

水銀標的の気泡注入性能向上のための 機械学習を用いた最適化

Optimization of Mercury Flow with Microbubbles in the Target-vessel Design
by Means of Machine Learning

粉川 広行 二川 正敏 羽賀 勝洋 都築 峰幸
村井 哲郎

Hiroyuki KOGAWA, Masatoshi FUTAKAWA, Katsuhiko HAGA, Takayuki TSUZUKI
and Tetsuro MURAI

原子力科学研究部門
J-PARC センター
物質・生命科学ディビジョン
Materials and Life Science Division
J-PARC Center
Sector of Nuclear Science Research

November 2022

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Technology

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。本レポートの成果（データを含む）に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の条件で利用してください。(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>)
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト (<https://www.jaea.go.jp>)より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 JAEA イノベーションハブ 研究成果利活用課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>).
Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under the same terms and conditions as CC-BY.
For inquiries regarding this report, please contact Institutional Repository and Utilization Section, JAEA Innovation Hub, Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

水銀標的の気泡注入性能向上のための機械学習を用いた最適化

日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門 J-PARC センター
物質・生命科学ディビジョン

粉川 広行、二川 正敏^{*}、羽賀 勝洋、都築 峰幸^{*}、村井 哲郎^{*}

(2022年8月19日 受理)

大強度陽子加速器施設(J-PARC)の物質・生命科学実験施設では、ステンレス製の水銀標的容器内で流動する水銀にパルス陽子ビームを繰り返し入射し、核破砕反応により生成する中性子を最先端科学実験に供する。パルス陽子ビーム入射に伴い、水銀中には圧力波が発生し、圧力波の伝播と容器変形の相互干渉に起因するキャビテーション損傷、特に陽子ビーム入射部の損傷が標的容器の寿命を支配する。圧力波及び損傷の低減対策として、ヘリウムの微小気泡を水銀中に注入する方法を開発し、圧力波及び損傷の低減を実証した。

所期の 1 MW の大強度陽子ビーム下における水銀標的容器の耐久性を向上させるには損傷をさらに低減する必要がある。微小気泡による圧力波低減効果の向上には、水銀中での直径が 150 μm 以下である気泡の体積含有率を高めることが求められる。気泡生成器から注入した気泡は浮力による上昇や流動過程での合泡などを起こし、水銀内を流動中に気泡の体積含有率は低下する。気泡生成器の設置位置を損傷が激しいビーム入射部に近づければ、ビーム入射部近傍の気泡体積含有率の低下を防ぐことが可能である。しかし、ビーム入射部に近づくほど、気泡生成器の設置空間が狭く流動抵抗が大きくなるため、冷却に十分な水銀流量の確保が困難になることや、水銀流速の低下により生成気泡径が大きくなる等の弊害が生じる。

そこで、標的容器のビーム入射部近傍でより小さな気泡を高い密度で分布できるように、標的容器内部における気泡生成器の形状や設置位置、さらに水銀流動案内羽根の形状に関して機械学習による設計の最適化を試みた。気泡分布を考慮した水銀標的構造の設計では、多数の設計変数を考慮する必要があることから、ラテン超方格法に基づき約 1000 ケースの設計変数について数値解析を実施し、その結果を学習データとしてビーム入射部近傍での気泡分布(サイズや数密度)が最適になる設計を決定した。水銀の流量は標的容器の温度に、気泡生成器の形状は製作性や生成気泡径に影響を及ぼすことから、これらを制約条件とした。その結果、ビーム入射部近傍で半径が 150 μm 以下の気泡の密度を約 20%増大できる解を見出した。

J-PARC センター：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4

※客員研究員

*先端力学シミュレーション研究所

Optimization of Mercury Flow with Microbubbles in the Target-vessel Design by Means of Machine Learning

Hiroyuki KOGAWA, Masatoshi FUTAKAWA[※], Katsuhiko HAGA,
Takayuki TSUZUKI* and Tetsuro MURAI*

Materials and Life Science Division, J-PARC Center
Sector of Nuclear Science Research
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 19, 2022)

In a mercury target of the J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex), pulsed proton beams repeatedly bombard the flowing mercury which is confined in a stainless-steel vessel (target vessel). Cavitation damage caused by the propagation of the pressure waves is a factor of the life of the target vessel. As a measure to reduce damages, we developed a bubbler to inject the gas microbubbles into the flowing mercury, which can reduce the pressure waves.

To operate the mercury target vessel stably with the 1 MW high-intensity proton beams, further reduction of the damage is required. The bubbler setting position should be closer to the beam window to increase the bubble population, which could enhance the reduction effect on the pressure waves and damage. However, the space at the beam window of the target vessel is restricted. The bubbler design and setting position as well as the vane design for the mercury flowing pattern are optimized by means of a machine learning technique to get more suitable bubble distribution, increasing in bubble population and optimizing bubble size nearby the beam window of the target vessel.

The results of CFD analyses performed with 1000 cases were used for machine learning. Since the flow rate of mercury affects the temperature of the target vessel, this was used for the constraint condition. As a result, we found a design of mercury target vessel that can increase the bubble population by ca. 20% higher than the current design.

Keywords: Mercury Target, J-PARC, Cavitation Damage, Pressure Wave, Bubbler, Machine Learning, Constraint Condition

※ Invited Researcher

*Advanced Simulation Technology of Mechanics R&D, Co., Ltd

目次

1. 目的及び概要	1
1.1 記号一覧	4
2. 水銀標的容器構造最適化の流れ.....	5
3. 流動解析による機械学習用入力データの生成.....	6
3.1 事前解析	6
3.1.1 事前解析モデル形状.....	7
3.1.2 メッシュ.....	9
3.1.3 解析条件.....	20
3.1.4 事前解析結果(流動状態).....	33
3.1.5 事前解析結果(気泡挙動).....	57
3.1.6 事前解析考察.....	71
3.1.7 事前解析まとめ.....	74
3.2 機械学習データの生成.....	75
3.2.1 概要.....	75
3.2.2 設計変数について.....	75
3.2.3 設計変数と解析モデル.....	79
3.2.4 速度に応じた気泡径分布.....	87
3.2.5 解析モデル.....	91
3.2.6 解析結果.....	93
4. 機械学習による水銀標的容器の最適化.....	103
4.1 機械学習によるサロゲートモデルの構築.....	103
4.1.1 機械学習データの確認.....	103
4.1.2 設計変数と目的関数、制約条件の相関.....	104
4.1.3 サロゲートモデル構築.....	105
4.2 最適化の実施.....	114
4.2.1 最適化に用いるサロゲートモデル.....	114
4.2.2 制約条件の追加.....	114
4.2.3 最適化実行.....	119
4.2.4 検証解析.....	121
4.3 考察	123
5. まとめ	126
謝辞	127
参考文献	127

Contents

1.	Introduction.....	1
1.1	List of symbols.....	4
2.	Optimization work flow of the target vessel design.....	5
3.	Generation of input data for machine learning by CFD.....	6
3.1	Preliminary analysis.....	6
3.1.1	Configuration of numerical model for preliminary analysis.....	7
3.1.2	Mesh.....	9
3.1.3	Numerical condition.....	20
3.1.4	Results of preliminary analysis(Flow condition of mercury).....	33
3.1.5	Results of preliminary analysis(Condition of bubble motion).....	57
3.1.6	Discussion for preliminary analysis.....	71
3.1.7	Summary of results of preliminary analysis.....	74
3.2	Generation of input data for machine learning.....	75
3.2.1	Overview.....	75
3.2.2	Design variables.....	75
3.2.3	Numerical analyses.....	79
3.2.4	Distribution of bubble radius corresponding to mercury velocity.....	87
3.2.5	Numerical model.....	91
3.2.6	Results of numerical analysis.....	93
4.	Optimization of mercury target by means of machine learning.....	103
4.1	Construction of surrogate model by machine learning.....	103
4.1.1	Verification of data obtained by machine learning.....	103
4.1.2	Correlation among design variable, objective function and constraint condition.....	104
4.1.3	Construction of surrogate model.....	105
4.2	Implementation of optimization.....	114
4.2.1	Surrogate model for optimization of target vessel design.....	114
4.2.2	Addition of constraint condition.....	114
4.2.3	Implementation of optimization.....	119
4.2.4	Numerical analyses for verification of optimized results.....	121
4.3	Discussion.....	123
5.	Conclusion.....	126
	Acknowledgement.....	127
	References.....	127

1. 目的及び概要

J-PARC の物質・生命科学実験施設(MLF)の核破砕中性子源において、陽子ビームを入射して中性子を発生させるステンレス鋼製の水銀標的容器では、陽子ビームの入射によって水銀中に発生する圧力波の伝播に起因するキャビテーション損傷、特に陽子ビーム入射部(以下、ビーム窓と呼ぶ。)の損傷が標的容器の寿命を支配する要因である。目標とする 1 MW の大強度陽子ビームで水銀標的容器を長期間運転するためには、この圧力波による損傷を低減することが不可欠である。

Fig.1-1 に水銀標的容器構造の水平断面鳥瞰図を示す。水銀流入口から流入した水銀は案内羽根で陽子ビーム入射による発熱密度分布に応じて流量を配分し、陽子ビーム入射部を冷却した後に流出口から流出する。

これまでに、圧力波低減対策として、ヘリウムの微小気泡を注入する方法を開発¹⁾し、陽子ビームの入射に伴う水銀標的容器の振動を計測し、気泡注入時に振動速度が 1/3 から 1/4 に低減することを実証した²⁾。微小気泡による圧力波の低減効果は、水銀中での気泡径が小さく、気泡密度が高いほど有効である。流動する水銀中に設置した気泡生成器(以下、バブラーと呼ぶ。)に近いほど、浮力により浮上する気泡数が少ないため、水銀中の気泡密度は高い。現在の水銀容器では、最大圧力波が発生するビーム窓部から約 400mm の距離にバブラーを設置しているが、この位置をビーム窓に近づければ、ビーム窓部の気泡密度を引き上げることも可能である。しかしながら、容器前方ほど、バブラーの設置空間が狭く、流動抵抗が大きくなるため、冷却に十分な水銀流量の確保が困難になることや、水銀流速の低下により生成気泡径が大きくなる等の弊害が懸念される。

そこで、標的容器先端により小さな気泡を高密度で分布できるように、標的容器内部の水銀案内羽根の形状やバブラーの形状の最適化を実施することとした。気泡分布を含めた水銀標的構造の設計では、Table 1-1 に示すように多数の設計変数を考慮する必要があることから、ビーム窓部での気泡分布(気泡の体積率)が最大になるように、Table 1-2 に示す制約条件で機械学習を実施した。

本報告は、気泡を含んだ水銀の流動解析と、その結果を用いた機械学習による水銀標的容器の最適化作業に関するものである。

Table 1-1 最適化を実施する設計変数

最適化箇所	最適化する項目
バブラーB1	位置(P1)
	入口内径(D1)
	絞り部内径(D _{e1})
	旋回羽根角度(θ1)
バブラーB2	入口内径(D2)
	絞り部内径(D _{e2})
	旋回羽根角度(θ2)
案内羽根	案内羽根角度(Θ)
圧損要素	抵抗係数(Cd)

Table 1-2 目的関数と制約条件

	機械学習データ	下限	上限
目的関数	ビーム窓部の気泡率		
制約条件	生成最頻気泡半径		100 [μm]
	総水銀流量	35 [m ³ /h]	
	バブラー部水銀流量	(B1) 13 [m ³ /h] (B2) 7 [m ³ /h]	
	狭隘流路部流速	3 [m/s]	
	水銀流量	B1>B2	
	スワール比	2.0	

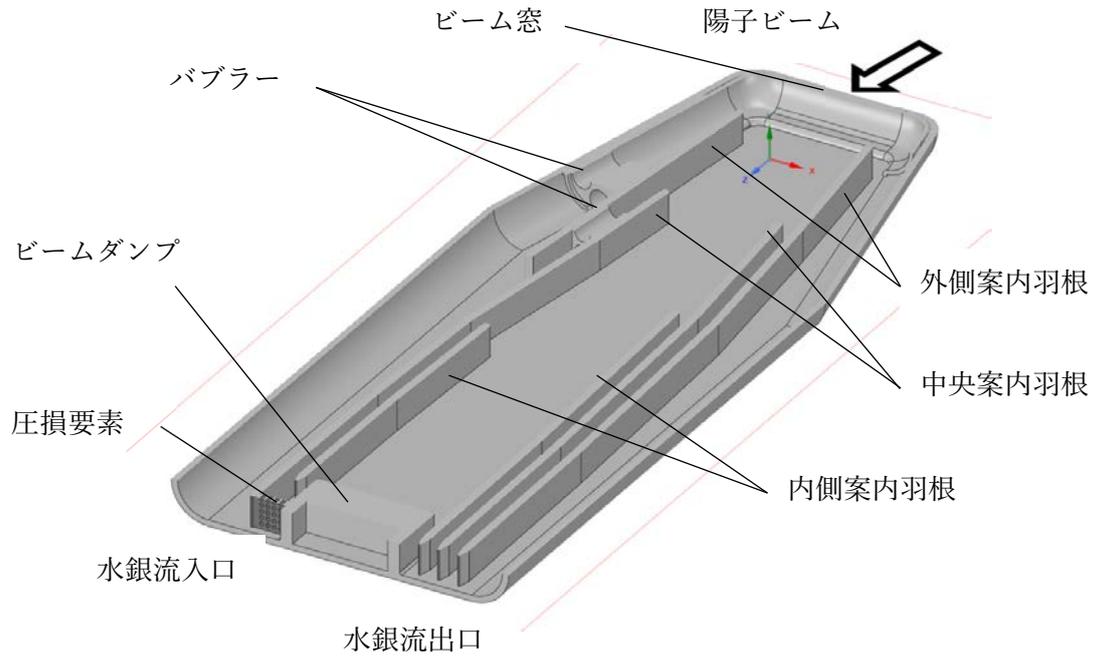


Fig.1-1 水銀標的容器水平断面鳥瞰図

1.1 記号一覧

本作業報告書で用いている記号とその意味の一覧を Table 1-3 に示す。

Table 1-3 記号一覧

記号	意味
P1	バブラーB1 の位置
Θ	水銀案内羽根角度
D_i	バブラー <i>i</i> の入口内径
D_{ei}	バブラー <i>i</i> の絞り部内径
θ_i	バブラー <i>i</i> の旋回羽根角度
D_{pi}	バブラー <i>i</i> の生成最頻気泡直径
Cd	圧力損失係数
h	バブラーのファンハブ直径
$V_{\phi i}$	バブラー <i>i</i> のバブラー内(径が D の部分)の最外周の周方向速度
V_{Li}	バブラー <i>i</i> 内の軸方向平均速度
σ	水銀の表面張力(0.47 [N/m])
ρ	水銀の密度

2. 水銀標的容器構造最適化の流れ

水銀標的容器構造の最適化は、Table 1-1 で示した設計変数に対し、Table 1-2 で示した制約条件下で、目的関数の最大化を実施する。そのために、設計変数を変更した多数の流動解析(機械学習データの生成)を実施し、その結果を基にサロゲートモデルを作成し、サロゲートモデルを用いて最適化を行う。手順を以下に示す。

1. 機械学習データの生成前に、設計変数に含めていないバブラーB2 の位置とバブラー B1, B2 の旋回方向を変えた場合に、ビーム窓部の気泡率がどの程度変化するかを評価する。その結果より、機械学習データの生成に用いるモデルのベースを決定する(事前解析)。その詳細を 3.1 節で述べる。
2. 機械学習データの生成を実施し、サロゲートモデルの基となる解析結果を得る(本解析)。本解析の詳細を 3.2 節で述べる。
3. 3.2 節で作成した機械学習用データを分析し、サロゲートモデルを構築する。その詳細を 4.1 節で述べる。
4. サロゲートモデルを用いた最適化を 4.2 節で述べる。

3. 流動解析による機械学習用入力データの生成

機械学習を実施するための入力データを水銀標的容器内部の気泡を含んだ水銀の流動解析によって生成する。本件の流動解析について以下に示す。

3.1 事前解析

機械学習による最適化における学習データ作成解析の数を低減するために、バブラーの回転方向及びバブラーB2 の位置によって気泡分布がどのように変わるか事前に評価し、この結果よりバブラー回転方向及びバブラーB2 の位置を決定した。

事前解析では、これまで評価を行ってきた標的形状(ベースモデル)を基に、バブラーの境界条件及び評価領域を変更したモデルを作成した。ベースモデルの形状を Fig. 3-1～6 に示す。ここでは、固体領域の形状のみを示している。また、ベースモデルの各パラメータの値を Table 3-1 に示す。事前解析では、Fig. 3-7 に示すように、ベースモデルからバブラーB1 の回転方向を変更したモデル(Case0-1)、Case0-1 からバブラーB2 を移動させたモデル(Case0-2)を作成して評価を行った。この3 ケースの比較により、回転方向とバブラーB2 位置を決定した。

Table 3-1 ベースモデルの各変数の値

項目名		値 ベースモデル
水銀容器案内羽根角度, Θ [°]		6
圧損要素抵抗係数		25.0
バブラーB1	位置, P1 [mm]	108.4
	入口内径, D1 [mm]	27.5
	絞り部内径, D_{e1} [mm]	26.4
	回転羽根角度, θ_1 [°]	62.0
	バブラー要素の数	3
	圧力損失係数, Cd1	5.64
	スワール比	2.14
バブラーB2	入口内径, D2 [mm]	21.0
	絞り部内径, D_{e2} [mm]	20.0
	回転羽根角度, θ_2 [°]	63.0
	バブラー要素の数	3
	圧力損失係数, Cd2	7.22
	スワール比	2.23

