図行列を用いて気泡パラメータを可視化 した結果を示す.図 7.5 のcは相関係数,図 7.5 の対角線は頻度分布を示している.図 7.5 より,IER と平均気泡位置の間には,-0.8 以下で強い負の相関があることがわかる.また,IER と全気泡エネル ギーとの間にも-0.8 以下の強い負の相関があることが確認できる.したがって,図 7.5 から,壁近傍 に分布する総内部エネルギーEの低い気泡ほど効率よくマイクロジェットを生成していると結論づ けられる.さらに,IER と気泡数の相関係数は-0.715 であることがわかる.したがって,気泡数が少 ない方が効率よくマイクロジェットを発生させることができることも確認できる.図 7.5 は,気泡量 と IER の間にも強い相関があることを示している.しかし,図 7.3 の考察から,円2の半径が 0.5~0.7 のときに IER が最大になることが確認されているため,IER を最大化する最適な気泡体積が存在す ると考えられる.



図 7.4 IER 最適化問題で得た解集合を用いて行った空間 **b**の次元削減結果.



図 7.5 抽出された気泡パラメータの散布図行列.

気泡位置,気泡体積,気泡数に関しては,インパルスIを指標とした6章と同様の結果を得た.一方,本章では総内部エネルギーEがIERに影響を与えるという新しい知見を得た.総内部エネルギー Eが IER に影響を与える理由を考察するため,本章では最後に理論的な解析から IER の関係式を求 め,総内部エネルギーE が小さいほど IER が大きくなる理由を考察する.本解析では,以下の仮定 を用いる.

1. 気泡が膨張によって水に与える力積が、検査面で観測される力積に転じる.

- 2. 単一の球形気泡とする.
- 3. 気泡内は理想気体の状態方程式に従う.
- 4. 気泡界面で断熱を仮定する.

時間tにおける気泡の表面積は,

$$S(t) = 4\pi r(t)^{2}$$

= $4\pi \left(\frac{3V(t)}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}} = (4\pi)^{\frac{1}{3}} (3V(t))^{\frac{2}{3}}$ (7.2)

で与えられる.ここで、r(t)は気泡半径であり、 $V(t) = 4/3\pi r(t)^3$ は気泡の体積である.気泡内の圧力は、理想気体の状態方程式、

$$p_g(t) = \left(\gamma_g - 1\right) \frac{E}{V(t)} \tag{7.3}$$

に従う.式(7.2)及び式(7.3)から、気泡が周囲の液体に与えるインパルスは、

$$I_{b} = \int_{0}^{t_{end}} p_{g}(t)S(t)dt$$

= $(4\pi)^{\frac{1}{3}}(3)^{\frac{2}{3}}(\gamma_{g}-1)E\int_{0}^{t_{end}}V(t)^{-\frac{1}{3}}dt$ (7.4)
= $a_{1}E\int_{0}^{t_{end}}V(t)^{-\frac{1}{3}}dt$

となる. したがって IER は,

IER =
$$\frac{I_b}{E} = \alpha_1 \int_0^{t_{end}} V(t)^{-\frac{1}{3}} dt$$
 (7.5)

と計算できる. したがって, IER と気泡体積に関する以下の関係を得る.

$$\operatorname{IER} \propto \int_{0}^{t_{end}} V(t)^{-\frac{1}{3}} dt.$$
(7.6)

気泡体積の時間履歴が既知であれば,式(7.6)の右辺は数値積分によって評価可能である.図7.6に,本章の最適化で得た数値解析解の気泡体積時間履歴から式(7.6)の右辺を評価した結果を示す.図7.6中のcは相関係数を示している.図7.6から高い相関係数を確認できるため,式(7.6)の妥当性を確認できる.



図 7.6 IER と $\int_0^{t_{end}} V(t)^{-\frac{1}{3}} dt$ (式(7.6))の関係. 点で示す図中のデータは,最適化過程で得た数値解 析解を用いて求めたものである.

式(7.5)は、気泡半径によって、

$$IER = \alpha_1 \int_0^{t_{end}} \left(\frac{4}{3}\pi r(t)^3\right)^{-\frac{1}{3}} dt$$

= $\alpha_2 \int_0^{t_{end}} r(t)^{-1} dt$ (7.7)

とも書き表せる.しかがって,

$$\operatorname{IER} \propto \int_{0}^{t_{end}} r(t)^{-1} dt \tag{7.8}$$

と IER と気泡半径の関係を得る.式(7.8)は半径の逆数をとるため、気泡の初期体積が同じであれば、 気泡の膨張が遅いほど IER が大きくなることを示唆している.このことから、気泡に与えられる内 部エネルギーの総量が小さいほど IER が大きくなる理由を説明できる.説明のため、気泡界面の膨 張収縮を示す運動方程式である Rayleigh-Plesset 方程式を示す.

$$\frac{p_g(t) - p_\infty}{\rho_l} = \frac{3}{2} \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r \frac{d^2 r}{dt^2},$$
(7.9)

ここで、 p_{∞} は気泡から十分遠方の圧力である.気泡膨張の初期時刻t = 0においては、dr/dtは 0 であるため、初期の気泡膨張加速度は $p_g(t) - p_{\infty}$ で決定する.気泡体積が同じであれば、気泡に与える全内部エネルギーが大きくなるほど圧力差は大きくなり、気泡はより速く膨張する.したがって、IER はエネルギーEが増加するにつれて減少すると考えられる.

7.6. 力積と気泡内部エネルギーEの関係

本章の最適化では、気泡内部エネルギーが低いほど IER が大きくなる結果を得ている.この結果 は、インパルスと気泡内部エネルギーに線形ではない関係があることを示唆している.そこで、本 設では力積と気泡内部エネルギーの関係について調査する.本調査は本章で得た最適気泡形状(図 7.2)を用いて行い、気泡内部エネルギーを $E \in [9,90]$ の範囲で $\Delta E = 9.0$ ずつパラメータスイープする ことで行う.図 7.7 に本調査で得られた力積と気泡内部エネルギーの関係を示す.図 7.7 から、力積 は内部エネルギーの増加に伴い増加はするものの、対数的増加であることが確認できる.このよう な力積と気泡内部エネルギー間の性質により、気泡内部エネルギーが低いほど IER が大きくなる結 果が得られたと考えられる.