3.1.1 事前解析モデル形状

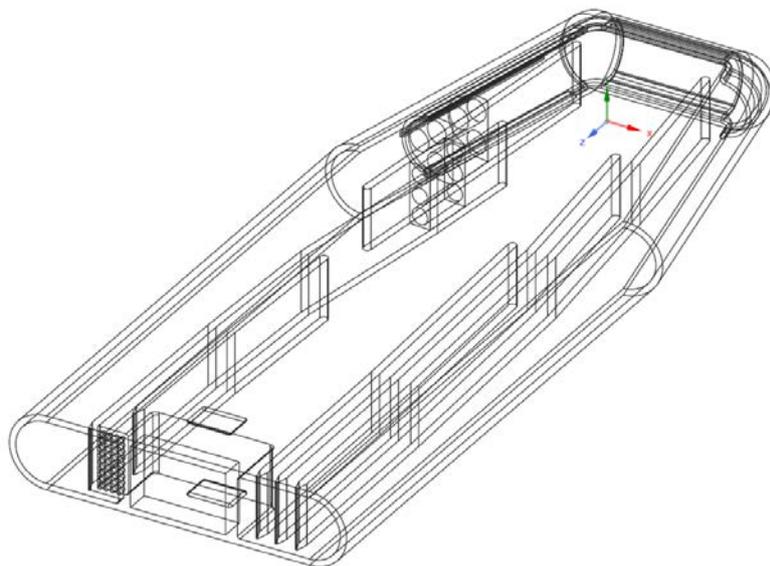


Fig. 3-1 水銀容器の形状 鳥瞰図 ワイヤーフレーム表示

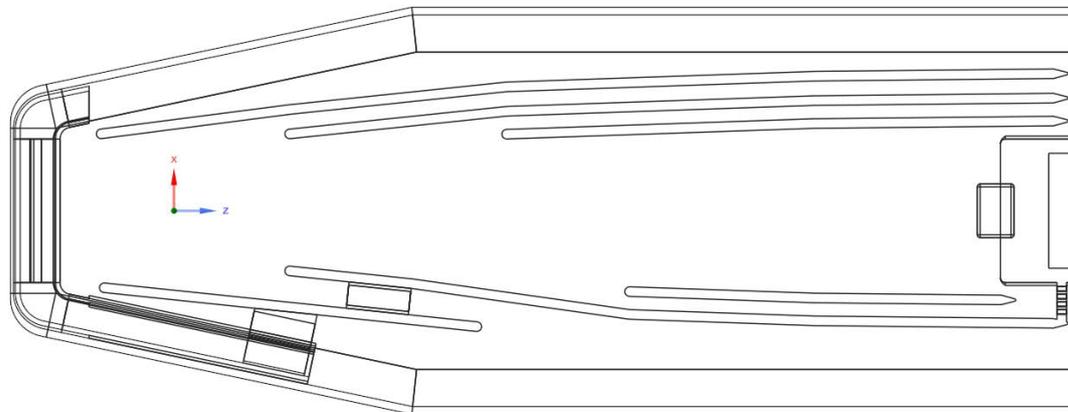


Fig. 3-2 水銀容器の形状 上面図 ワイヤーフレーム表示

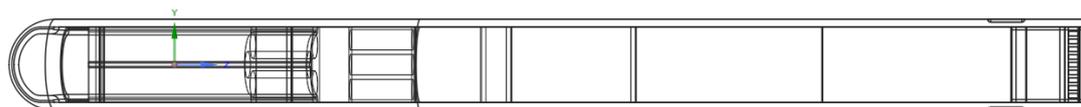


Fig. 3-3 水銀容器の形状 側面図 ワイヤーフレーム表示

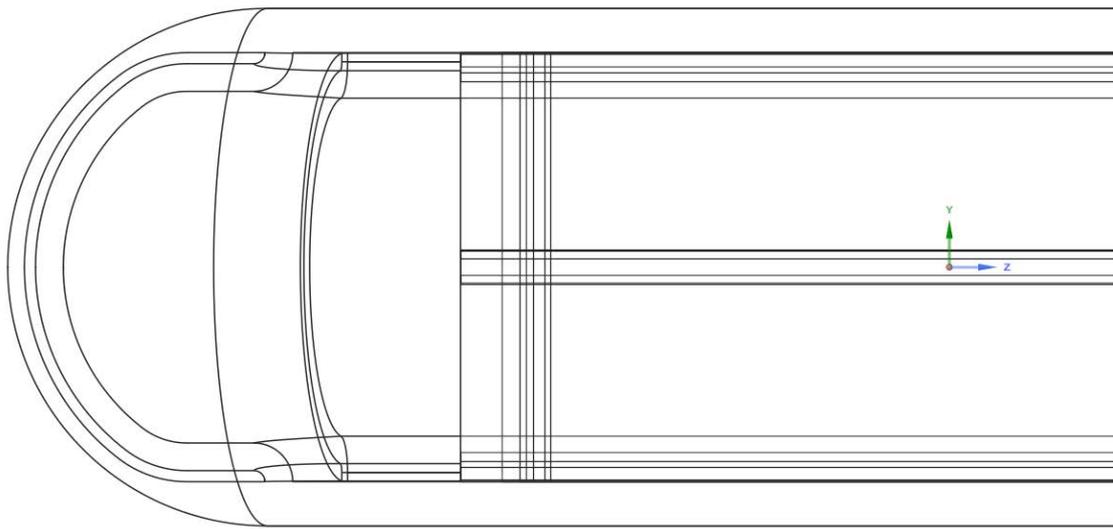


Fig. 3-4 水銀容器の形状 先端注視 ワイヤーフレーム表示

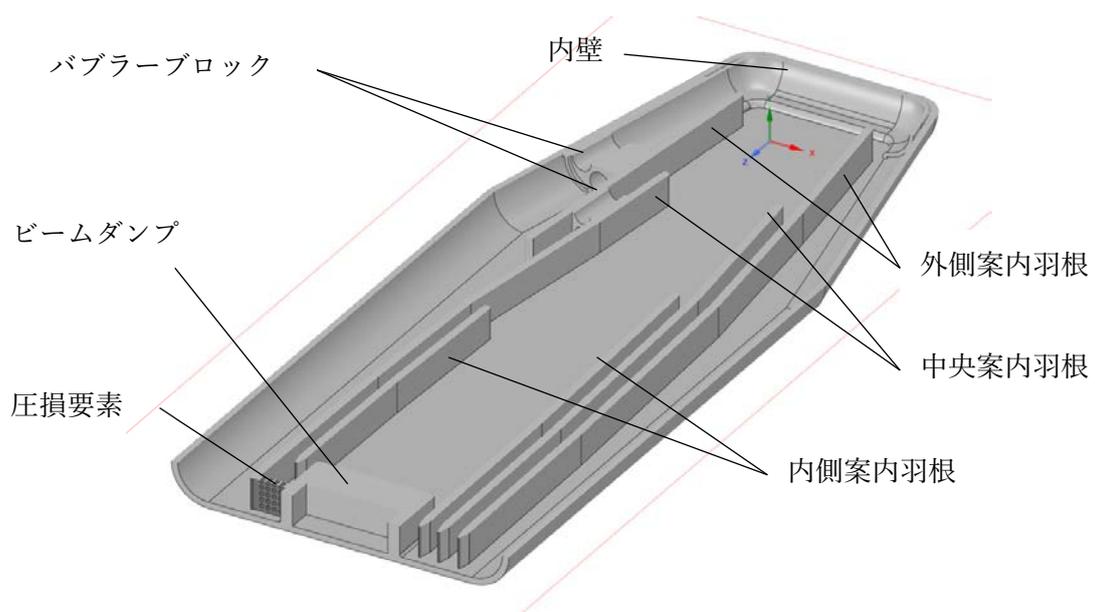


Fig. 3-5 水銀容器の構成要素の名称

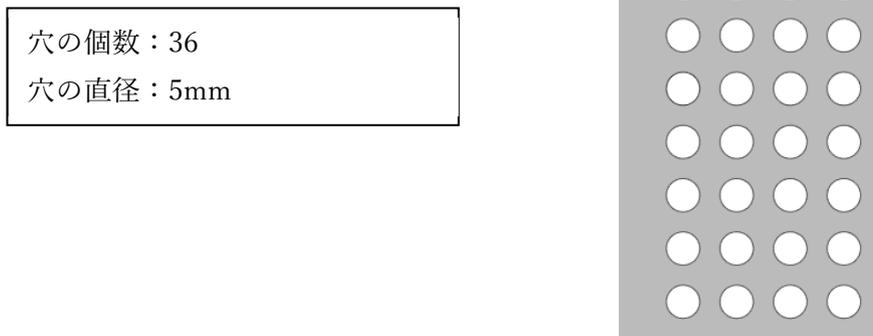


Fig. 3-6 圧損要素

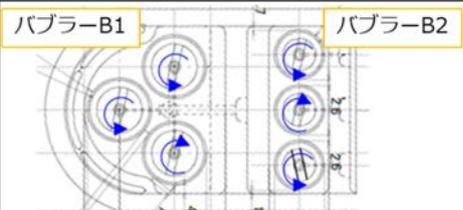
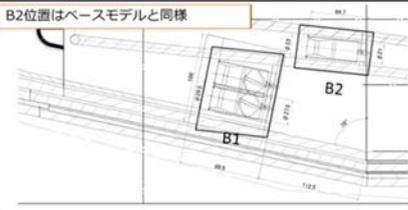
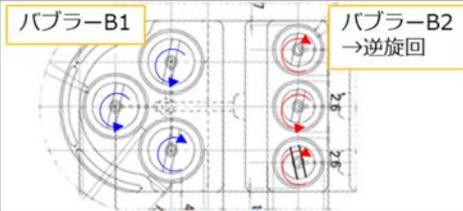
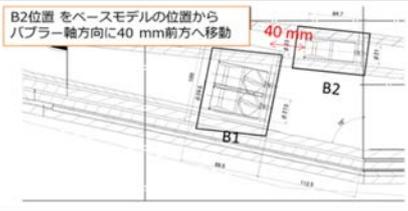
モデル名	(水銀流れ上流から見た)バブラー回転方向の指定	バブラーB2位置の指定
ベースモデル		
Case0-1		<p>ベースモデルと同様</p>
Case0-2	<p>Case0-1と同様</p>	

Fig. 3-7 事前解析の変更点

3.1.2 メッシュ

解析に用いたメッシュのセル形状は多面体とし、水銀流路のメッシュでは流れが発達した状態で水銀容器に水銀が流入し、同様に流れが発達した状態で計算領域外へ水銀が流出する様に後方流路を水銀容器内の水銀流路のメッシュに接続した。また、水銀流路内は壁面

境界に沿って境界層メッシュを3層挿入した。この境界層メッシュは3層で、1～10 mm 程度である。流入境界面と流出境界面については「3.1.3 解析条件」の「流入出境界」を参照のこと。

ベースモデル及び Case0-1 は形状変更がないため、同一のメッシュを用いて解析を実施した。そのメッシュを Fig.3.8～Fig. 3-16 に、セル数、面数、節点数を Fig. 3-8 に示す。また、Case0-2 の解析に用いたメッシュを Fig. 3-17～Fig. 3-25 に、セル数、面数、節点数を Fig. 3-17 に示す。本解析では、ビーム窓部での気泡率を取得する。特定の領域で気泡率の統計量を取得出来る様に予め評価領域のメッシュを作成した。気泡評価領域は厚み方向に4層のメッシュが入るように作成した。気泡評価領域の詳細は Fig. 3-11 及び Fig. 3-20 に示す。

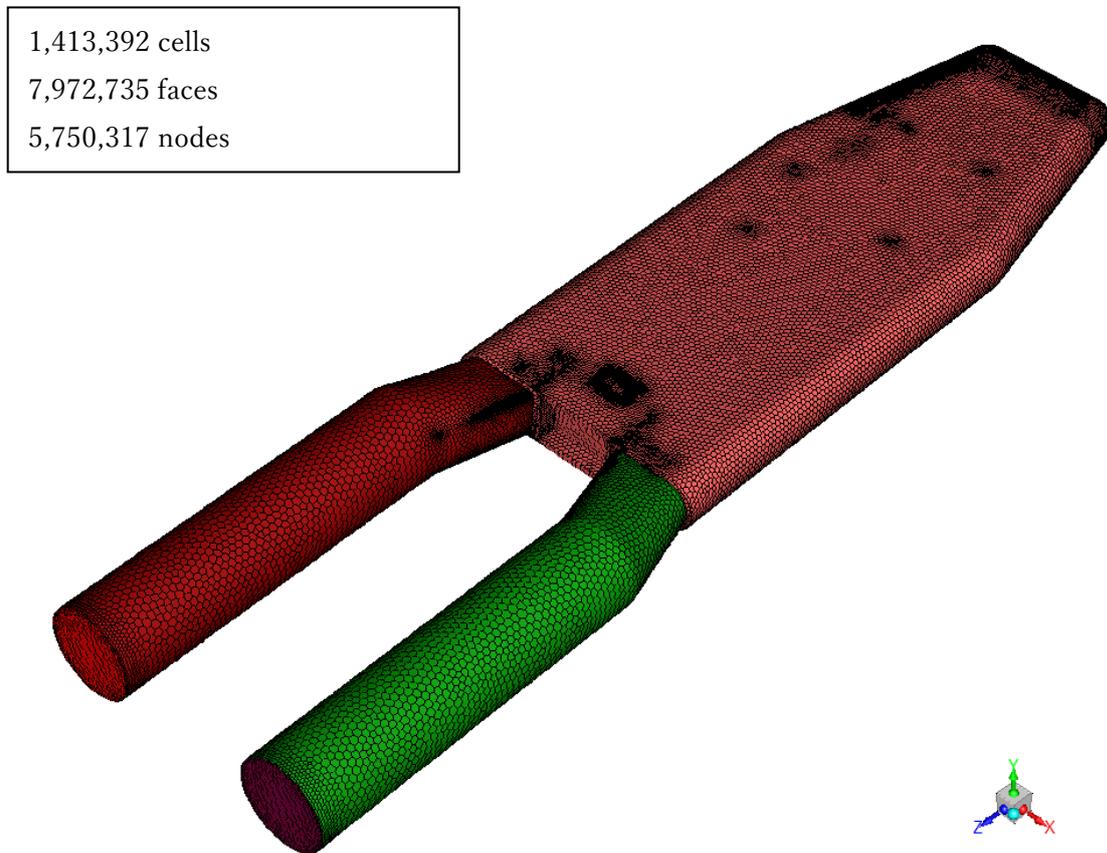


Fig. 3-8 メッシュ全体図(ベースモデル、Case0-1)

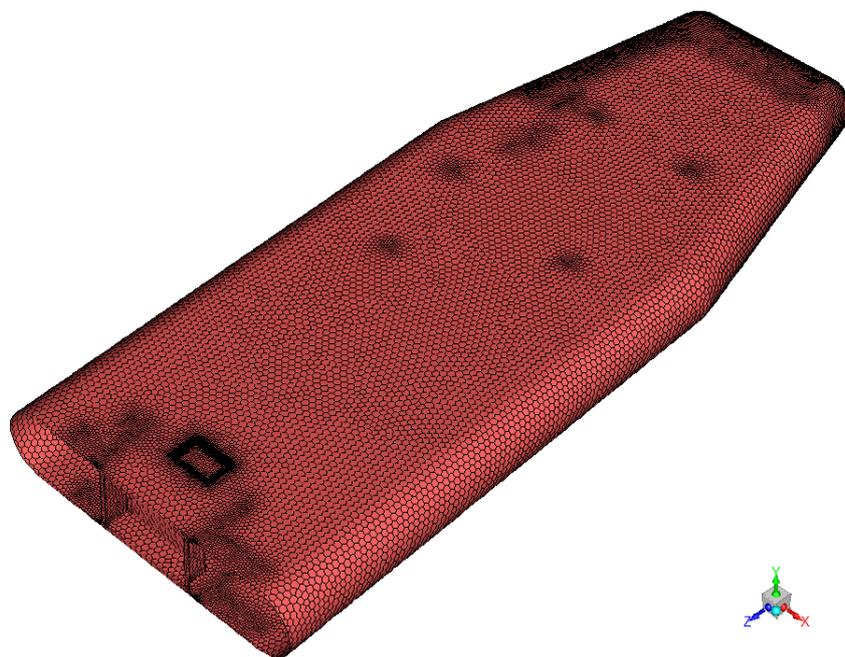


Fig. 3-9 水銀容器のメッシュ(ベースモデル、Case0-1)

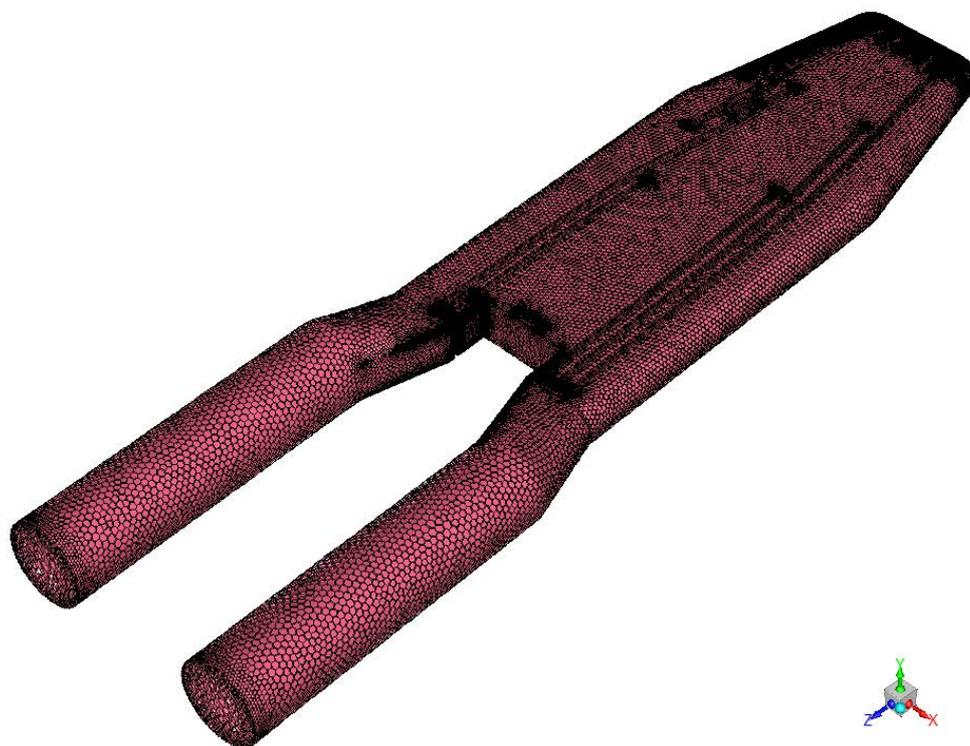


Fig. 3-10 水銀流路のメッシュ(ベースモデル、Case0-1)

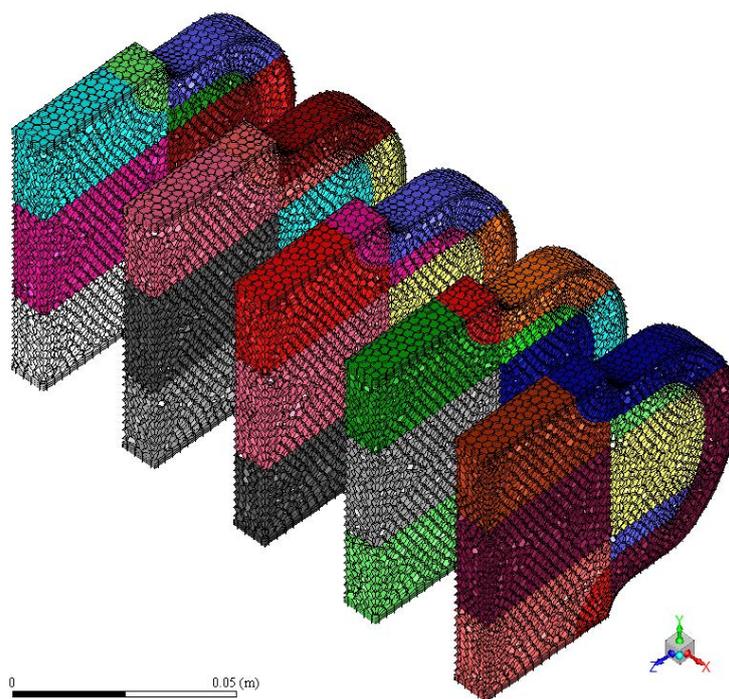


Fig. 3-11 気泡率評価領域のメッシュ(ベースモデル、Case0-1)

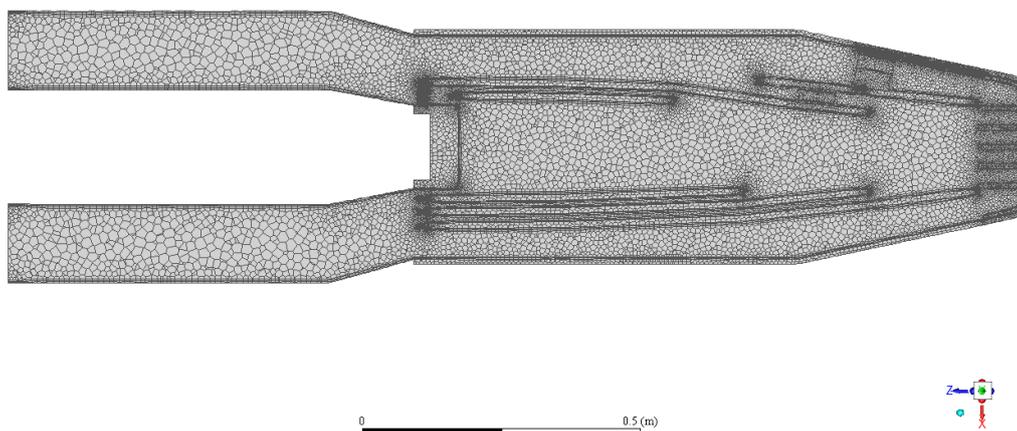


Fig. 3-12 メッシュ ZX 断面 (Y=0 [mm])
全体表示(ベースモデル、Case0-1)

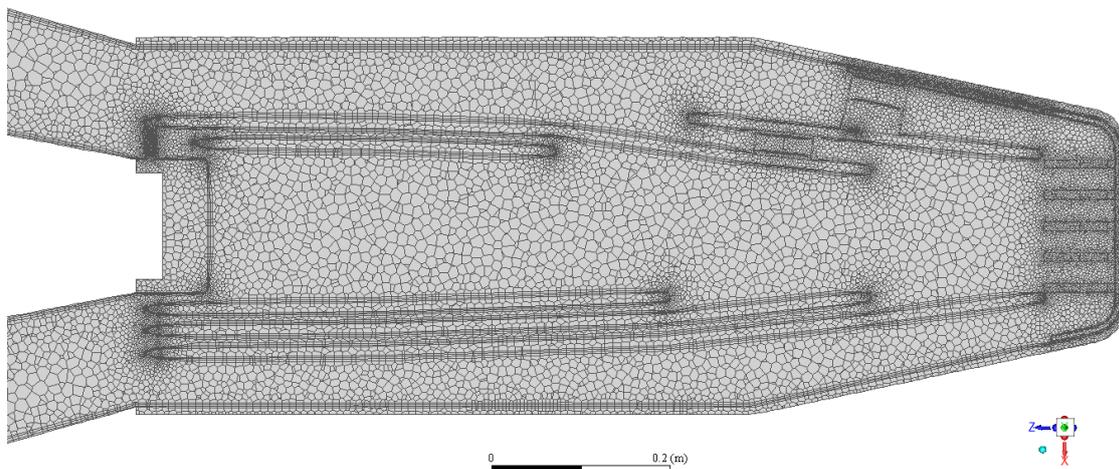


Fig. 3-13 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 (Y=0 [mm])
水銀容器内表示(ベースモデル、Case0-1)

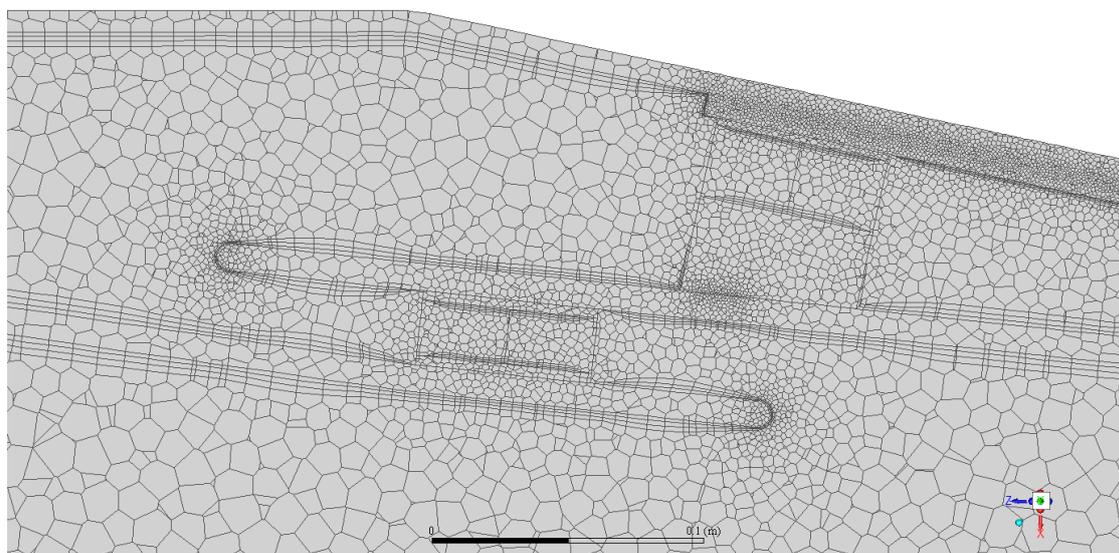


Fig. 3-14 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 (Y=0 [mm])
バブラー・狭隘流路部注視(ベースモデル、Case0-1)

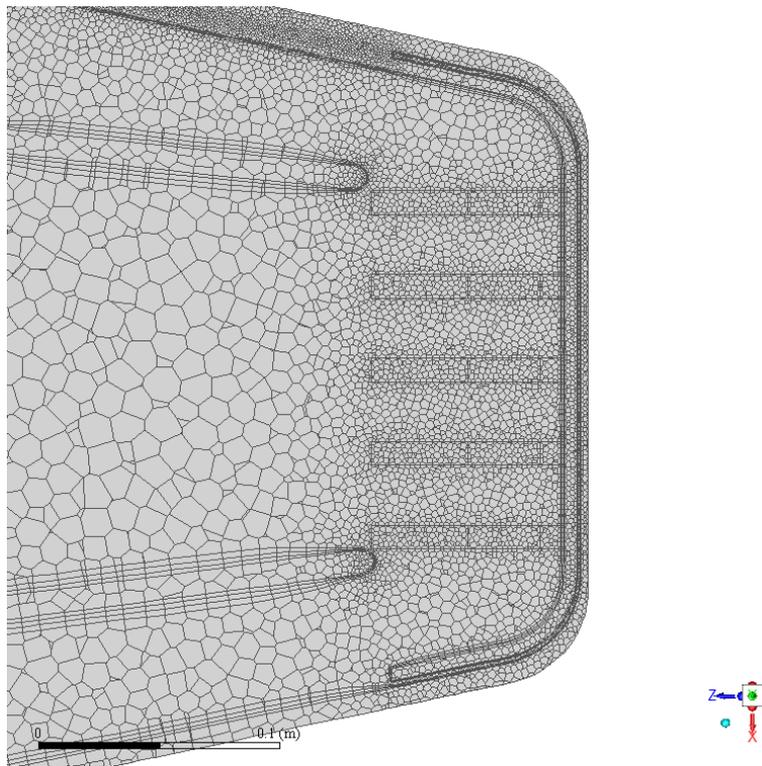


Fig. 3-15 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 ($Y=0$ [mm])
気泡評価領域($X=0$ [mm])部注視(ベースモデル、Case0-1)

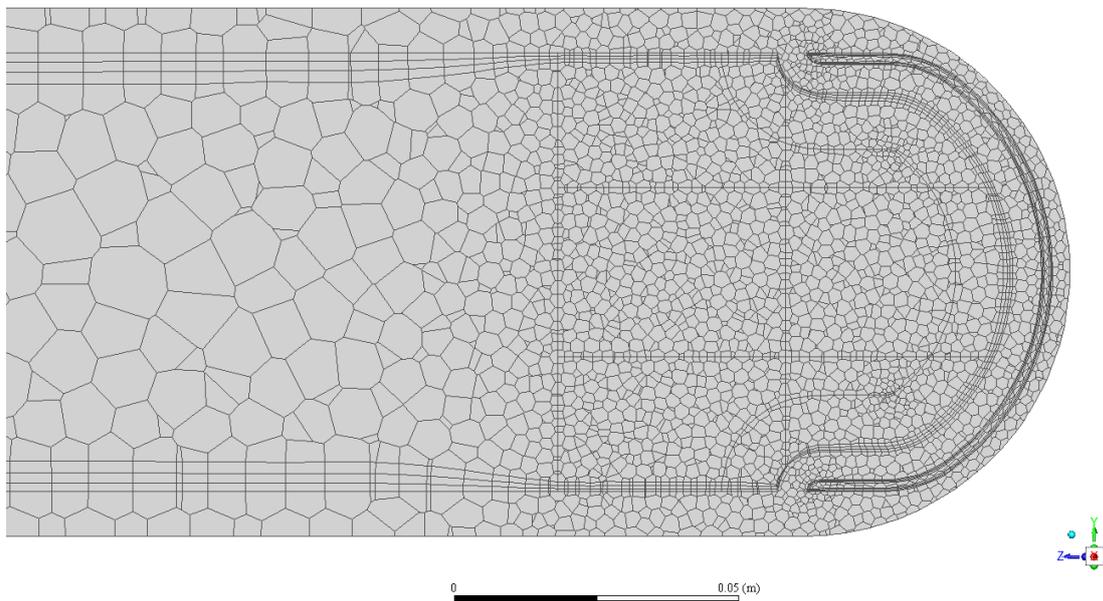


Fig. 3-16 メッシュ水銀容器内 YZ 断面 ($X=0$ [mm])
気泡評価領域($X=0$ [mm])部注視(ベースモデル、Case0-1)

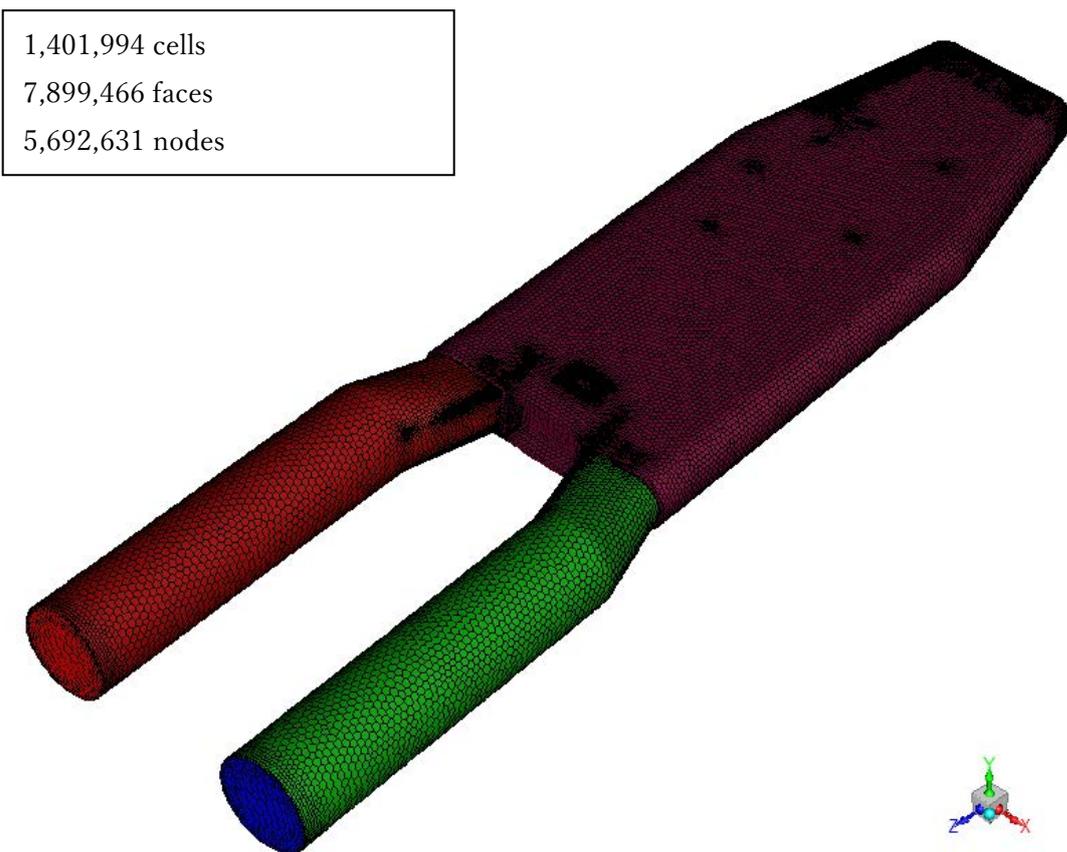


Fig. 3-17 メッシュ全体図(Case0-2)



Fig. 3-18 水銀容器のメッシュ(Case0-2)

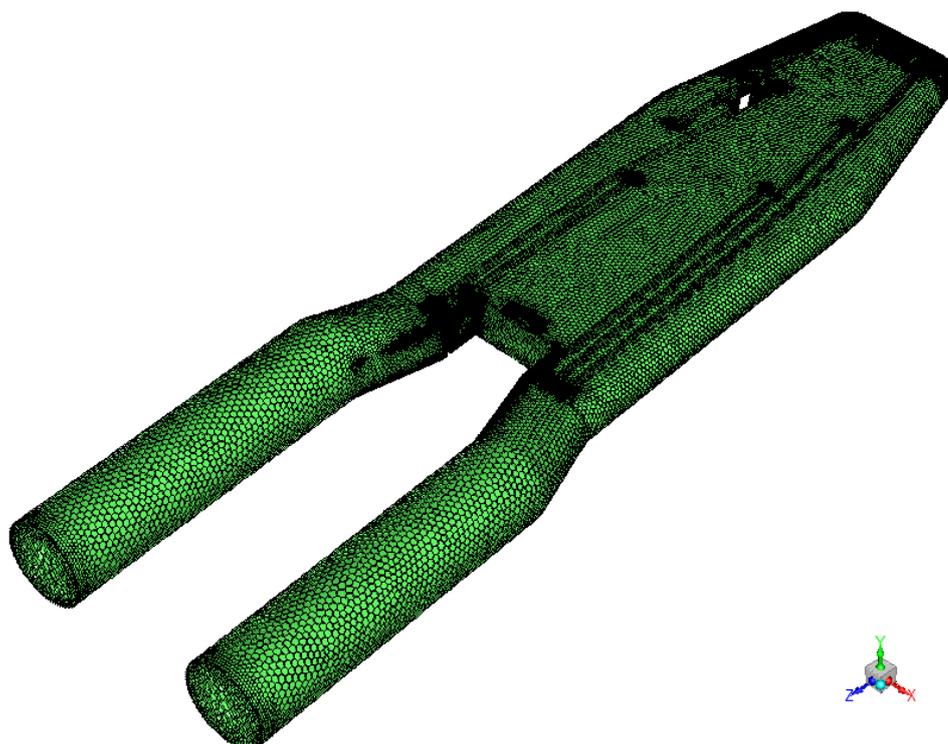


Fig. 3-19 水銀流路のメッシュ(Case0-2)



Fig. 3-20 気泡率評価領域のメッシュ(Case0-2)

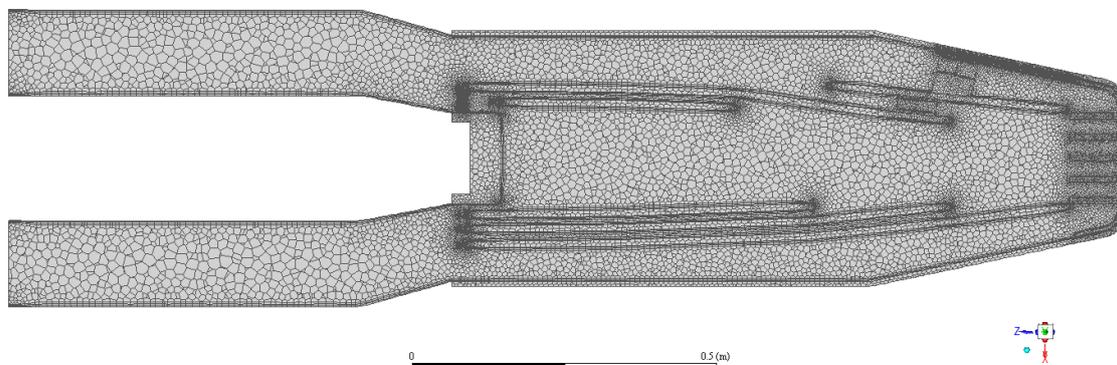


Fig. 3-21 メッシュ ZX 断面 (Y=0 [mm])
全体表示(Case0-2)

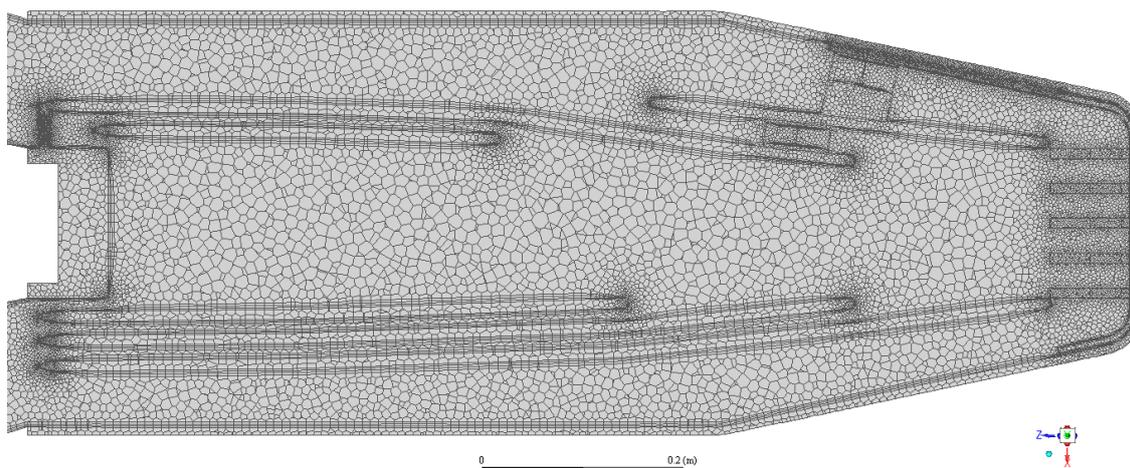


Fig. 3-22 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 (Y=0 [mm])
水銀容器内表示(Case0-2)

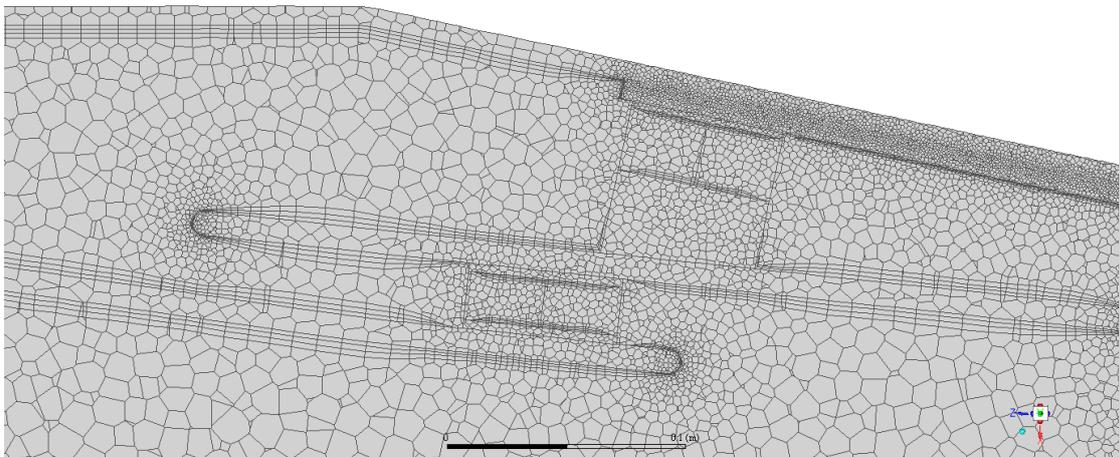


Fig. 3-23 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 (Y=0 [mm])
バブラー・狭隘流路部注視(Case0-2)