図 7.7 力積と気泡内部エネルギーの関係.本章で得た最適気泡形状をもとに,エネルギーを*E* ∈ [9,90]でパラメータスイープした結果を示している.

7.7. まとめ

本章では、マイクロジェット生成の指標としてエネルギー効率 IER を定義し、IER の最大化を目 的とした気泡最適化を行った.また、最適化で得られた解の集合を利用したデータ解析により、 IER に影響を与え得る気泡パラメータの抽出を行った.最適化の結果、6章で実施したインパルス最 大化を目的とした気泡最適化と同じく、壁に半円状の単一気泡を配置した結果が最適解として得ら れた.また、IER に影響を与えるパラメータとして、気泡位置、気泡体積、気泡数、総内部エネル ギーを得た.また、総内部エネルギーと IER の関係を解析的に導出し、気泡半径の逆数を時間積分 した値と、IER に相関関係があることを示した.

8章

結言

本論文は、(1)マイクロジェット速度を支配する気泡パラメータを特定し、そのパラメータがマイ クロジェット速度に与える影響を調査すること、及び(2) マイクロジェット速度を最大化する最適 気泡パラメータを調査することを目的とし、数値解析、最適化、データ解析による調査を行った. 本章では本論文で得た結論をまとめる.

5章では、気泡数がマイクロジェット生成に与える影響を数値解析により調査した.5章では、気泡の総体積及び総内部エネルギーが全てのケースで一定であるという条件のもと、気泡を等間隔に 配置し、気泡数がマイクロジェット生成に与える影響を調査した.また、本調査は2次元マイクロ チャネル内でおこなった.5章の要点は以下の通りである.

- 5章で設定する条件においては、メニスカス方向に伝わる圧力由来のインパルスとマイクロジェット速度は相関関係にあることが確認された.このことから、気泡からメニスカス方向に伝播する圧力波の経路や構造を理解することで、気泡数がマイクロジェット速度に与える影響を評価できることが示唆された.
- ・ 圧力波の可視化結果及び圧力波伝播経路の幾何学的推定結果から、(a) 気泡と壁面の間や近 傍の気泡との間で繰り返し伝播する圧力波経路及び、(b) 気泡からメニスカス方向へと伝播 する経路の2つの圧力波伝播経路が認められた。
- 気泡膨張履歴を用いた考察から、気泡数を増やすほど上記(a)の圧力波伝播経路により気泡膨 張が阻害され、その結果、インパルスが小さくなることが示唆された。

以上の議論により,5章で設定する条件では、気泡数が大きいほど気泡膨張が阻害されやすいため、 マイクロジェット生成に悪影響を及ぼすという結論を得た.

6 章では、数値解析及び最適化アルゴリズムにより、メニスカス方向に伝わる圧力由来のインパルスを最大化する目的で気泡最適化を実施した.最適化では、気泡郡に与えられる内部エネルギーの総量一定の条件のもと、気泡数や気泡径、配置、体積を柔軟に設定可能な最適化問題を定式化し、最適化を実施した.また、最適化の過程で得られた解の集合をデータ解析法により解析し、マイクロジェット速度に影響を与える気泡パラメータの同定を行った.6章の要点は以下の通りである.

• 最適化の結果,マイクロチャネル壁面に半円状の気泡を付着させるような配置が最適解として得られた.

データ解析の結果、インパルスを最大化する気泡体積の存在が確認された.また、壁面付近への気泡配置の有効性が認められた.本最適化においても、5章と同様に、気泡数が少ないほどインパルスが大きくなる結果を得た.

以上の議論により,6章では気泡体積,気泡配置,気泡数がマイクロジェット生成に影響を与える パラメータであることが確認された.また,適切な気泡体積のもと,壁面上に配置された半円気泡 が最適解となることが確認された.

7 章では、インパルスIと気泡郡に蓄えられた総内部エネルギーEの比であるエネルギー効率I/Eを 定義し、エネルギー効率最大化を目的とした気泡最適化問題を解いた.6 章と同様に気泡数や気泡 径、配置、体積を柔軟に設定可能な最適化問題を定式化した.また、最適化の過程で得られた解の 集合をデータ解析法により解析し、エネルギー効率に影響を与える気泡パラメータの同定を行った. 7章の要点は以下の通りである.

- 最適化の結果,6章と同様に、マイクロチャネル壁面に半円状の気泡を付着させるような配置が最適解として得られた。
- データ解析の結果も6章と同様であり、インパルスを最大化する気泡体積の存在が確認された.また、壁面付近への気泡配置の有効性と、気泡数が少ないほどインパルスが大きくなる結果を得た.また、データ解析や散布図による最適化の分析から、気泡郡に蓄えられた総内部エネルギーEが小さいほどエネルギー効率が良くなる結果を得た.
- 総内部エネルギー*E*とエネルギー効率IERの関係を記述する解析解IER $\propto \int_0^{t_{end}} V(t)^{-\frac{1}{3}} dt$ を導出した.
- 上記関係から,初期体積が同じであれば,気泡の体積変化が緩やかな総内部エネルギーEの 低い解ほどIERが大きくなることが示唆された.

以上の議論により,7章では気泡体積,気泡配置,気泡数,総内部エネルギーEがエネルギー効率に 影響を与えるパラメータであることが確認された.また,6章と同様に,適切な気泡体積のもと, 壁面上に配置された半円気泡が最適解となることが確認された.