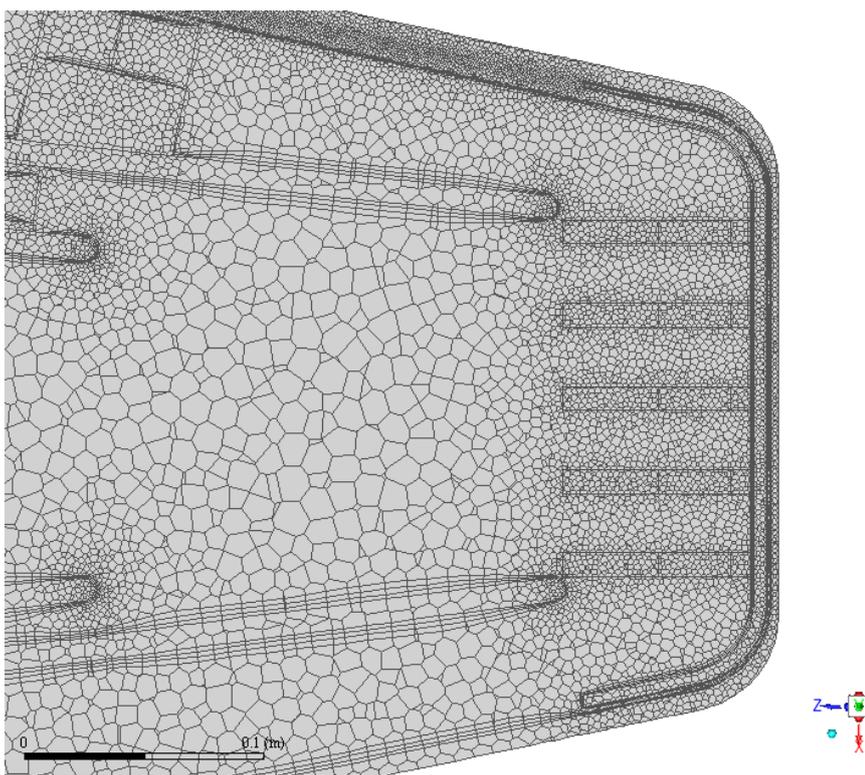


Fig. 3-24 メッシュ水銀容器内 ZX 断面 (Y=0 [mm])
気泡評価領域(X=0 [mm])部注視(Case0-2)

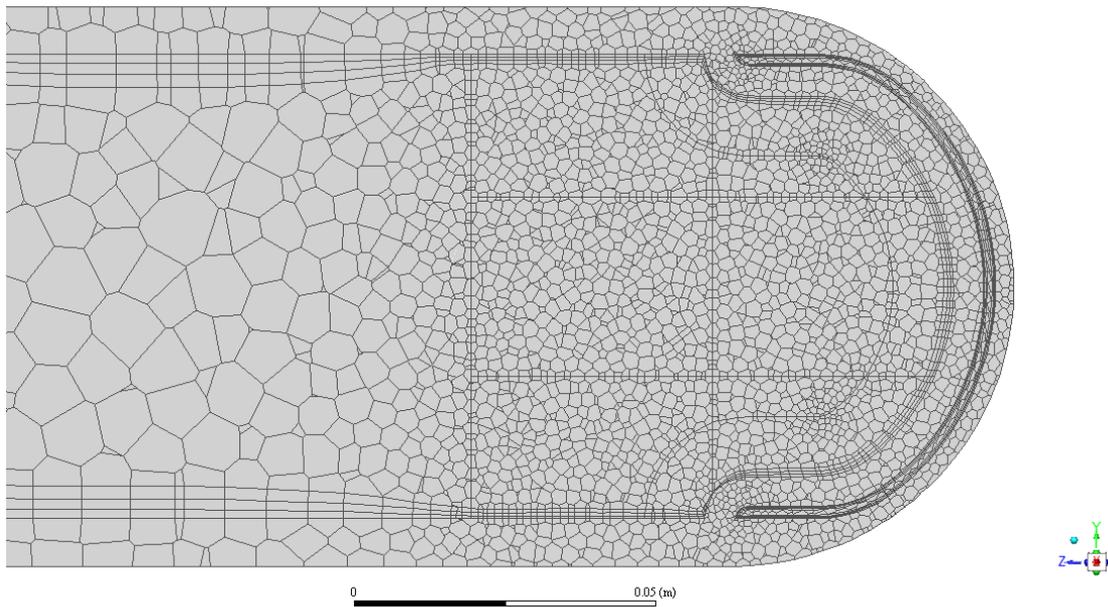


Fig. 3-25 メッシュ水銀容器内 YZ 断面 (X=0 [mm])
気泡評価領域(X=0 [mm])部注視(Case0-2)

3.1.3 解析条件

事前解析の解析条件について示す。

・計算条件概要

計算条件概要を Table 3-2 に示す。

Table 3-2 計算条件概要

計算コード	Fluent ver. 19.2
定常/非定常	定常
乱流モデル	Realizable k-ε
圧力/速度カップリング	SIMPLE
空間離散化スキーム	勾配：Least Square Cell Based
	圧力：Standard
	運動量：1次風上
	乱流量：1次風上

・流入境界

水銀の流入出口は Fig. 3-26 で示す様に体積流量 38 [m³/h]を流入面から流入する様にした。また、流入温度は 50 [°C]とし、流出面は圧力値を 0 [Pa] で固定した。



Fig. 3-26 流入境界の境界条件

・バブラーのモデル化

水銀容器内のバブラー領域は形状が複雑なため、メッシュ品質の悪化が予想された。このため、本解析においては境界条件を用いて流動抵抗(圧力損失)と旋回流をモデル化した。すなわち、バブラー中央に流動抵抗と旋回条件を同時に設定可能な境界条件の一つ「Fan BC」(BCはboundary conditionを表す)を使用することで、水銀に旋回流を生成すると共に、流動抵抗を設定した。バブラー出口は気泡を注入する面として指定している(Fig.3-27)。気泡注入に関する条件は「気泡条件」に記載する。

バブラーの配置及び回転方向を Fig. 3-27 に示し、バブラー条件を Table 3-3 に示す。

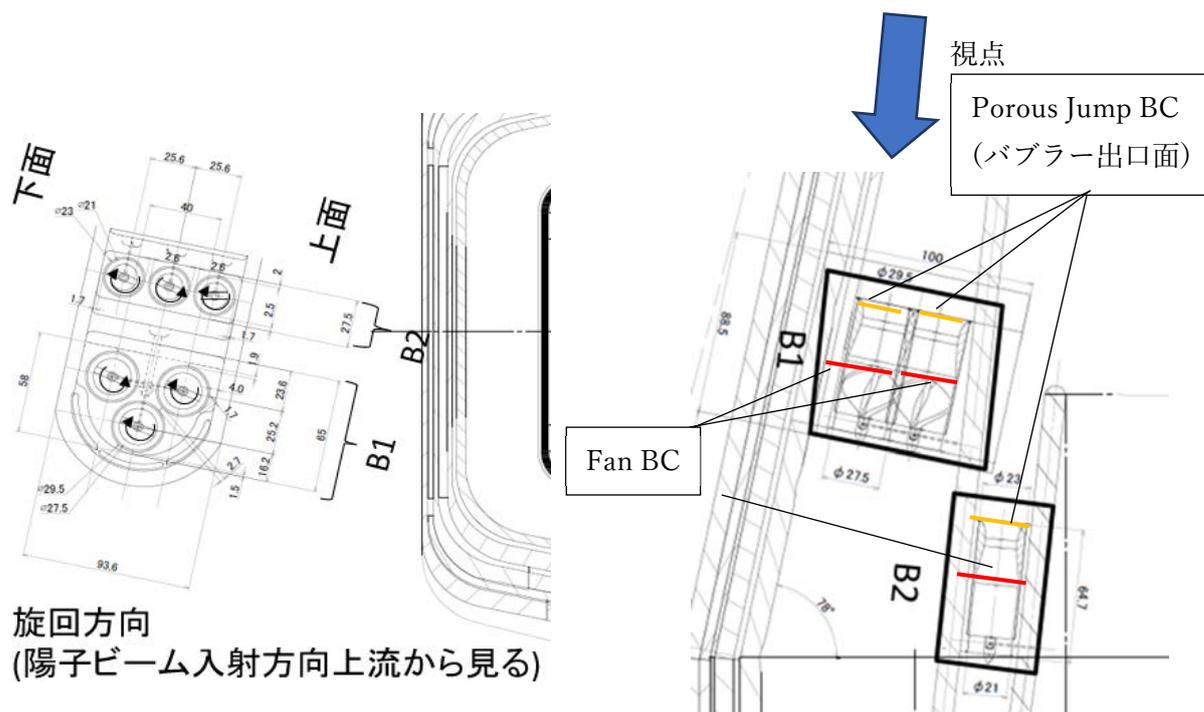


Fig. 3-27 バブラー配置及び回転方向

Table 3-3 バブラー条件

	バブラー群 1	バブラー群 2
バブラー個数	3	3
入口直径[mm]	27.5	21.0
圧損係数	5.64	7.22
スワール比(旋回速度/直交速度)	2.14	2.23
旋回方向	Fig. 3-27 に記載	

・気泡条件

気泡はバブラーから注入された He を模した気泡であり、温度依存せず、50°Cでの物性値を用いている。

この気泡は分散相モデル(discrete phase model, DPM)を用いてモデル化しており、気泡と気泡の相互作用は考慮しておらず、気泡の離合集散は生じないモデル化をしている。

今回用いた、Fluent ver. 19.2 での DPM を用いてモデル化された粒子(DPM 粒子)が従う方程式を Eq. 1 に示す。Eq. 1 中の m_p は DPM 粒子の質量、 \vec{u} は流体の速度、 \vec{u}_p は DPM 粒子の速度、 ρ は流体の密度、 ρ_p は DPM 粒子の密度を表している。右辺第 1 項は牽引力を表し、 τ_r は緩和時間である。 τ_r は Eq. 2 で表される。Eq. 2 に含まれる C_d は抗力係数であり、Eq. 3 で表される。また、 Re は相対レイノルズ数であり、Eq. 4 で表される。右辺第 2 項は浮力を表す項である。右辺第 3 項は他の力を表し、ここには Eq. 5 で表される仮想質量力及び Eq. 6 で表される圧力勾配による力が含まれている。仮想質量力は粒子周辺の流体が加速する力を表している。Eq. 5 に含まれる C_{vm} は virtual mass factor といわれるもので、事前解析並びに本解析で 0.5 を用いている(Table 3-5)。

DPM 粒子は Eq. 1 に従って軌跡をもとめている。初期の気泡位置から、時間刻みごとに移動する場所をもとめて、その位置での流体の速度と力を基に、1 ステップずつ軌跡を計算している。なお、時間刻みとしては、気泡が存在するセルを横断するのにかかる時間の 1/5 の大きさを用いている。

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = m_p \frac{\vec{u} - \vec{u}_p}{\tau_r} + m_p \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad \text{Eq. 1}$$

$$\tau_r = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \frac{24}{C_d Re} \quad \text{Eq. 2}$$

$$C_d = 9.456 \times Re^{-0.61433} \quad \text{Eq. 3}$$

$$Re \equiv \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu} \quad \text{Eq. 4}$$

$$\vec{F} = C_{vm} m_p \frac{\rho}{\rho_p} \left(\vec{u}_p \nabla \vec{u} - \frac{d\vec{u}_p}{dt} \right) \quad \text{Eq. 5}$$

$$\vec{F} = m_p \frac{\rho}{\rho_p} \vec{u}_p \nabla \vec{u} \quad \text{Eq. 6}$$

バブラー出口に注入する気泡の条件を Table 3-4 に示す。また、気泡半径と 1 秒間に注入する気泡数の関係を示したグラフを Fig. 3-28 に示す。なお、この分布は水を用いた実験を基に決定している。気泡は各バブラー出口の面積比に従って分配される。

事前解析及び本解析に用いた、気泡挙動に関わる物理モデルの詳細を Table 3-5 に示す。気泡の流れを支配する各場所で水銀に関する速度を Eq. 7、Eq. 8 に示される乱流モデルに従った平均速度からの変動成分を確率論的に与えることで、気泡を動かす効果を確率論的に扱うモデルとなっている。Eq. 7 中の \bar{u} は平均速度を、 u' は Eq. 8 で表される速度の変動成分を表している。Eq. 8 中の ζ は 0 を中心とした正規分布に従う乱数を、 k は乱流の運動エネルギーである。各気泡は、1 つの面から複数回(number of tries)にわけて発生させており、毎回流体が気泡に与える速度を変化させている。

$$u = \bar{u} + u' \quad \text{Eq. 7}$$

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2} = \sqrt{\frac{2k}{3}} \quad \text{Eq. 8}$$

気泡は、Fig. 3-27 のバブラー出口面に属する各要素の面の中心で発生させている。なお、本解析では重力を考慮しており、各気泡は浮力を受けている。また、壁面に衝突した気泡は消滅するように設定した。この気泡条件の詳細は参考文献³⁾の 16.2.1～16.2.3 節から引用した。

Table 3-4 気泡注入条件

気泡半径	1秒間に注入されるガス体積	気泡の体積	1秒間に注入する気泡数
R	dV_R/dt	Vb	dN_R/dt
μm	m^3/s	m^3	N/s
10	0	4.18879E-15	0.000E+00
20	1.06E-09	3.35103E-14	3.169E+04
30	9.54E-09	1.13097E-13	8.436E+04
40	3.67E-08	2.68083E-13	1.370E+05
50	9.62E-08	5.23599E-13	1.836E+05
60	2.08E-07	9.04779E-13	2.302E+05
70	4.21E-07	1.43676E-12	2.932E+05
80	7.64E-07	2.14466E-12	3.561E+05
90	1.02E-06	3.05363E-12	3.346E+05
100	1.31E-06	4.18879E-12	3.132E+05
110	1.91E-06	5.57528E-12	3.421E+05
120	2.69E-06	7.23823E-12	3.710E+05
130	3.14E-06	9.20277E-12	3.412E+05
140	3.58E-06	1.1494E-11	3.113E+05
150	3.45E-06	1.41372E-11	2.438E+05

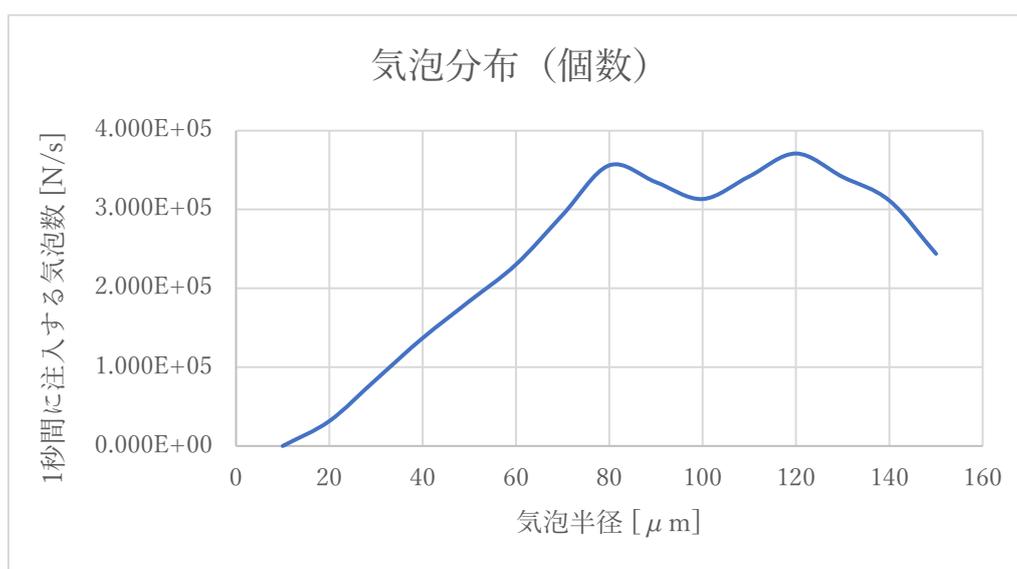


Fig. 3-28 入力した気泡径分布

Table 3-5 気泡挙動解析に用いた分散相モデル詳細

気泡物性	密度 [kg/m ³]	0.162
	比熱 [J/kg/K]	5.193
物理モデル	Virtual mass force	virtual mass factor = 0.5
	Pressure gradient force	ON
乱流拡散	Discrete random walk model	Number of tries = 3
抗力係数		$9.456 Re^{-0.61433}$
初速		静止

・収束条件

本件では、定常計算を行っているが、各 iteration で残差が Table 3-6 に示す値以下になった場合に収束と判定し、解析を終えた。

Table 3-6 収束判定条件

項目	値
連続性	1.0×10^{-3}
x,y,z 方向速度	1.0×10^{-3}
エネルギー	1.0×10^{-6}
K	1.0×10^{-3}
ε	1.0×10^{-3}

・発熱密度分布

事前解析では、標的容器の温度が設計温度を超えない水銀流量を本解析での制約条件とするために熱流動解析を実施した。

水銀及び水銀標的容器の発熱密度分布は、モンテカルロシミュレーションにより求め、その回帰関数を求め、作成した解析モデルの計算領域に対し、発熱密度分布を定義した。各領域に適用した発熱密度関数をまとめたものを Table 3-7 に示す。

Table 3-7 各領域の発熱密度関数

	領域	発熱密度関数
固体領域	バブラーブロック	Eq.10
	その他	Eq.9
流体領域	水銀	Eq.11

以下に、発熱密度の定義の詳細を固体領域と流体領域に分けて示す。

<固体領域>

水銀容器対し発熱密度($H[\text{W}/\text{cm}^3]$)は Eq.9 に従い、その数式内の各係数は Table 3-8 に基づく。また、バブラーブロックの発熱密度($q[\text{W}/\text{cm}^3]$)は別途の関数として Eq.10 に従い、その数式内の各係数は Table 3-9 に基づく。また、発熱密度の値が $0.1[\text{W}/\text{cm}^3]$ を下回る場合は $0.1[\text{W}/\text{cm}^3]$ を適用する。

$$H(x, y, z) = H_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y+y_0)^2}{\sigma_y^2}\right)\right) + H_{00} \quad \text{Eq. 9}$$

ここで、

$$H_0 = M_0 + M_1z + M_2z^2 + M_3z^3 + M_4z^4 + M_5z^5 + M_6z^6 + M_7z^7 + M_8z^8 + M_9z^9$$

$$H_{00} = M_0 + M_1z + M_2z^2$$

$$\sigma_x = M_0 + M_1z + M_2z^2$$

$$y_0 = M_0 + M_1z + M_2z^2 + M_3z^3 + M_4z^4$$

$$\sigma_y = M_0 + M_1z + M_2z^2 + M_3z^3 + M_4z^4$$

$$q(x, y, z) = g(x, y) \times f(z) \quad \text{Eq. 10}$$

ここで、

$$g(x, y) = A_0 \exp\left(-\left|\frac{x}{A_1\phi(z)}\right|^{A_2} - \left|\frac{y}{A_3\phi(z)}\right|^{A_4}\right)$$

$$\phi(z) = 1 + 0.01 \times (z + 11.8)$$

$$f(z) = B_0\{1 - B_1 \exp[-B_2(z + B_3)]\} \exp[-B_4(z + B_5)]$$

Table 3-8 Eq.9 に含まれる係数

	H_0	H_{00}	σ_x	y_0	σ_y
M_0	1.1757E+02	1.6590E-02	4.1918E+00	-4.3397E-03	2.4404E+00
M_1	-7.0036E+00	1.0357E-04	2.7767E-02	1.7529E-03	3.0352E-03
M_2	1.9654E-01	-4.7736E-05	7.5872E-04	-7.9935E-05	-7.2046E-05
M_3	-3.5630E-03	-	-	-8.1510E-06	1.1948E-05
M_4	-3.1636E-04	-	-	1.7019E-07	3.0363E-07
M_5	3.7456E-05	-	-	-	-
M_6	-1.5420E-06	-	-	-	-
M_7	3.0251E-08	-	-	-	-
M_8	-2.7839E-10	-	-	-	-
M_9	9.1962E-13	-	-	-	-