78

参考文献

[Tagawa 2012]	Y. Tagawa, N. Oudalov, C. W. Visser, I. R. Peters, D. van der Meer, C. Sun.
[g]	A. Prosperetti, and D. Lohse, "Highly Focused Supersonic Microjets," Phys.
	Rev. X. vol. 2. no. 3. n. 031002. Jul. 2012. doi:
	10.1103/PhysRevX.2.031002.
[Tagawa 2016]	Y. Tagawa, S. Yamamoto, K. Havasaka, and M. Kameda, "On pressure
	impulse of a laser-induced underwater shock wave." Journal of Fluid
	Mechanics, vol. 808, pp. 5–18, 2016, doi: 10.1017/ifm.2016.644.
[Antkowiak 2007]	A. Antkowajak, N. Bremond, S. Le Dizes, and E. Villermaux, "Short-term
	dynamics of a density interface following an impact." Journal of Fluid
	Mechanics, vol. 577, pp. 241–250, 2007, doi:
	10.1017/S0022112007005058.
[Onuki 2018]	H. Onuki, Y. Oi, and Y. Tagawa, "Microjet Generator for Highly Viscous
	Fluids," Phys. Rev. Applied, vol. 9, no. 1, p. 014035, 2018, doi:
	10.1103/PhysRevApplied.9.014035.
[Longuet-Higgins 1983]	M. S. Longuet-Higgins, "Bubbles, breaking waves and hyperbolic jets at a
	free surface," J. Fluid Mech., vol. 127, pp. 103–121, 1983, doi:
	10.1017/S0022112083002645.
[Duchemin 2022]	L. Duchemin, S. Popinet, C. Josserand, and S. Zaleski, "Jet formation in
	bubbles bursting at a free surface," Physics of Fluids, vol. 14, no. 9, pp.
	3000–3008, 2002, doi: 10.1063/1.1494072.
[Bergmann 2009]	R. Bergmann, D. Van Der Meer, S. Gekle, A. Van Der Bos, and D. Lohse,
	"Controlled impact of a disk on a water surface: cavity dynamics," Journal
	of Fluid Mechanics, vol. 633, pp. 381–409, 2009, doi:
	10.1017/S0022112009006983.
[Fedorchenko 2004]	A. I. Fedorchenko and AB. Wang, "On some common features of drop
	impact on liquid surfaces," Physics of Fluids, vol. 16, no. 5, pp. 1349–1365,
	2004, doi: 10.1063/1.1652061.
[Delrot 2016]	P. Delrot, M. A. Modestino, F. François Gallaire, D. Psaltis, and C. Moser,
	"Inkjet Printing of Viscous Monodisperse Microdroplets by Laser-Induced
	Flow Focusing," Phys. Rev. Applied, vol. 6, no. 2, p. 024003, 2016, doi:
	10.1103/PhysRevApplied.6.024003.

[Xiong 2015]	S. Xiong, L. K. Chin, K. Ando, T. Tandiono, A. Q. Liu, and C. D. Ohl,
	"Droplet generation via a single bubble transformation in a nanofluidic
	channel," Lab Chip, vol. 15, no. 6, pp. 1451–1457, 2015, doi:
	10.1039/C4LC01184H.
[Tagawa 2013]	Y. Tagawa, N. Oudalov, A. E. Ghalbzouri, C. Sun, and D. Lohse, "Needle-
	free injection into skin and soft matter with highly focused microjets," Lab
	Chip, vol. 13, no. 7, pp. 1357–1363, 2013, doi: 10.1039/C2LC41204G.
[Kiyama 2019]	A. Kiyama et al., "Visualization of penetration of a high-speed focused
	microjet into gel and animal skin," Journal of Visualization, vol. 22, no. 3,
	pp. 449-457, 2019, doi: 10.1007/s12650-019-00547-8.
[Krizek 2020]	J. Krizek, P. Delrot, and C. Moser, "Repetitive regime of highly focused
	liquid microjets for needle-free injection," Scientific Reports, vol. 10, no. 1,
	p. 5067, 2020, doi: 10.1038/s41598-020-61924-0.
[Miyazaki 2021]	Y. Miyazaki, M. Usawa, J. Kawai Shumaand Yee, M. Muto, and Y.
	Tagawa, "Dynamic mechanical interaction between injection liquid and
	human tissue simulant induced by needle-free injection of a highly focused
	microjet," Scientific Reports, vol. 11, no. 1, p. 14544, 2021, doi:
	10.1038/s41598-021-94018-6.
[Peters 2013]	I. R. Peters, Y. Tagawa, N. Oudalov, C. Sun, A. Prosperetti, D. Lohse, and
	D. van der Meer., "Highly focused supersonic microjets: numerical
	simulations," Journal of Fluid Mechanics, vol. 719, pp. 587-605, 2013, doi:
	10.1017/jfm.2013.26.
[Kyriazis 2019]	N. Kyriazis, P. Koukouvinis, and M. Gavaises, "Numerical investigations
	on bubble-induced jetting and shock wave focusing: application on a
	needle-free injection," Proceedings of the Royal Society A: Mathematical,
	Physical and Engineering Sciences, vol. 475, no. 2222, p. 20180548, 2019,
	doi: 10.1098/rspa.2018.0548.
[Batchelor 2000]	G. K. Batchelor, An Introduction to Fluid Dynamics. Cambridge University
	Press, 2000. doi: 10.1017/CBO9780511800955.
[Hayasaka 2017]	K. Hayasaka, A. Kiyama, and Y. Tagawa, "Effects of pressure impulse and
	peak pressure of a shockwave on microjet velocity in a microchannel,"
	Microfluidics and Nanofluidics, vol. 21, no. 11, p. 166, 2017, doi:
	10.1007/s10404-017-2004-6.

[Vogel 1999]	A. Vogel et al., "Energy balance of optical breakdown in water at
	nanosecond to femtosecond time scales," Applied Physics B, vol. 68, no. 2,
	pp. 271–280, 1999, doi: 10.1007/s003400050617.
[Sankin 2006]	G. N. Sankin, W. N. Simmons, S. L. Zhu, and P. Zhong, "Shock Wave
	Interaction With Laser - Generated Single Bubbles," AIP Conference
	Proceedings, vol. 838, no. 1, pp. 311-314, 2006, doi: 10.1063/1.2210367.
[Klaseboer 2007]	E. Klaseboer et al., "Interaction of lithotripter shockwaves with single
	inertial cavitation bubbles," Journal of Fluid Mechanics, vol. 593, pp. 33-
	56, 2007, doi: 10.1017/S002211200700852X.
[Quinto-Su 2013]	P. A. Quinto-Su and K. Ando, "Nucleating bubble clouds with a pair of
	laser-induced shocks and bubbles," Journal of Fluid Mechanics, vol. 733, p.
	R3, 2013, doi: 10.1017/jfm.2013.456.
[Hsiao 2013]	CT. Hsiao et al., "Modelling single- and tandem-bubble dynamics between
	two parallel plates for biomedical applications," Journal of Fluid Mechanics,
	vol. 716, pp. 137–170, 2013, doi: 10.1017/jfm.2012.526.
[Supponen 2017]	O. Supponen, D. Obreschkow, P. Kobel, M. Tinguely, N. Dorsaz, and M.
	Farhat, "Shock waves from nonspherical cavitation bubbles," Phys. Rev.
	Fluids, vol. 2, no. 9, p. 093601, 2017, doi:
	10.1103/PhysRevFluids.2.093601.
[Beig 2018]	S. Beig, "A Computational Study of the Inertial Collapse of Gas Bubbles
	Near a Rigid Surface," PhD thesis, 2018.
[Osher 2001]	S. Osher and R. P. Fedkiw, "Level Set Methods: An Overview and Some
	Recent Results," Journal of Computational Physics, vol. 169, no. 2, pp.
	463-502, 2001, doi: https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6636.
[Luo 2004]	H. Luo, J. D. Baum, and R. Löhner, "On the computation of multi-material
	flows using ALE formulation," Journal of Computational Physics, vol. 194,
	no. 1, pp. 304-328, 2004, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.09.026.
[Terashima 2010]	H. Terashima and G. Tryggvason, "A front-tracking method with projected
	interface conditions for compressible multi-fluid flows," Computers &
	Fluids, vol. 39, no. 10, pp. 1804–1814, 2010, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.06.012.
[Baer 1986]	M. R. Baer and J. W. Nunziato, "A two-phase mixture theory for the
	deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials,"
	International Journal of Multiphase Flow, vol. 12, no. 6, pp. 861-889, 1986,
	doi: https://doi.org/10.1016/0301-9322(86)90033-9.

[Saurel 2009]	R. Saurel, F. Petitpas, and R. A. Berry, "Simple and efficient relaxation
	methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and
	shocks in multiphase mixtures," Journal of Computational Physics, vol. 228,
	no. 5, pp. 1678–1712, 2009, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.11.002.
[Kapila 2001]	A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart, "Two-
	phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular
	materials: Reduced equations," Physics of Fluids, vol. 13, no. 10, pp. 3002-
	3024, 2001, doi: 10.1063/1.1398042.
[Perigaud 2005]	G. Perigaud and R. Saurel, "A compressible flow model with capillary
	effects," Journal of Computational Physics, vol. 209, no. 1, pp. 139-178,
	2005, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.018.
[Garrick 2017a]	D. P. Garrick, M. Owkes, and J. D. Regele, "A finite-volume HLLC-based
	scheme for compressible interfacial flows with surface tension," Journal of
	Computational Physics, vol. 339, pp. 46-67, 2017, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.03.007.
[Shukla 2010]	R. K. Shukla, C. Pantano, and J. B. Freund, "An interface capturing method
	for the simulation of multi-phase compressible flows," Journal of
	Computational Physics, vol. 229, no. 19, pp. 7411-7439, 2010, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.06.025.
[Garrick 2017b]	D. P. Garrick, W. A. Hagen, and J. D. Regele, "An interface capturing
	scheme for modeling atomization in compressible flows," Journal of
	Computational Physics, vol. 344, pp. 260-280, 2017, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.04.079.
[Daramizadeh 2015]	A. Daramizadeh and M. R. Ansari, "Numerical simulation of underwater
	explosion near air-water free surface using a five-equation reduced model,"
	Ocean Engineering, vol. 110, pp. 25–35, 2015, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2015.10.003.
[Rasthofer 2017]	U. Rasthofer, F. Wermelinger, P. Hadijdoukas, and P. Koumoutsakos,
	"Large Scale Simulation of Cloud Cavitation Collapse," Procedia Computer
	Science, vol. 108, pp. 1763–1772, 2017, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.procs.2017.05.158.
[Yu 2021]	J. Yu, J. Liu, B. He, H. Li, T. Xie, and D. Pei, "Numerical research of water
	jet characteristics in underwater explosion based on compressible
	multicomponent flows," Ocean Engineering, vol. 242, p. 110135, 2021, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2021.110135.