Table 3-9 Eq.10 に含まれる係数

係数	値	係数	値
A_0	209.8	B_0	2.024
A_1	5.3863	B_1	1.832383
A_2	2.355	B_2	0.308431
A_3	2.5403	B_3	21.13747
A_4	2.3365	B_4	0.061754
		B_5	21.863556

<流体領域>

水銀中の発熱密度は Eq.11 に従い、その数式内の各係数は Table 3-10 に基づく。

$$g(x, y, z) = fa(z) \exp\left(-\frac{|x|^{fd(z)}}{fb(z)^2} - \frac{|y|^{fe(z)}}{fc(z)^2}\right) + ff(z) \quad \text{Eq. 11}$$

ここで、

$$fa(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3 + a_4z^4 + a_5z^5 + a_6z^6 + a_7z^7 + a_8z^8$$

$$fb(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3$$

$$fc(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3$$

$$fd(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3$$

$$fe(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3$$

$$ff(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3 + a_4z^4$$

Table 3-10 Eq.11 に含まれる各係数

	$fa(z)$	$fb(z)$	$fc(z)$	$fd(z)$	$fe(z)$	$ff(z)$
a_0	2.0541E+02	6.2435E+00	2.7660E+00	2.1186E+00	1.7789E+00	8.0911E+00
a_1	-1.1667E+01	1.3976E-02	1.7757E-02	-9.8580E-04	-6.0138E-03	-2.9959E-02
a_2	2.8801E-01	-9.7951E-04	7.7297E-04	-1.4036E-04	6.0685E-04	-1.6117E-02
a_3	-1.5619E-02	2.9654E-05	-1.4558E-05	3.9033E-06	-1.2978E-05	6.0189E-04
a_4	2.4702E-04					-7.0140E-06
a_5	8.6179E-05					
a_6	-5.8780E-06					
a_7	1.4210E-07					
a_8	-1.1984E-09					

・発熱密度分布の可視化

発熱密度分布を可視化したものを Fig. 3-29～Fig.3-30 に示す。

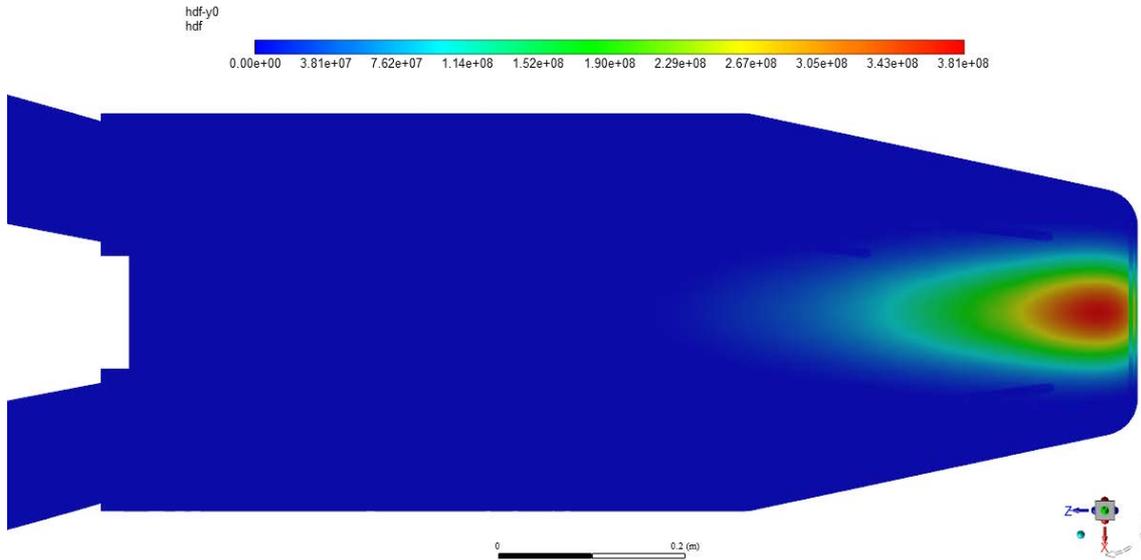


Fig. 3-29 水銀容器及び水銀 発熱密度分布 ZX 断面(Y=0 [mm])

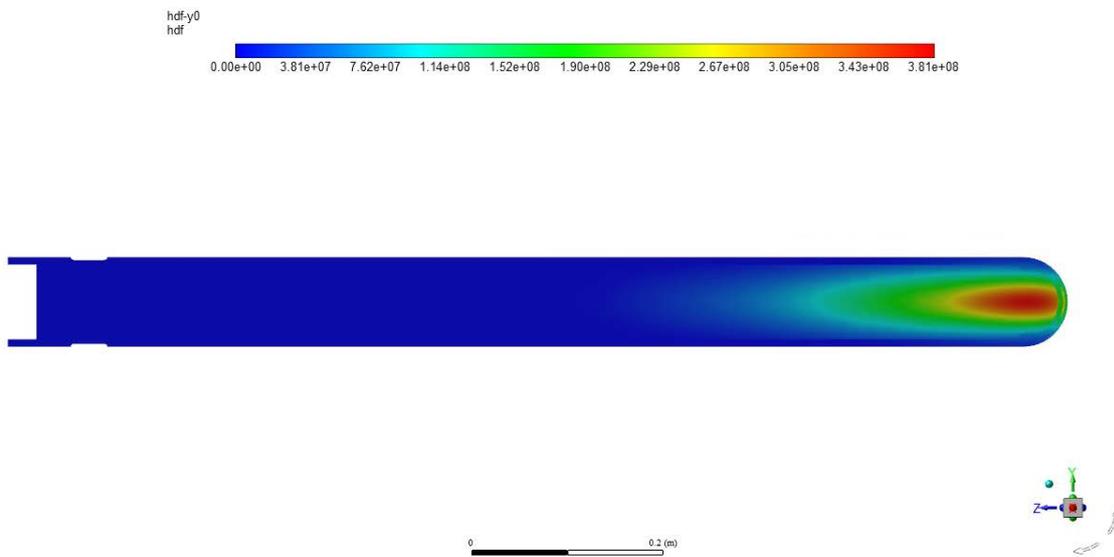


Fig. 3-30 水銀容器及び水銀 発熱密度分布 YZ 断面(X=0 [mm])

・物性値

本熱流動解析に用いる各物性値を以下の式で与えた。

$$\text{物性値} = A_0 + A_1T + A_2T^2 + A_3T^3 + A_4T^4 + A_5T^5 \quad \text{Eq. 12}$$

ここで、 T は温度[K]とし、各 A_i ($i = 0,1,2,3,4,5$)はフィッティング係数である。尚、多項式による物性値データの内挿の際、過剰適合を防止する為必ずしもフィッティングに 5 次迄使用しなかった。

・SUS316L

SUS316L の物性値は参考文献⁴⁾から引用した物性値データ(Table 3-12 を参照)を Eq.12 で内挿しフィッティング係数を求めた。そのフィッティング係数を Table 3-11 に示す。

SUS316L の比熱と熱伝導度の温度依存性を Fig. 3-31 に示す。

Table 3-11 SUS316L 物性値に対する Eq.12 に含まれるフィッティング係数

係数 物性値	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
密度 [kg/m ³]	7.9660E+03					
比熱 [J/kg・K]	0.1208E-01	4.5676E+02				
熱伝導率 [W/m・K]	1.4300E-02	9.9397E+00				

Table 3-12 SUS316L の物性値データ

温度 [K]	密度 [kg/m ³]	比熱 [J/kg/K]	熱伝導度 [W/m/K]
293.15	7966	492	14.12
373.15	7966	502	15.26
473.15	7966	514	16.69
573.15	7966	526	18.11
673.15	7966	538	19.54

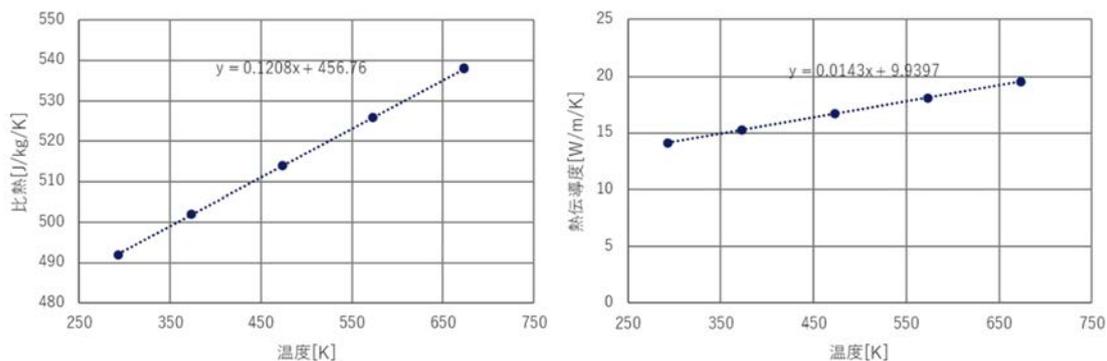


Fig. 3-31 SUS316L の物性値の温度依存性
(左：比熱、右：熱伝導度)

・水銀

水銀の物性値は温度依存性を持つものとし、そのフィッティング係数を Table 3-13 に示す。水銀の密度、比熱、熱伝導率、及び粘度の温度依存性を Fig. 3-32 に示す。

Table 3-13 水銀の物性値に対する Eq.12 に含まれるフィッティング係数

係数 物性値	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
密度 [kg/m ³]	1.43072131E+04	-2.7866412E+00	8.01360966E-04	-5.30021718E-07		
比熱 [J/kg/K]	1.59318703E+02	-9.98695811E-02	1.21708282E-04	-3.61116233E-08		
熱伝導率 [W/m/K]	4.14683603E+00	1.51703934E-02	1.87517692E-06	-1.52155439E-08	1.01661467E-11	
粘度 [Pa·s]	1.27792598E-02	-1.08710212E-04	4.29857727E-07	-8.85280652E-10	9.29119111E-13	-3.93413944E-16

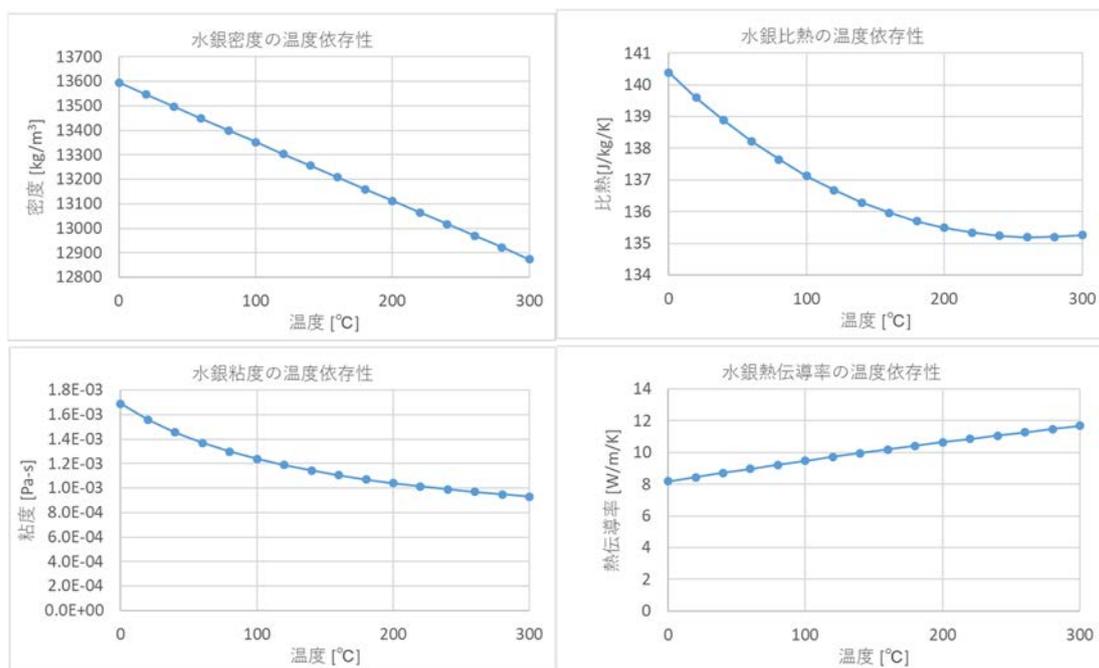


Fig. 3-32 水銀物性値の温度依存性
 (左上：密度、右上：定圧比熱、左下：粘度、右下：熱伝導率)

・気泡粒子(ヘリウム)

気泡中の気体はヘリウムであり、50 [°C] としたときのヘリウムの物性値を参考文献⁵⁾に基づき気泡粒子の物性値として適用し、Table 3-14 に示す値を用いた。尚、本解析では分散相として扱う。

Table 3-14 気泡粒子(ヘリウム)の物性値

密度 [kg/m³]	0.162
比熱 [J/kg/K]	5.193

3.1.4 事前解析結果(流動状態)

事前解析結果を以下に示す。

・バブラー出口の旋回方向の可視化

バブラーに Fan BC を適応した結果を Fig. 3-33 及び Fig. 3-34 で示す面において示す。Fig. 3-35 にバブラー出口面での y 方向速度分布を載せる。この速度分布は指定された旋回方向と一致しており、Fan BC によって旋回流が発生したことが分かる。

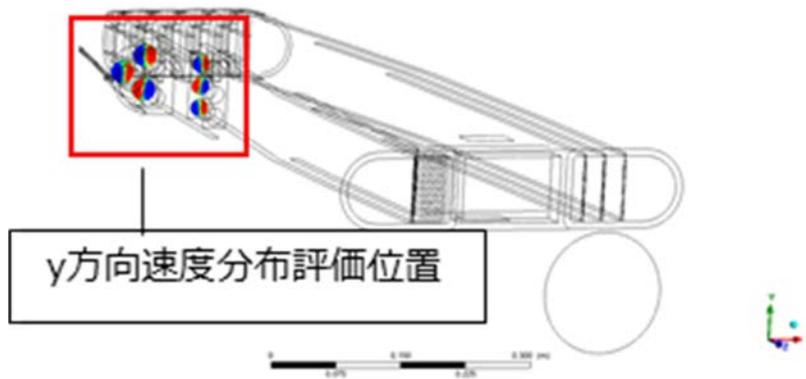


Fig. 3-33 バブラー出口での y 方向速度分布評価位置(俯瞰視)

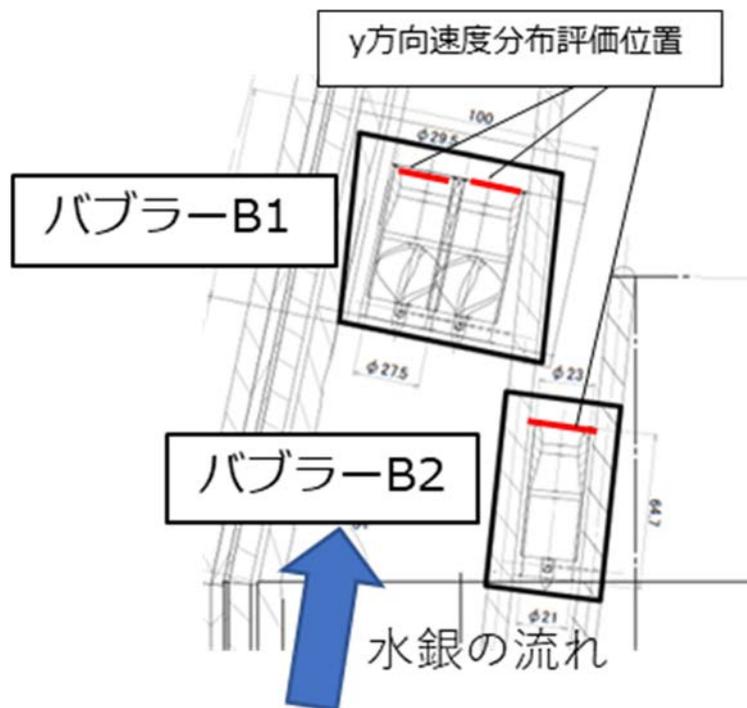


Fig. 3-34 バブラー出口での y 方向速度分布評価位置(バブラー部拡大)

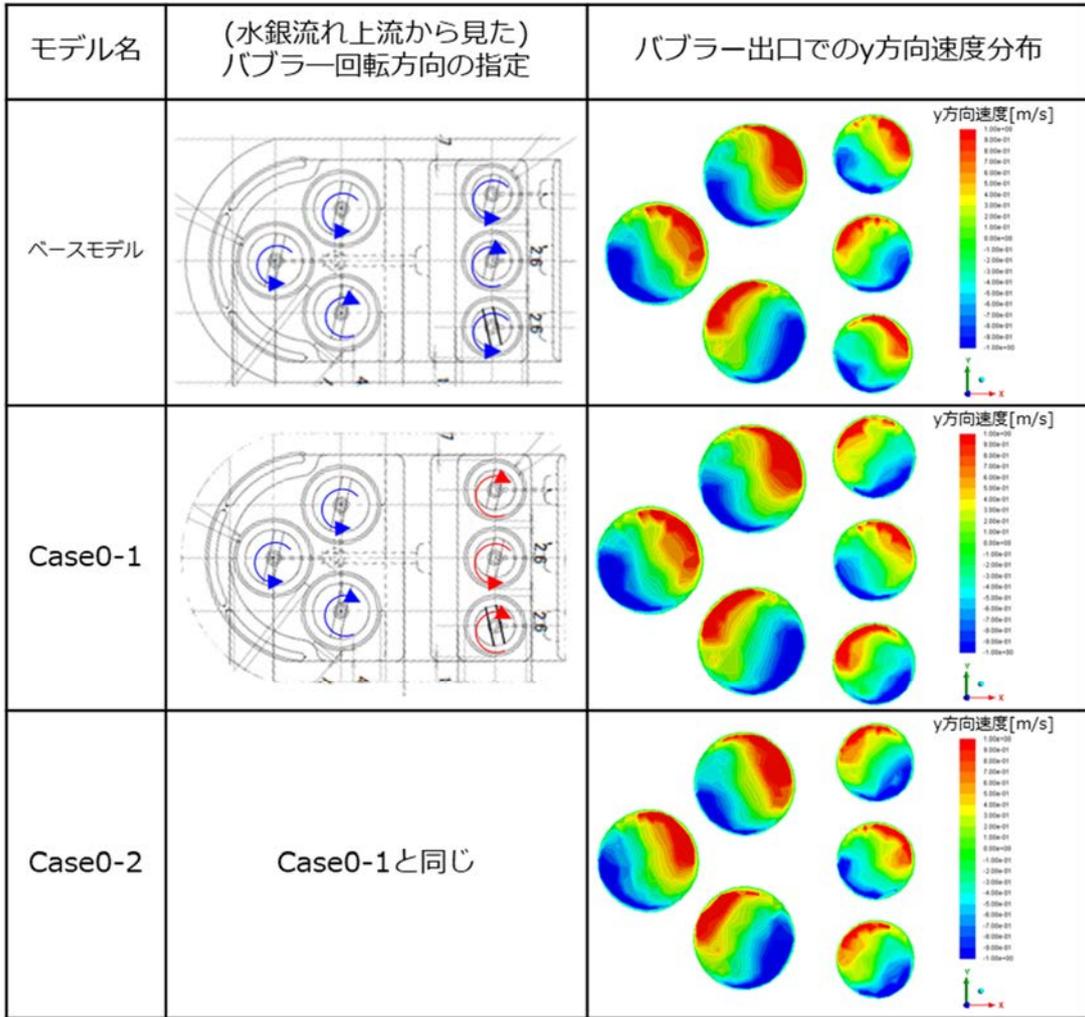


Fig. 3-35 バブラー出口 y 軸方向速度分布

・水銀容器温度分布

事前解析の水銀容器表面の温度分布を Fig. 3-36～Fig. 3-40 に、Fig. 3-41 及び Fig. 3-42 に示す断面位置の水銀容器の温度分布を Fig. 3-43～Fig. 3-47 に示した。