[Brackbill 1992]	J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach, "A continuum method for
	modeling surface tension," Journal of Computational Physics, vol. 100, no.
	2, pp. 335-354, 1992, doi: https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y.
[Johnsen 2006]	E. Johnsen and T. Colonius, "Implementation of WENO schemes in
	compressible multicomponent flow problems," Journal of Computational
	Physics, vol. 219, no. 2, pp. 715-732, 2006, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.04.018.
[Coralic 2014]	V. Coralic and T. Colonius, "Finite-volume WENO scheme for viscous
	compressible multicomponent flows," Journal of Computational Physics,
	vol. 274, pp. 95-121, 2014, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.06.003.
[Tiwari 2013]	A. Tiwari, J. B. Freund, and C. Pantano, "A diffuse interface model with
	immiscibility preservation," Journal of Computational Physics, vol. 252, pp.
	290-309, 2013, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.06.021.
[Schmidmayer 2020]	K. Schmidmayer, S. H. Bryngelson, and T. Colonius, "An assessment of
	multicomponent flow models and interface capturing schemes for spherical
	bubble dynamics," Journal of Computational Physics, vol. 402, p. 109080,
	2020, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109080.
[Maso 1995]	G. D. Maso, P. L. Floch, and F. Murat, "Definition and weak stability of
	nonconservative products," Journal de Mathématiques Pures et Appliquées,
	vol. 74, pp. 483–548, 1995.
[Saurel 2007]	R. Saurel, O. Le Métayer, J. Massoni, and S. Gavrilyuk, "Shock jump
	relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation," Shock
	Waves, vol. 16, no. 3, pp. 209–232, 2007, doi: 10.1007/s00193-006-0065-7.
[Allaire 2002]	G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh, "A Five-Equation Model for the
	Simulation of Interfaces between Compressible Fluids," Journal of
	Computational Physics, vol. 181, no. 2, pp. 577-616, 2002, doi:
	https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7143.
[Mavriplis 2003]	D. Mavriplis, "Revisiting the Least-Squares Procedure for Gradient
	Reconstruction on Unstructured Meshes," in 16th AIAA Computational
	Fluid Dynamics Conference, 2003. doi: 10.2514/6.2003-3986.
[Shima 2013]	E. Shima, K. Kitamura, and T. Haga, "Green-Gauss/Weighted-Least-
	Squares Hybrid Gradient Reconstruction for Arbitrary Polyhedra
	Unstructured Grids," AIAA Journal, vol. 51, no. 11, pp. 2740–2747, 2013,
	doi: 10.2514/1.J052095.

[Toro 1994]	E. F. Toro, M. Spruce, and W. Speares, "Restoration of the contact surface
	in the HLL-Riemann solver," Shock Waves, vol. 4, no. 1, pp. 25-34, 1994,
	doi: 10.1007/BF01414629.
[Tian 2011]	B. Tian, E. F. Toro, and C. E. Castro, "A path-conservative method for a
	five-equation model of two-phase flow with an HLLC-type Riemann
	solver," Computers & Fluids, vol. 46, no. 1, pp. 122–132, 2011, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.01.038.
[Einfeldt 1991]	B. Einfeldt, C. D. Munz, P. L. Roe, and B. Sjögreen, "On Godunov-type
	methods near low densities," Journal of Computational Physics, vol. 92, no.
	2, pp. 273–295, 1991, doi: https://doi.org/10.1016/0021-9991(91)90211-3.
[van Leer 1979]	B. van Leer, "Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A
	second-order sequel to Godunov's method," Journal of Computational
	Physics, vol. 32, no. 1, pp. 101–136, 1979, doi:
	https://doi.org/10.1016/0021-9991(79)90145-1.
[Jiang 1996]	GS. Jiang and CW. Shu, "Efficient Implementation of Weighted ENO
	Schemes," Journal of Computational Physics, vol. 126, no. 1, pp. 202-228,
	1996, doi: https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0130.
[Suresh 1997]	A. Suresh and H. T. Huynh, "Accurate Monotonicity-Preserving Schemes
	with Runge-Kutta Time Stepping," Journal of Computational Physics, vol.
	136, no. 1, pp. 83-99, 1997, doi: https://doi.org/10.1006/jcph.1997.5745.
[Balsara 2000]	D. S. Balsara and CW. Shu, "Monotonicity Preserving Weighted
	Essentially Non-oscillatory Schemes with Increasingly High Order of
	Accuracy," Journal of Computational Physics, vol. 160, no. 2, pp. 405-452,
	2000, doi: https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6443.
[Roe 1986]	P. L. Roe, "Characteristic-Based Schemes for the Euler Equations," Annual
	Review of Fluid Mechanics, vol. 18, no. 1, pp. 337–365, 1986, doi:
	10.1146/annurev.fl.18.010186.002005.
[Shyue 2014]	KM. Shyue and F. Xiao, "An Eulerian interface sharpening algorithm for
	compressible two-phase flow: The algebraic THINC approach," Journal of
	Computational Physics, vol. 268, pp. 326–354, 2014, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.03.010.
[Nonomura 2014]	T. Nonomura, K. Kitamura, and K. Fujii, "A simple interface sharpening
	technique with a hyperbolic tangent function applied to compressible two-
	fluid modeling," Journal of Computational Physics, vol. 258, pp. 95-117,
	2014, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.10.021.

[Hansen 2009]	N. Hansen, "Benchmarking a BI-Population CMA-ES on the BBOB-2009
	Function Testbed," in Proceedings of the 11th Annual Conference
	Companion on Genetic and Evolutionary Computation Conference: Late
	Breaking Papers, 2009, pp. 2389–2396. doi: 10.1145/1570256.1570333.
[Jones 1995]	T. Jones and S. Forrest, "Fitness Distance Correlation as a Measure of
	Problem Difficulty for Genetic Algorithms," in Proceedings of the 6th
	International Conference on Genetic Algorithms, 1995, pp. 184–192.
[Lunacek 2006]	M. Lunacek and D. Whitley, "The Dispersion Metric and the CMA
	Evolution Strategy," in Proceedings of the 8th Annual Conference on
	Genetic and Evolutionary Computation, 2006, pp. 477–484. doi:
	10.1145/1143997.1144085.
[Nelder 1965]	J. A. Nelder and R. Mead, "A Simplex Method for Function Minimization,"
	The Computer Journal, vol. 7, no. 4, pp. 308-313, Jan. 1965, doi:
	10.1093/comjnl/7.4.308.
[Pošík 2012]	P. Pošík and W. Huyer, "Restarted Local Search Algorithms for Continuous
	Black Box Optimization," Evol. Comput., vol. 20, no. 4, pp. 575-607, 2012,
	doi: 10.1162/EVCO_a_00087.
[Brooks 1958]	S. H. Brooks, "A Discussion of Random Methods for Seeking Maxima,"
	Operations Research, vol. 6, no. 2, pp. 244–251, 1958.
[Kirkpatrick 1983]	S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, "Optimization by Simulated
	Annealing," Science, vol. 220, no. 4598, pp. 671-680, 1983, doi:
	10.1126/science.220.4598.671.
[Holland 1975]	J. H. Holland, Adaptation in Natural and Artificial Systems. University of
	Michigan Press, 1975.
[Bäck 2013]	T. Bäck, C. Foussette, and P. Krause, Contemporary Evolution Strategies.
	Springer, 2013.
[Storn 1997]	R. Storn and K. Price, "Differential Evolution – A Simple and Efficient
	Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces," Journal of
	Global Optimization, vol. 11, no. 4, pp. 341-359, 1997, doi:
	10.1023/A:1008202821328.
[Kennedy 1995]	J. Kennedy and R. Eberhart, "Particle swarm optimization," in Proceedings
	of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks, 1995, vol. 4,
	pp. 1942–1948 vol.4. doi: 10.1109/ICNN.1995.488968.