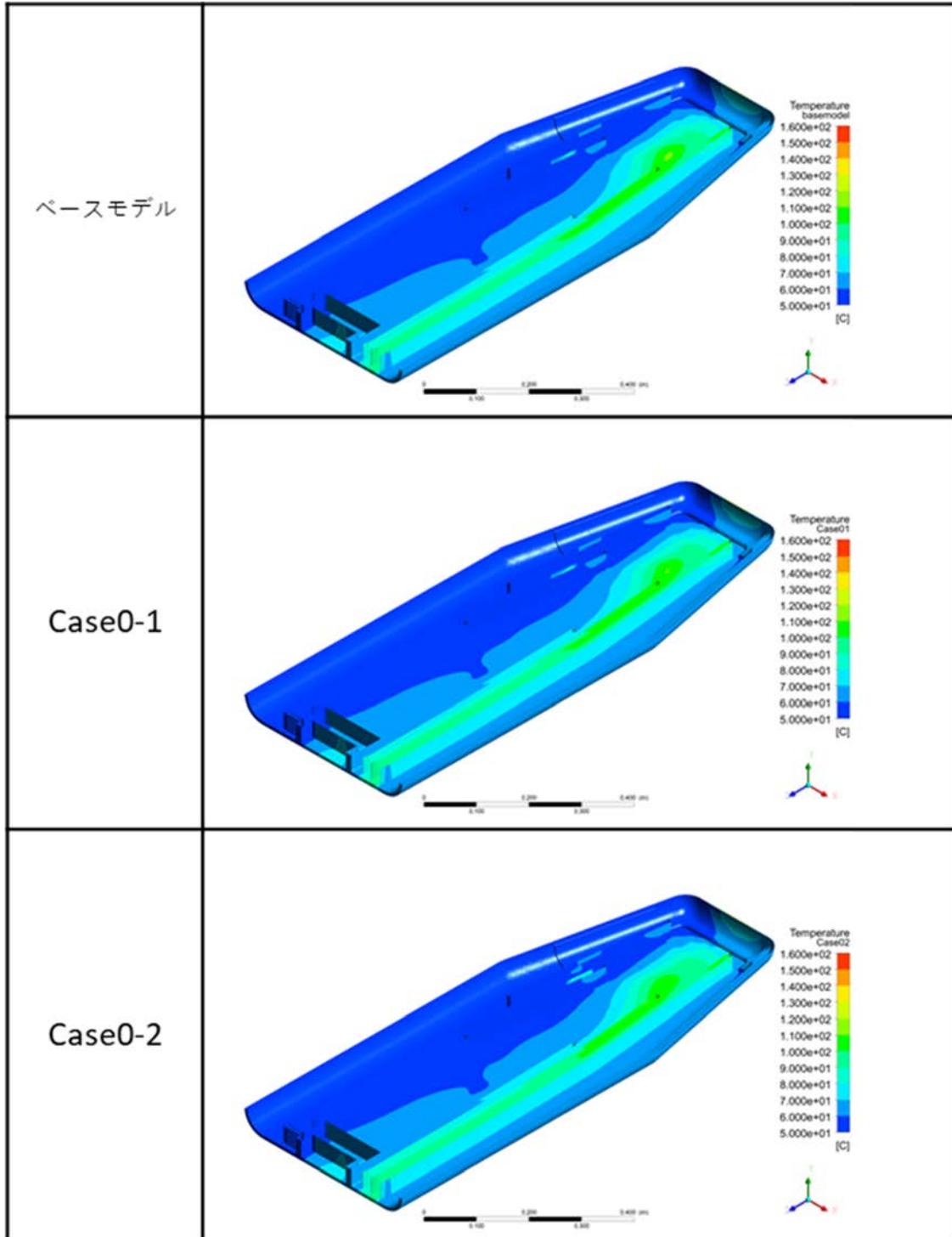


Fig. 3-36 水銀容器下側内面 温度分布

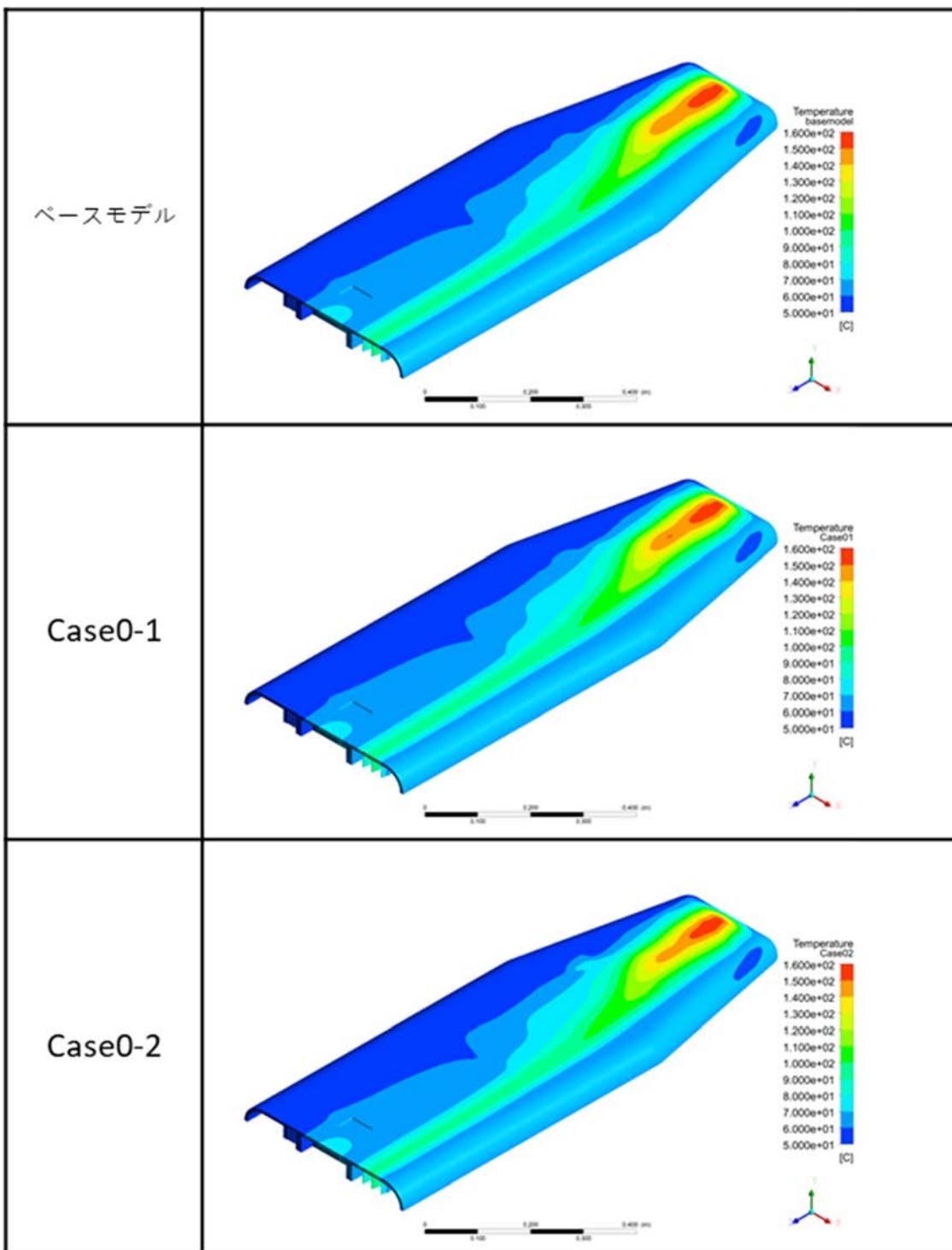


Fig. 3-37 水銀容器上側外面 温度分布

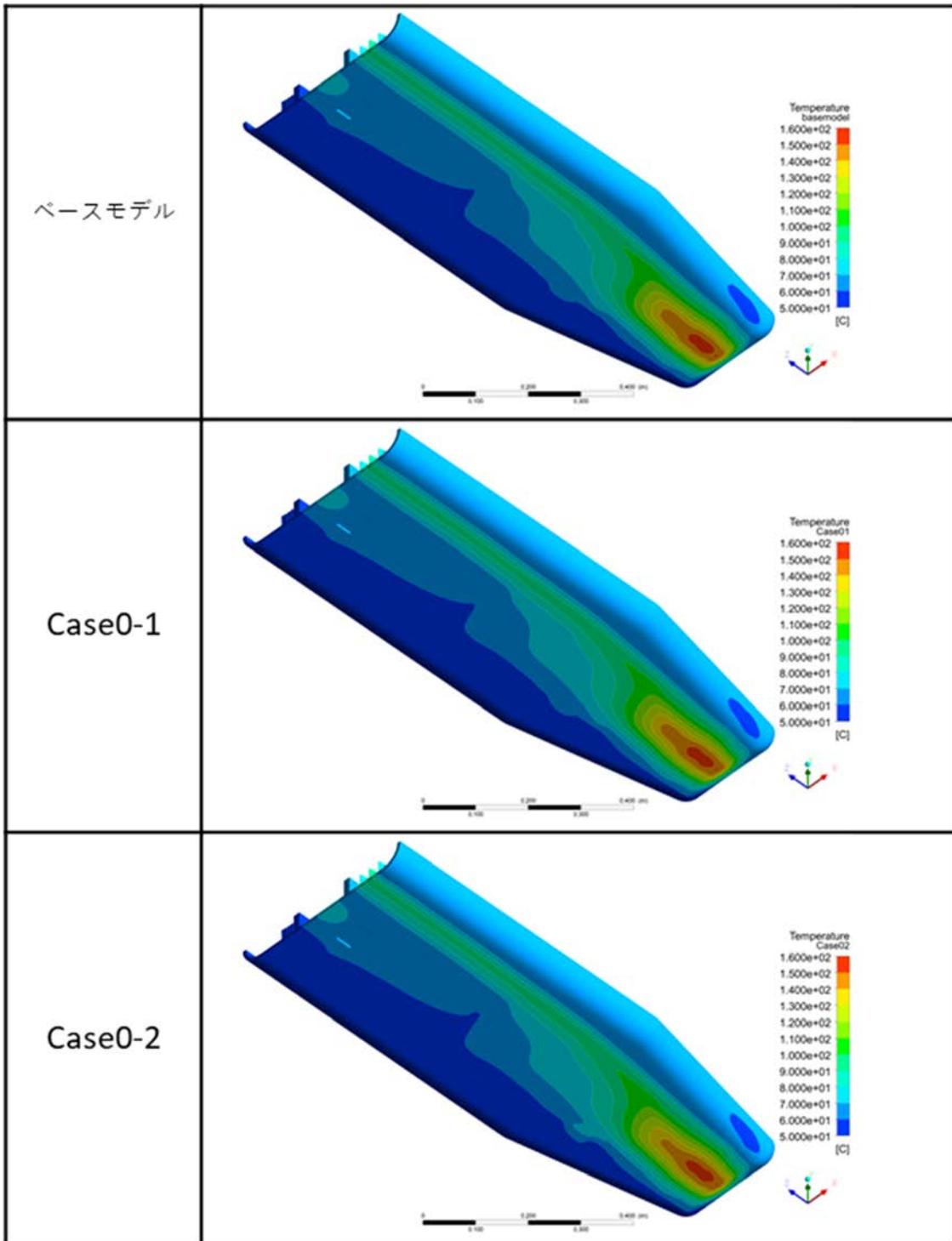


Fig. 3-38 水銀容器下側外面 温度分布

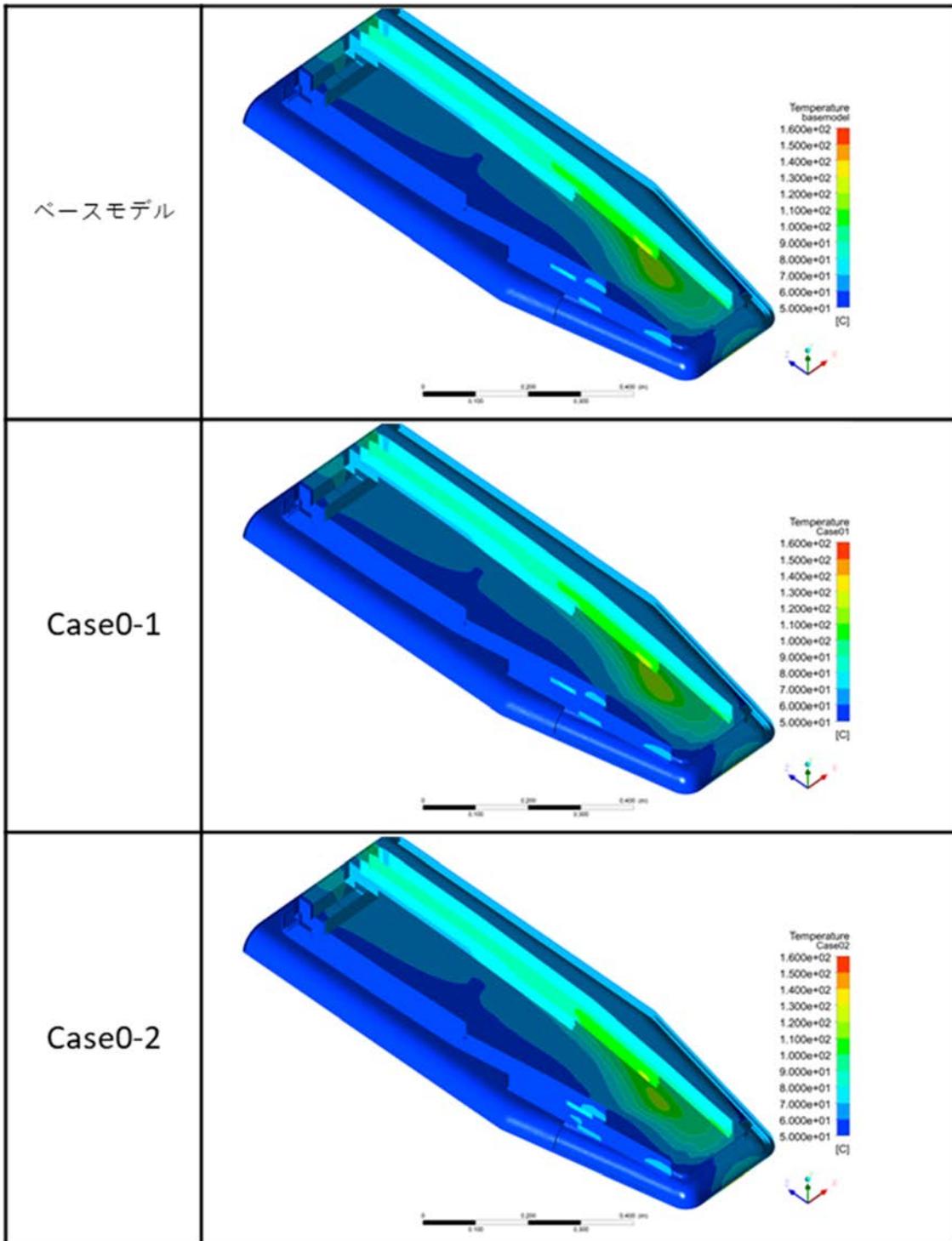


Fig. 3-39 水銀容器上側内面 温度分布

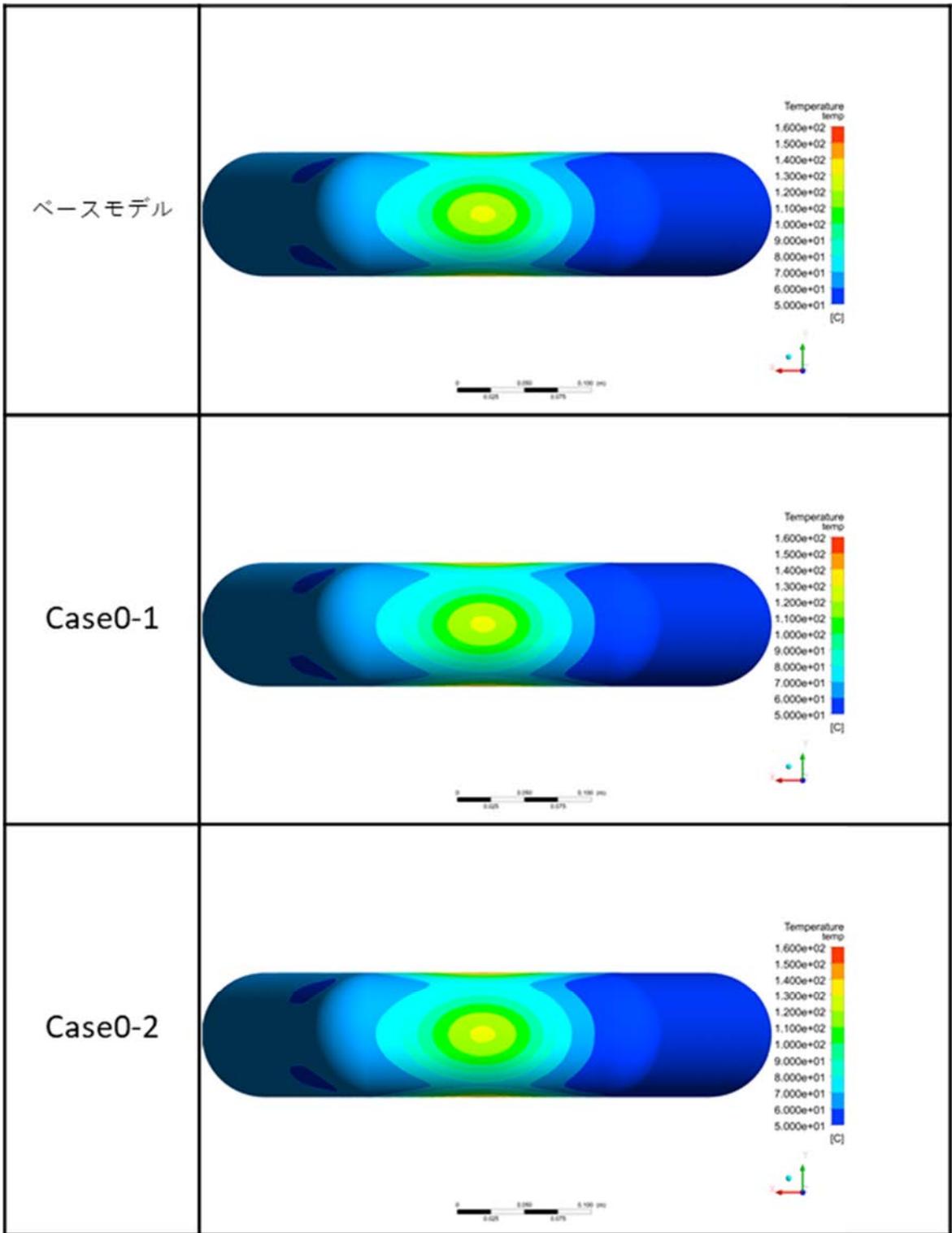


Fig. 3-40 水銀容器ビーム窓部外側 温度分布

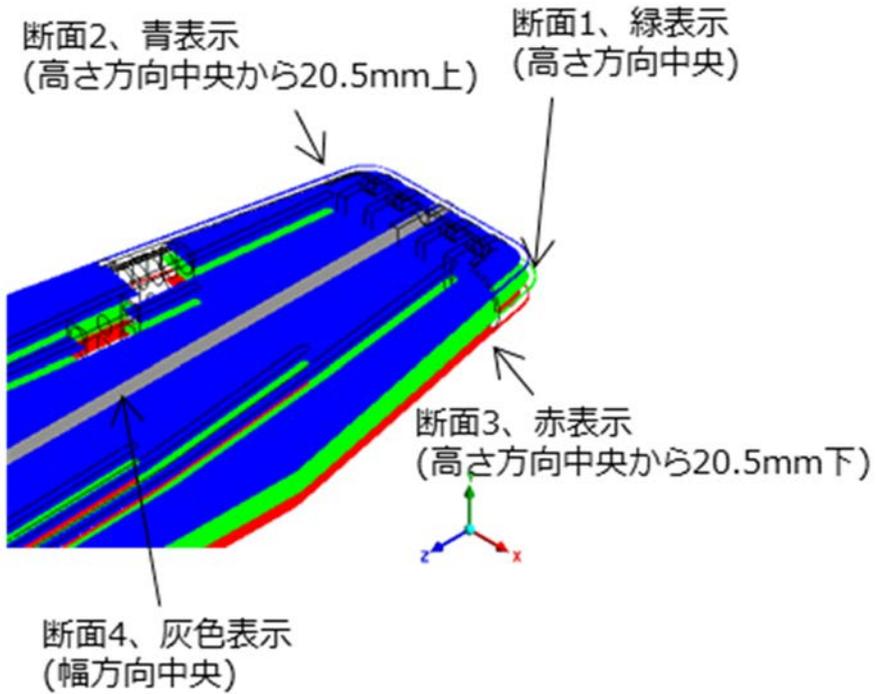


Fig. 3-41 断面位置(俯瞰視)

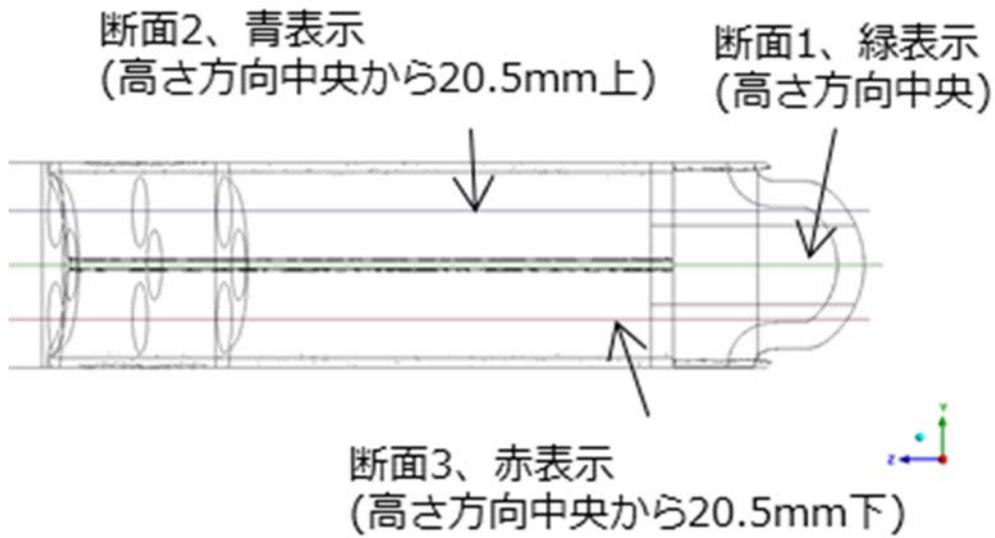


Fig. 3-42 断面位置(側面視)