[Eiben 1999]	A. E. Eiben, R. Hinterding, and Z. Michalewicz, "Parameter control in
	evolutionary algorithms," IEEE Transactions on Evolutionary Computation,
	vol. 3, no. 2, pp. 124–141, 1999, doi: 10.1109/4235.771166.
[Eiben 2011]	A. E. Eiben and S. K. Smit, "Parameter tuning for configuring and
	analyzing evolutionary algorithms," Swarm and Evolutionary Computation,
	vol. 1, no. 1, pp. 19–31, 2011, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.swevo.2011.02.001.
[Karafotias 2015]	G. Karafotias, M. Hoogendoorn, and A. E. Eiben, "Parameter Control in
	Evolutionary Algorithms: Trends and Challenges," IEEE Transactions on
	Evolutionary Computation, vol. 19, no. 2, pp. 167-187, 2015, doi:
	10.1109/TEVC.2014.2308294.
[Hansen 1996]	N. Hansen and A. Ostermeier, "Adapting arbitrary normal mutation
	distributions in evolution strategies: the covariance matrix adaptation," in
	Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary
	Computation, 1996, pp. 312-317. doi: 10.1109/ICEC.1996.542381.
[Tanabe 2014]	R. Tanabe and A. S. Fukunaga, "Improving the search performance of
	SHADE using linear population size reduction," in 2014 IEEE Congress on
	Evolutionary Computation (CEC), 2014, pp. 1658-1665. doi:
	10.1109/CEC.2014.6900380.
[Hasenjäger 2005]	M. Hasenjäger, B. Sendhoff, T. Sonoda, and T. Arima, "Three Dimensional
	Evolutionary Aerodynamic Design Optimization with CMA-ES," in
	Proceedings of the 7th Annual Conference on Genetic and Evolutionary
	Computation, 2005, pp. 2173-2180. doi: 10.1145/1068009.1068366.
[Gregory 2011]	M. D. Gregory, Z. Bayraktar, and D. H. Werner, "Fast Optimization of
	Electromagnetic Design Problems Using the Covariance Matrix Adaptation
	Evolutionary Strategy," IEEE Transactions on Antennas and Propagation,
	vol. 59, no. 4, pp. 1275-1285, 2011, doi: 10.1109/TAP.2011.2109350.
[Gorman 2014]	P. J. Gorman, M. D. Gregory, and D. H. Werner, "Design of Ultra-
	Wideband, Aperiodic Antenna Arrays With the CMA Evolutionary
	Strategy," IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 62, no. 4,
	pp. 1663-1672, 2014, doi: 10.1109/TAP.2013.2287904.
[BouDaher 2015]	E. BouDaher and A. Hoorfar, "Electromagnetic Optimization Using Mixed-
	Parameter and Multiobjective Covariance Matrix Adaptation Evolution
	Strategy," IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 63, no. 4,
	pp. 1712–1724, 2015, doi: 10.1109/TAP.2015.2398116.

[Fujii 2018]	G. Fujii, M. Takahashi, and Y. Akimoto, "CMA-ES-based structural
	topology optimization using a level set boundary expression—Application
	to optical and carpet cloaks," Computer Methods in Applied Mechanics and
	Engineering, vol. 332, pp. 624–643, 2018, doi:
	https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.01.008.
[Moghadam 2021]	A. E. Moghadam and R. Rafiee-Dehkharghani, "Optimal design of wave
	barriers in dry and saturated poroelastic grounds using Covariance Matrix
	Adaptation Evolution Strategy," Computers and Geotechnics, vol. 133, p.
	104015, 2021, doi: https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2021.104015.
[Hansen 2009]	N. Hansen, A. Auger, R. Ros, S. Finck, and P. Pošík, "Comparing Results
	of 31 Algorithms from the Black-Box Optimization Benchmarking BBOB-
	2009," in Proceedings of the 12th Annual Conference Companion on
	Genetic and Evolutionary Computation, 2010, pp. 1689–1696. doi:
	10.1145/1830761.1830790.
[Hansen 2016]	N. Hansen, The CMA Evolution Strategy: A Tutorial. arXiv, 2016. doi:
	10.48550/ARXIV.1604.00772.
[Hansen 2014]	N. Hansen and A. Auger, "Principled Design of Continuous Stochastic
	Search: From Theory to Practice," in Theory and Principled Methods for the
	Design of Metaheuristics, Y. Borenstein and A. Moraglio, Eds. Berlin,
	Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, pp. 145–180. doi:
	10.1007/978-3-642-33206-7_8.
[Blank 2020]	J. Blank and K. Deb, "Pymoo: Multi-Objective Optimization in Python,"
	IEEE Access, vol. 8, pp. 89497–89509, 2020, doi:
	10.1109/ACCESS.2020.2990567.
[Press 1969]	L. I. Press, M. S. Rogers, and G. H. Shure, "An interactive technique for the
	analysis of multivariate data," Behavioral Science, vol. 14, no. 5, pp. 364-
	370, 1969, doi: https://doi.org/10.1002/bs.3830140504.
[Breiman 1984]	L. Breiman, J. H. Friedman, R. A. Olshen, and C. J. Stone, Classification
	and regression trees. Routledge, 1984.
[Reshef 2011]	D. N. Reshef et al., "Detecting Novel Associations in Large Data Sets,"
	Science, vol. 334, no. 6062, pp. 1518–1524, 2011, doi:
	10.1126/science.1205438.
[Rosenblatt 1958]	F. Rosenblatt, "The perceptron: a probabilistic model for information
	storage and organization in the brain.," Psychological review, vol. 65 6, pp.
	86-408, 1958.

[Lecun 1989]	Y. Lecun, "Generalization and network design strategies," in Connectionism
	in perspective, R. Pfeifer, Z. Schreter, F. Fogelman, and L. Steels, Eds.
	Elsevier, 1989.
[Koza 1993]	J. R. Koza, "Evolution of Subsumption Using Genetic Programming,",
	Computer Science Department, Stanford University, 1993.
[Hotelling 1933]	H. Hotelling, "Analysis of a complex of statistical variables into principal
	components," Journal of Educational Psychology, vol. 24, pp. 498-520,
	1933.
[van der Maaten 2008]	L. van der Maaten and G. Hinton, "Visualizing Data using t-SNE," Journal
	of Machine Learning Research, vol. 9, no. 86, pp. 2579–2605, 2008.
[Lundberg 2017]	S. M. Lundberg and SI. Lee, "A Unified Approach to Interpreting Model
	Predictions," in Advances in Neural Information Processing Systems, 2017,
	vol. 30.
[Ribeiro 2016]	M. T. Ribeiro, S. Singh, and C. Guestrin, "Why Should I Trust You?':
	Explaining the Predictions of Any Classifier," in Proceedings of the 22nd
	ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and
	Data Mining, 2016, pp. 1135–1144. doi: 10.1145/2939672.2939778.
[Gutiérrez-Hernández 2021]	U. J. Gutiérrez-Hernández, F. De Colle, CD. Ohl, and P. A. Quinto-Su,
	"Transient time-delay focusing of shock waves in thin liquids," Journal of
	Fluid Mechanics, vol. 910, p. A27, 2021, doi: 10.1017/jfm.2020.1005.

研究業績

投稿論文

- <u>T. Ishikawa</u>, H. Nishida, and Y. Tagawa, "Design Exploration of Initial Bubbles for Higher-Speed Laser-Induced Microjets," IEEE Access, vol. 11, pp. 8268–8274, 2023, doi: 10.1109/ACCESS.2023.3238722.
- <u>T. Ishikawa</u>, H. Nishida, and Y. Tagawa, "Numerical Investigation on Influence of Number of Bubbles on Laser-Induced Microjet," Water, vol. 14, no. 22, 2022, doi: 10.3390/w14223707.

査読付き国際会議

- N. Takada, A. Watanabe, S. Shimomura, <u>T. Ishikawa</u>, and H. Nishida, "Identification of Important Flow Structures for Deep Reinforcement Learning-based Control of Flow Separation over an Airfoil," in AIAA SCITECH 2023 Forum, doi: 10.2514/6.2023-0864.
- <u>T. Ishikawa</u>, H. Nishida, and Y. Tagawa, "Design Optimization of Laser-Induced Bubble for Highly Efficient Generation of Microjets", vol. 2: Multiphase Flow (MFTC); Computational Fluid Dynamics (CFDTC); Micro and Nano Fluid Dynamics (MNFDTC). 2022. doi: 10.1115/FEDSM2022-86873.
- N. Takada, <u>T. Ishikawa</u>, T. Furukawa, and H. Nishida, "Feedback Control of Flow Separation over Airfoil with Deep Reinforcement Learning in Numerical Simulation," in AIAA SCITECH 2022 Forum, doi: 10.2514/6.2022-1365.
- <u>T. Ishikawa</u>, H. Fukumoto, A. Oyama, and H. Nishida, "Improved Binary Additive Epsilon Indicator for Obtaining Uniformly Distributed Solutions in Multi-Objective Optimization," in Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion, 2019, pp. 209–210. doi: 10.1145/3319619.3322025.

学会発表

- 高田直輝,渡辺綾乃,下村怜,<u>石川達将</u>,西田浩之, "深層強化学習を用いた翼周り剥離 流れ制御シミュレーションにおける判断根拠の可視化,"日本流体力学会年会,2022.
- Naoki Takada, <u>Tatsumasa Ishikawa</u>, Satoshi Shimomura, Satoshi Sekimoto, and Hiroyuki Nishida, "Visual Explanation of Flow Separation Control Strategy over an Airfoil Obtained in Deep Reinforcement Learning," International Symposium on Space Technology and Science, 2022.

- 9. <u>石川達将</u>,西田浩之,田川義之, "マイクロジェットの高効率生成に向けたレーザー誘起 気泡の配置最適化,"第35回数値流体力学シンポジウム,2021.
- 渡辺綾乃,下村怜,関本諭志,高田直輝,<u>石川達将</u>,西田浩之,大山聖, "深層強化学習 を利用した翼周りの効率的な剥離抑制制御の実験的研究,"日本機械学会第 99 期流体工学 部門講演会, 2021.
- 11. 高田直輝,下村怜,<u>石川達将</u>,西田浩之, "深層強化学習を利用した翼面上の剥離流れ制 御についての数値的研究,"日本機械学会 2021 年度年次大会, 2021.
- 12. <u>石川達将</u>,西田浩之,田川義之, "レーザー誘起気泡の発生個数が液中を伝播する圧力波 に与える影響,"日本混相流学会 混相流シンポジウム, 2021.
- 13. <u>石川達将</u>,西田浩之,田川義之, "複数のレーザー誘起気泡から液中を伝播する圧力波の 数値シミュレーション," 第 34 回数値流体力学シンポジウム, 2020.
- 石川達将,福本浩章,大山聖,西田浩之,"多目的最適化問題に対する設計変数空間上の 多様性を考慮した制約条件取扱手法の提案,"日本機械学会第29回設計工学・システム 部門講演会,2019.
- 15. <u>石川達将</u>,大山聖, "指標が多目的進化アルゴリズムの探査性能に与える影響,"日本機 械学会 第 28 回設計工学・システム部門講演会, 2018.
- <u>T. Ishikawa</u> and A. Oyama, "The Influence of Parent Population Size on The Performance of NSGA-II," JPNSEC International Workshop on Evolutionary Computation, 2018.
- 17. <u>石川達将</u>,大山聖, "異なる親集団サイズを設定する島型進化アルゴリズム,"進化計算
 シンポジウム, 2017.
- <u>石川達将</u>,島田優也,石向桂一, "非商用ソフトウェアを用いた流体解析環境の構築と評価,"日本機械学会北海道学生会第45回学生員卒業研究発表講演会,2016.

付録A

数値解析手法のバリデーション

本研究では、1次元の Gas-liquid shocktube 問題を用いて数値解析手法の検証を行った. 初期条件は、

$$\left(\rho_{l}, \rho_{g}, u, p\right) = \begin{cases} (0, 1.241, 0, 2.753) & , x \in [-1, 0] \\ (0.991, 0, 0, 3.059 \times 10^{-4}) & , x \in [0, 1] \end{cases}$$
(A.1)

$$\alpha_l = 1 - \left(1 + \exp\frac{x}{0.5h}\right)^{-1}$$
(A.2)

で与えられる.ここで、hはセル間隔、xはセル中心位置である。SG EoS の諸量は、

$$(\gamma_l, p_{ref,l}, \gamma_g, p_{ref,g}) = (5.5, 1.505, 1.4, 0)$$
(A.3)

とし, Garrick ら [Garrick 2017a]に従って時間ステップ を $\Delta t = 2.5 \times 10^{-4}$, 格子間隔 h = 0.0025 を設定する. 図 A1 に示す数値解, 解析的に得られた厳密解とよく一致していることが確認できる.



(c) 液相体積分率

図 A.1 Gas-liquid shocktube 問題の数値解と厳密解の比較. 黒線で厳密解を,赤線で MP-WENO5-JS を,青線で*ρ*-THINC-MUSCL3 による解を示している.

付録 B

格子収束性

本研究で最も空間精度の低い再構成法である ρ -THINC-MUSCL3を用いて格子収束性を検討する. w/o-meniscus setting (図 5.4)を用い,格子幅h = 0.028 (fine),h = 0.04 (intermediate),h = 0.056 (coarse)のインパルスを比較する.図 B.2 より, coarse は他の格子と大きくインパスは異なることを確認できる.一方,fine と intermediate の差は 9.1%である.以上の理由から,格子幅h = 0.04を選択した.



図 B.1 格子収束性の調査結果.

付録 C

粘性及び表面張力が

マイクロジェット速度評価に与える影響

本章では、5章にて行ったマイクロジェットの数値解析設定 (w-meniscus setting)を用いて、粘性及 び表面張力が定量的及び定性的な議論にどのような影響を与えるか調査を行う.水及び空気の粘性 係数、表面張力係数、接触角はそれぞれ、 $\tilde{\mu}_l = 1.005 \times 10^{-3}$ [Pa·s]、 $\tilde{\mu}_g = 1.822 \times 10^{-5}$ [Pa·s]、 $\tilde{\sigma} =$ 72.75 × 10⁻³ [N/m]、 $\theta_s = 30$ [deg.]を与える. SG EoS の諸量や初期条件等、その他の設定は 5章と 同様である.

図 C.1 に、単一気泡における、粘性及び表面張力を考慮した際と考慮しない際におけるマイクロ ジェット速度の評価結果を示す.図より、粘性及び表面張力を考慮する場合としない場合でマイク ロジェット速度に差が生じているとこが確認できる.このように、粘性と表面張力の有無は、定量 的な議論に影響を与えるものと考えられる.

図 C.2 に、粘性及び表面張力を考慮した場合における各気泡数におけるマイクロジェット速度の 評価結果を示す.図 C.2 より、気泡数が少ないほどジェット速度が速くなることが確認できるが、 この結果は 5 章の結果 (図 5.4)と同様である.即ち、粘性及び表面張力は定性的議論には影響がない と考えられる.

以上の理由により、本研究では粘性及び表面張力を無視して数値解析を行うものとした.



図 C.1 単一気泡における粘性及び表面張力を考慮した際と考慮しない際におけるマイクロジェ ット速度の評価結果.赤線で粘性及び表面張力を考慮した結果,緑線で粘性及び表面張力を考慮 しない場合の結果を示している.



図 C.2 粘性及び表面張力を考慮した場合における各気泡数におけるマイクロジェット速度の評価結果.気泡が少ないほどマイクロジェットが速くなる結果は,5章で行った粘性及び表面張力を無視した場合の結果と同様の傾向である.

謝辞

本論文は東京農工大学工学府機械システム工学専攻博士後期課程在籍時3年間の研究成果をまと めたものです.初めに,博士過程の3年間手厚いご指導をしていただいた西田浩之准教授に感謝致 します.博士過程から始めた研究でありましたが,3年間で博士論文としてまとめることができま した.また,田川義之教授には,本研究のテーマであるレーザー誘起ジェットやレーザー誘起気泡 に関して日頃から数々の助言をいただいた他,副査として貴重なご意見をいただきました.本研究 を遂行するにあたり数々の助言を頂いたご両名に心から感謝致します.

本論文の副査をお引き受けいただいた, 亀田正治教授, 村田章教授, 岩本薫教授に深く感謝致します. 貴重なご意見を頂き, 本論文の完成度を高めることができました. 心から感謝致します.

輪講やミーティングで様々な意見をくれた,西田研究室の皆様にも感謝致します.また,部屋を 共にし,レーザー誘起ジェットやレーザー誘起気泡に関する様々な質問に答えてくれた田川研究室 の皆様にも感謝致します.

最後に,経済的,精神的に支えてくれた父と妹,そして,忙しい父に代わって私を育ててくれた 天国の母に感謝致します.