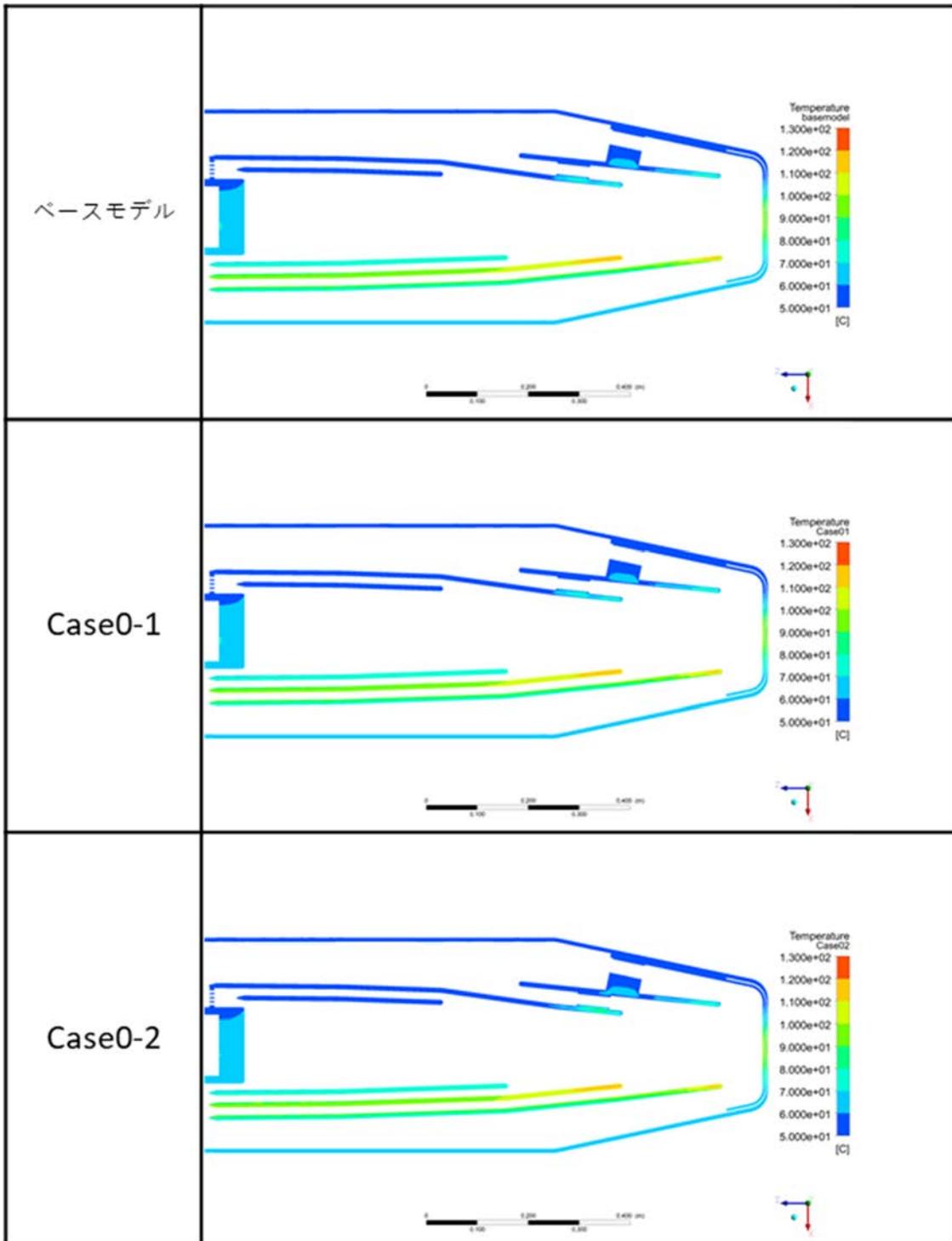


Fig. 3-43 断面 1(高さ方向中央)の水銀容器の温度分布

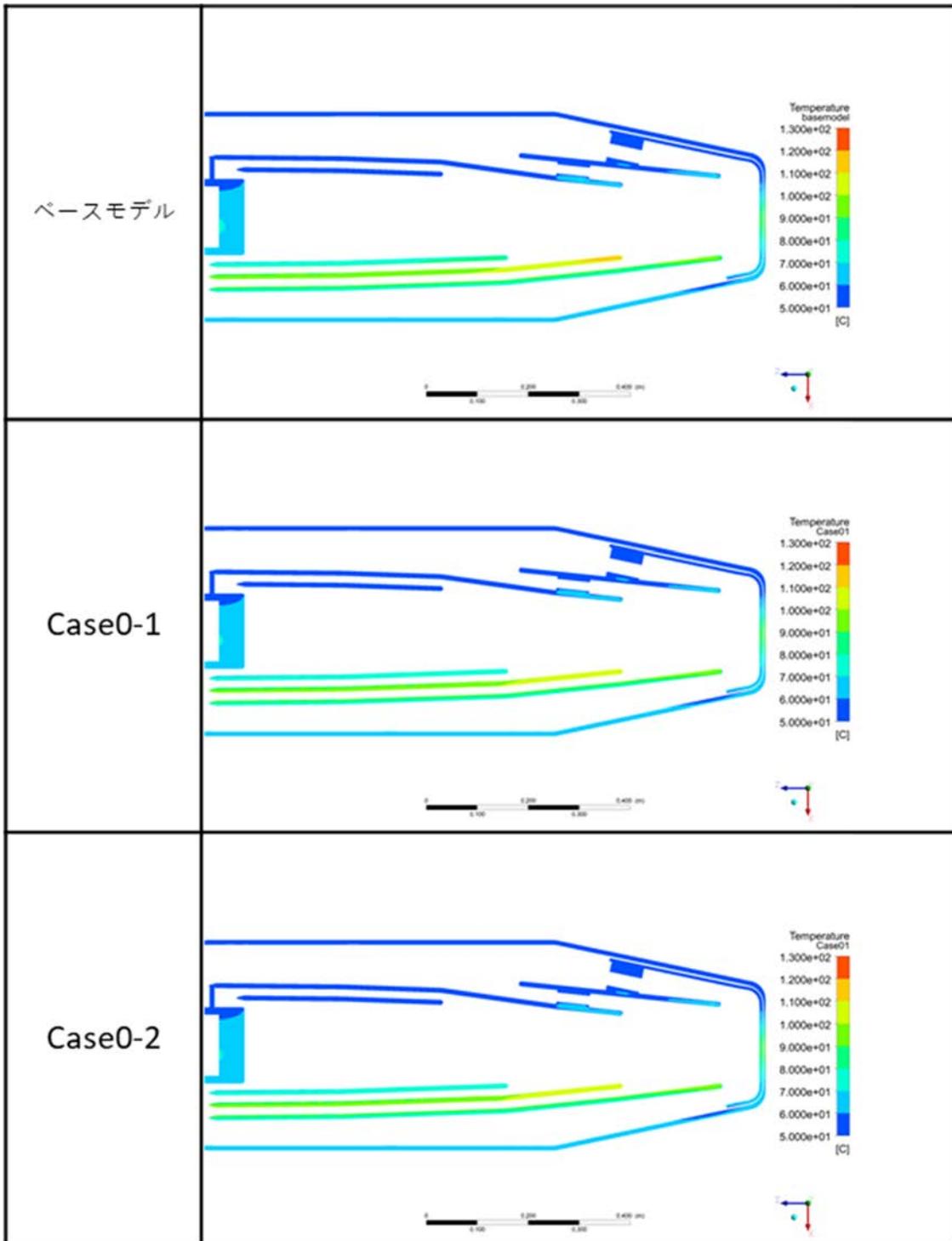


Fig. 3-44 断面 2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)の水銀容器の温度分布

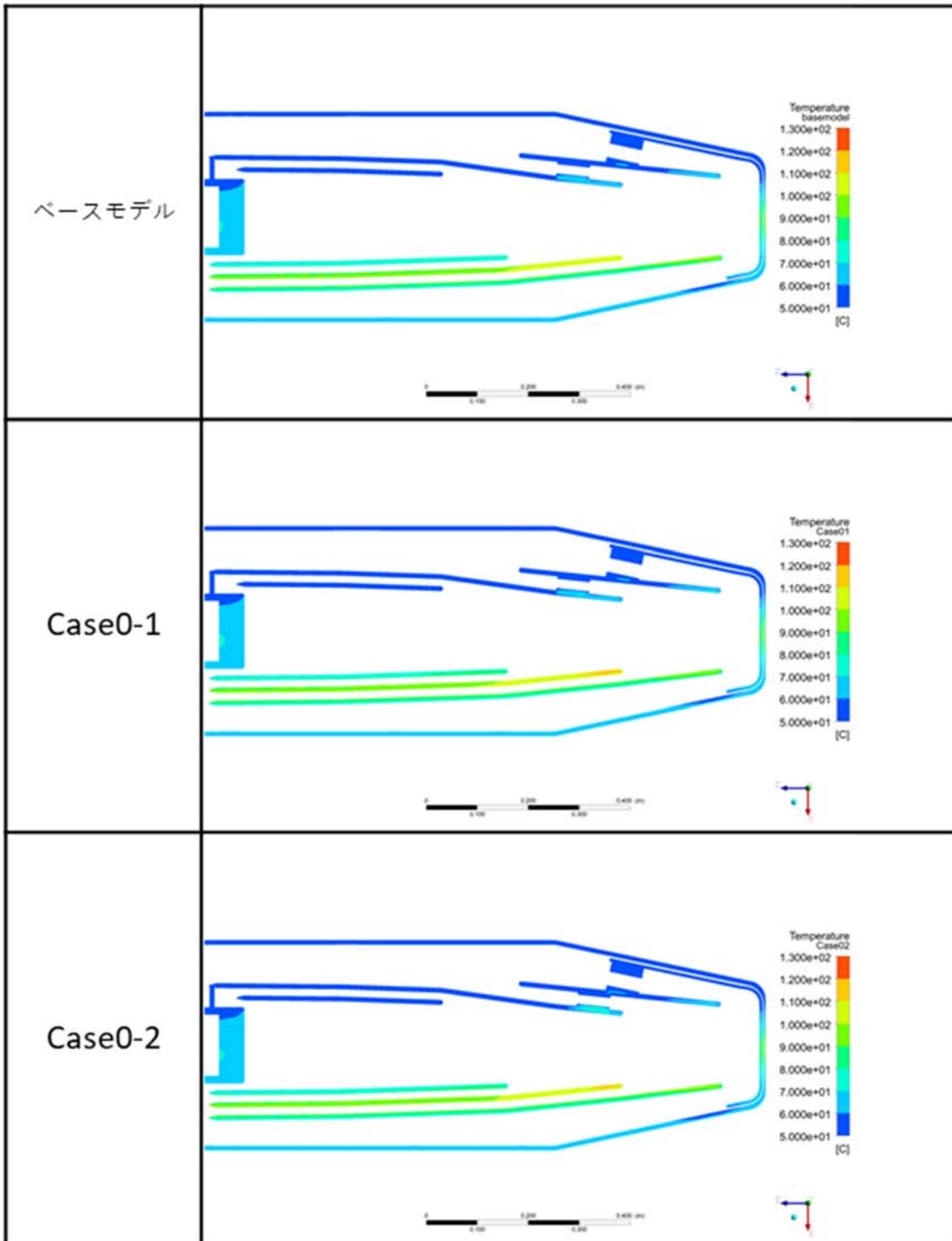


Fig. 3-45 断面 3 (高さ方向中央から 20.5mm 下)の水銀容器の温度分布

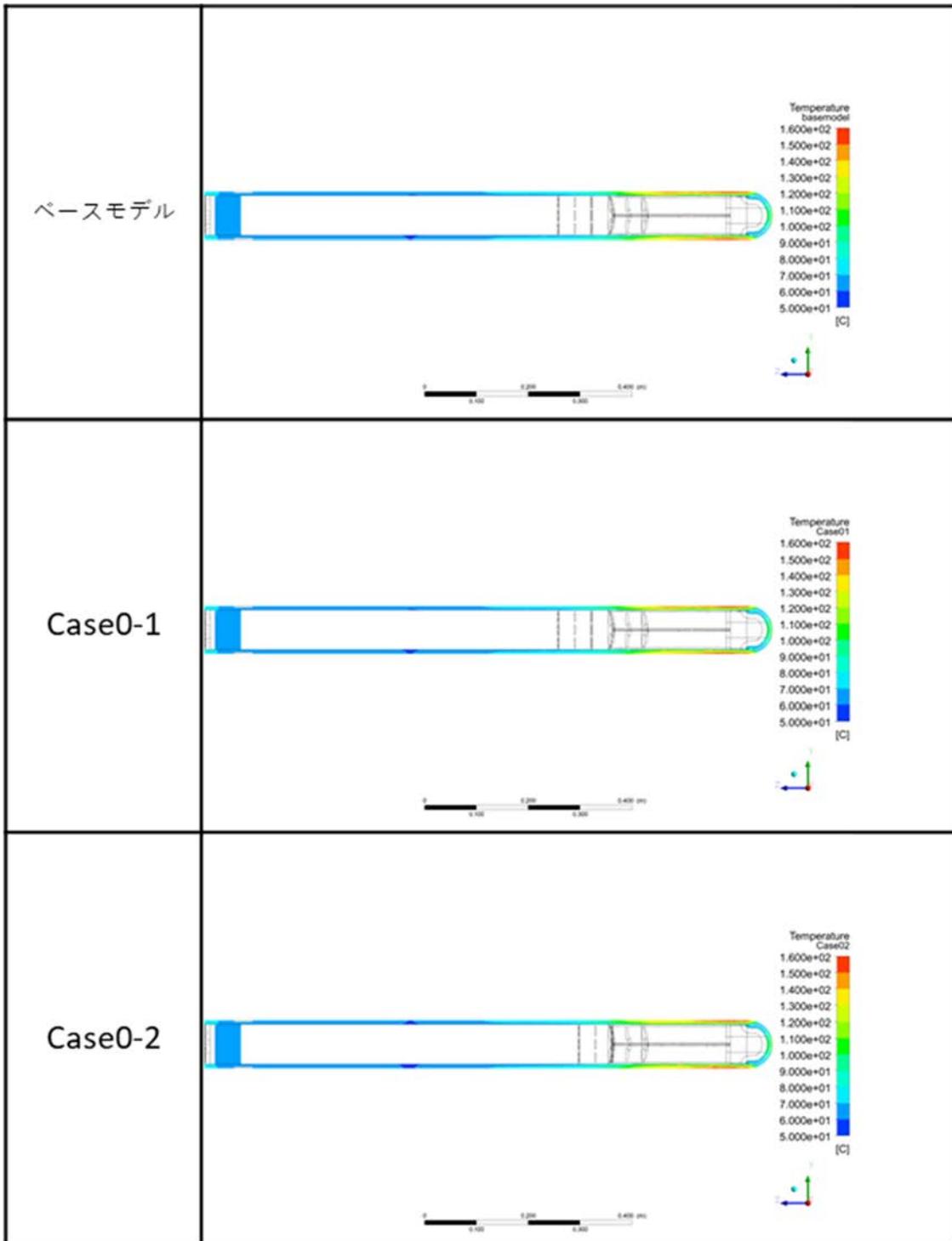


Fig. 3-46 断面4(幅方向中央)の水銀容器の温度分布

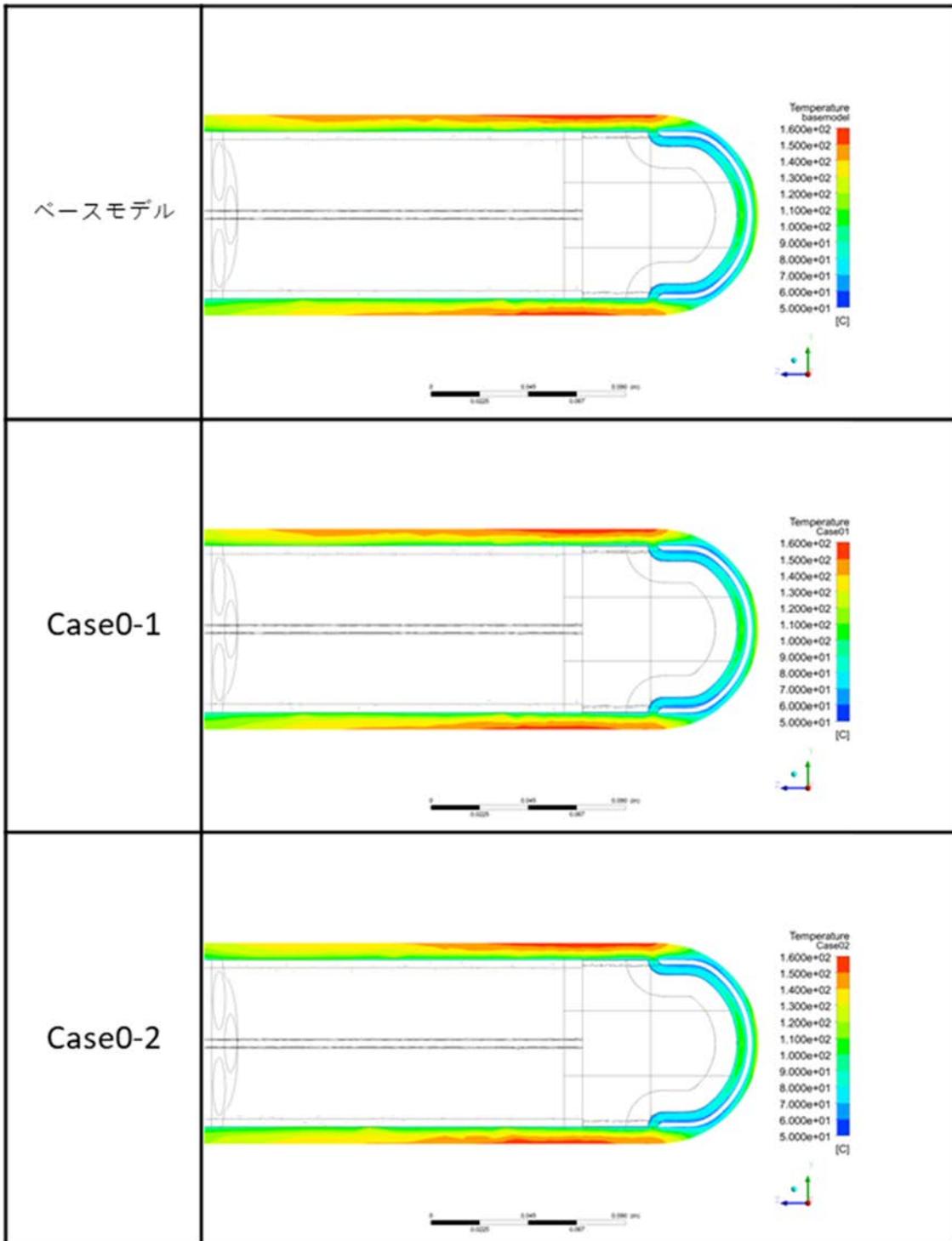


Fig. 3-47 断面 4(幅方向中央)の水銀容器の温度分布(ビーム窓部注視)

・水銀の温度分布

事前解析の水銀の温度分布を確認するため、Fig. 3-41 及び Fig. 3-42 に示す断面位置の水銀の温度分布を Fig. 3-48～Fig. 3-52 に示した。

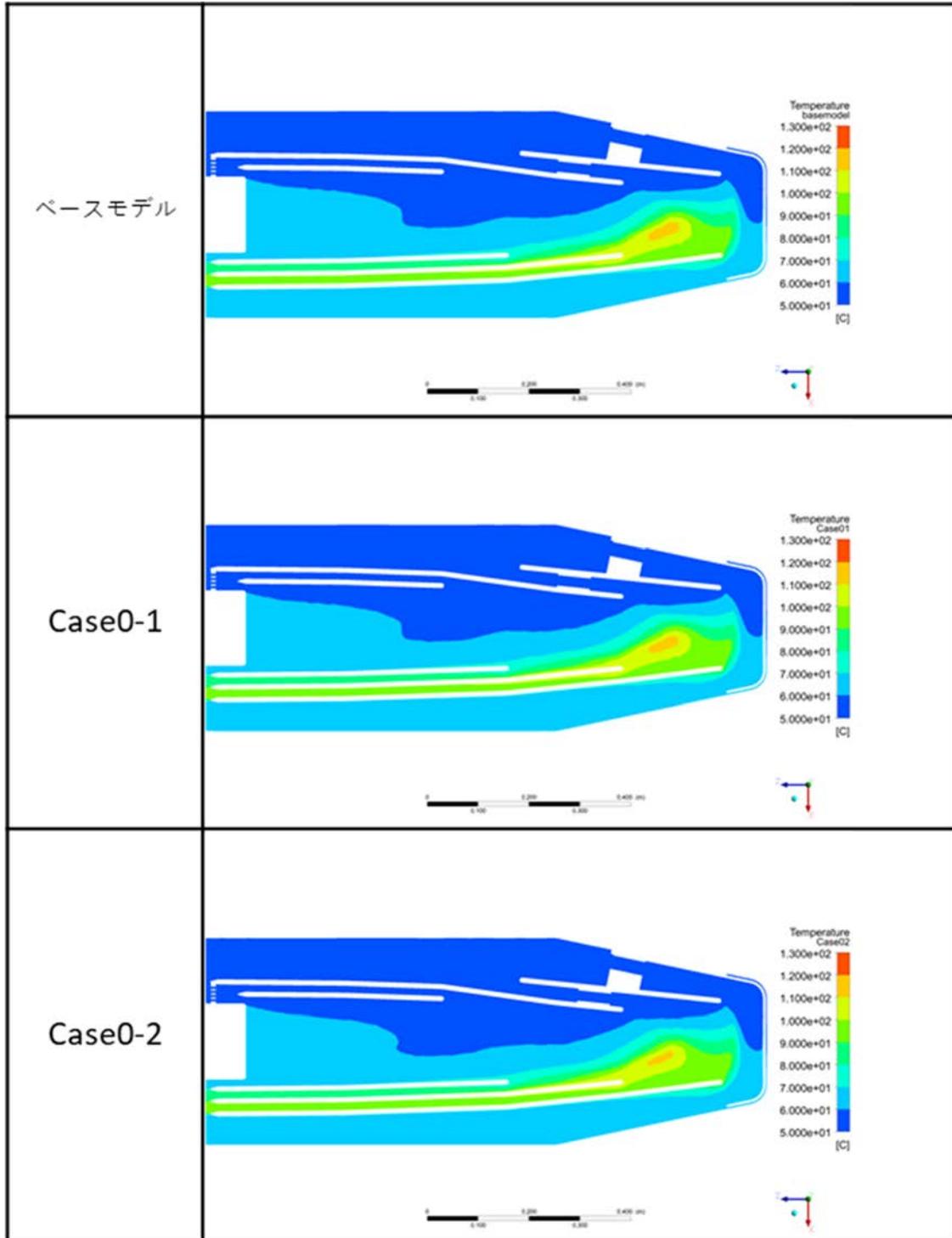


Fig. 3-48 断面 1(高さ方向中央)の水銀の温度分布

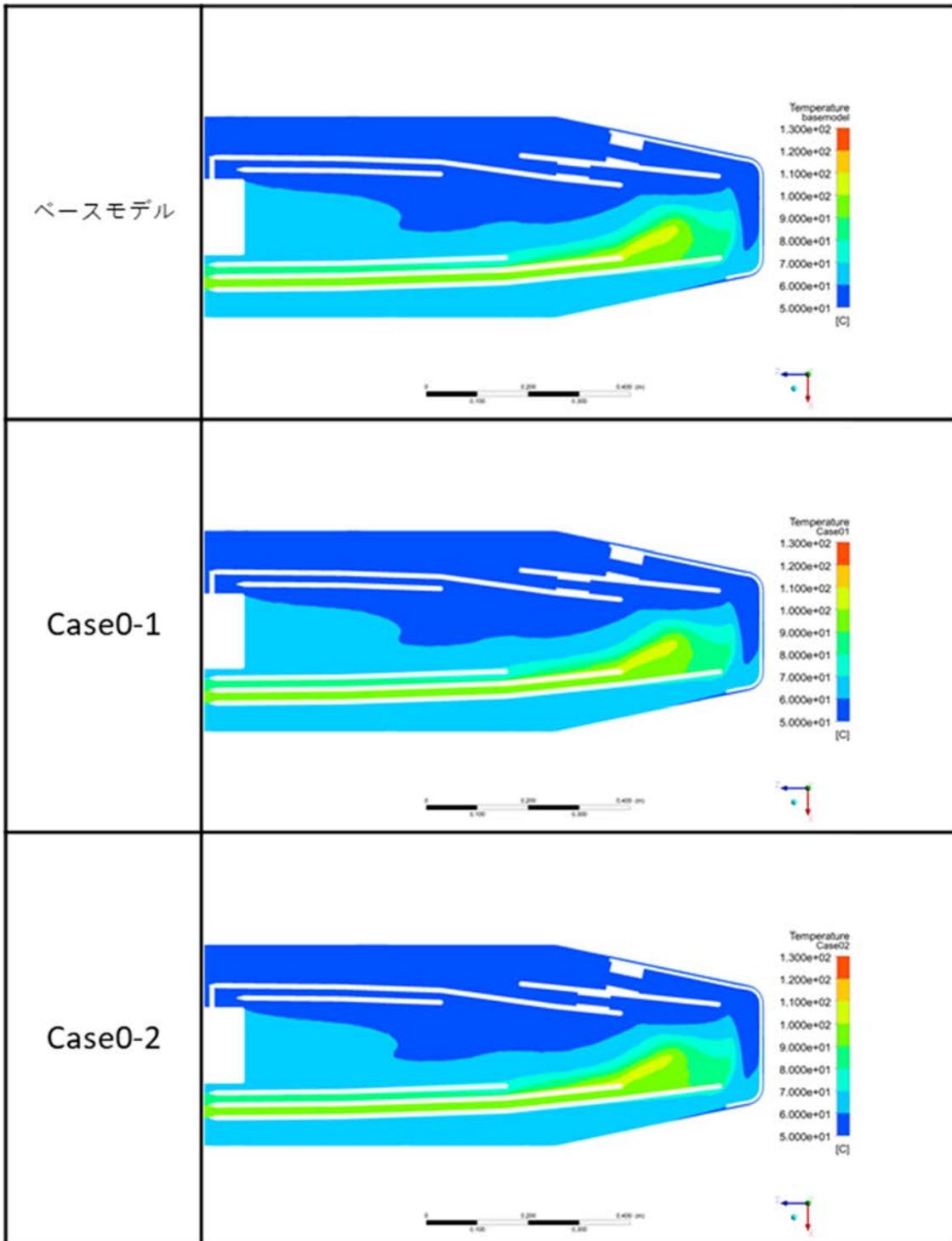


Fig. 3-49 断面 2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)の水銀の温度分布

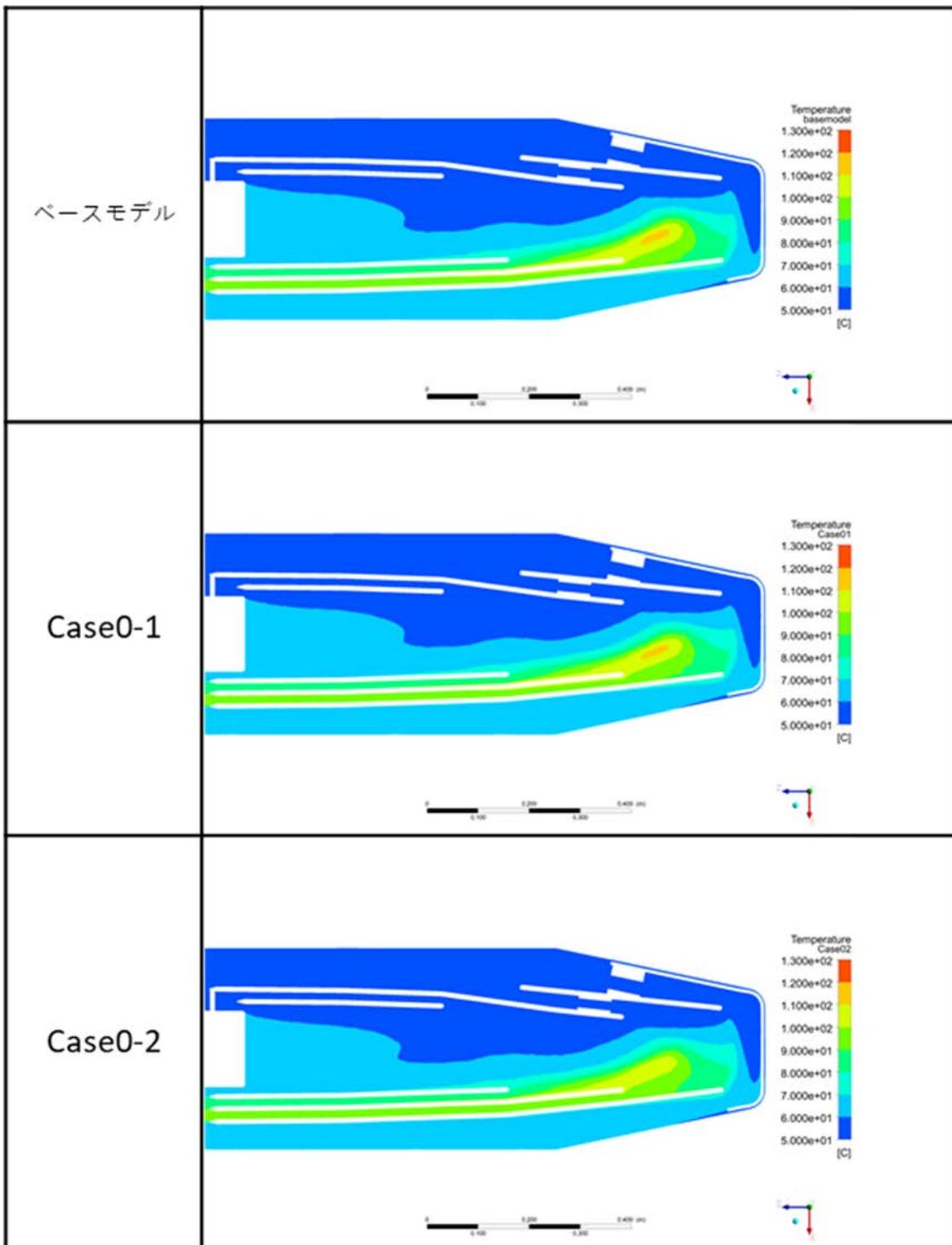


Fig. 3-50 断面3 (高さ方向中央から 20.5mm 下)の水銀の温度分布

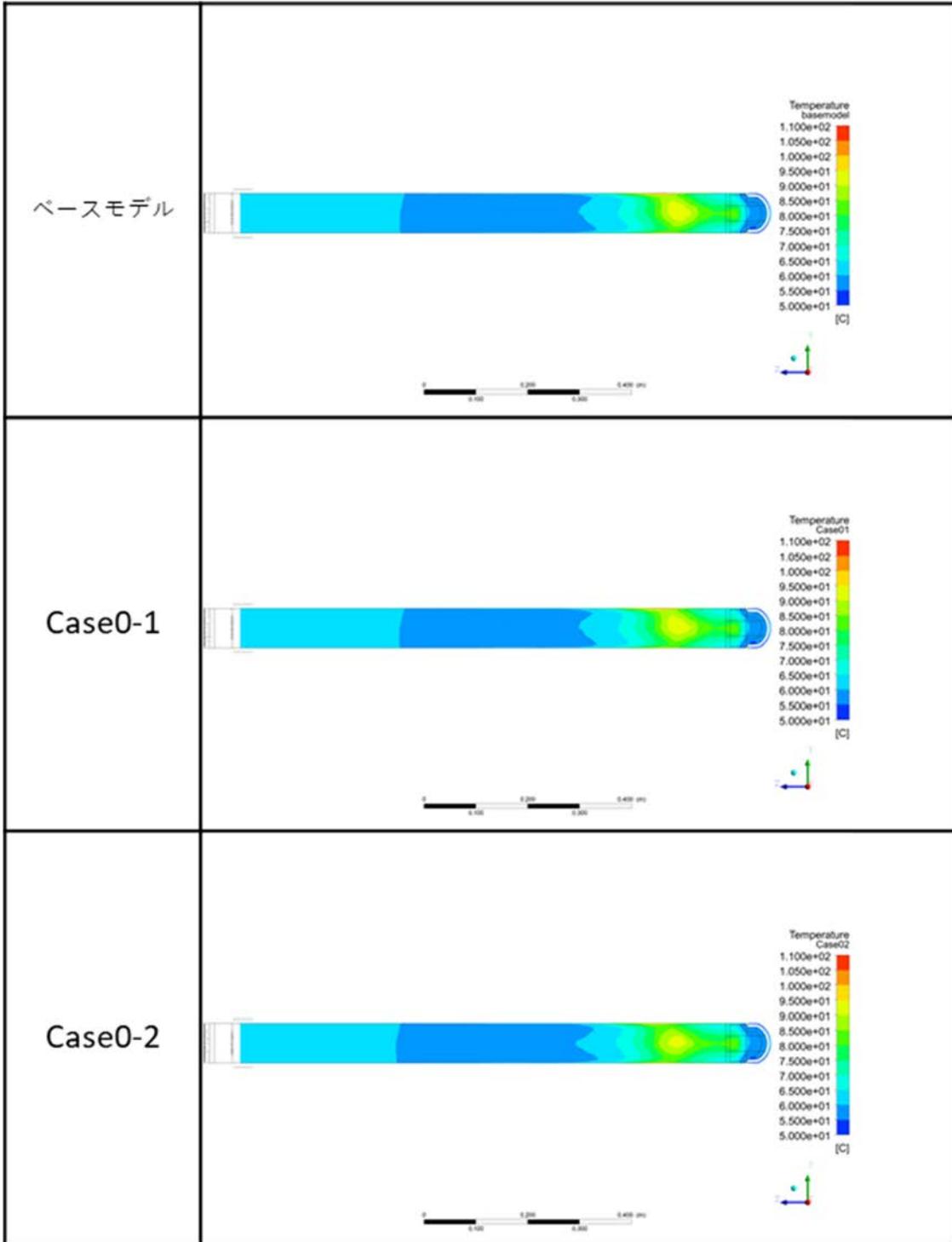


Fig. 3-51 断面 4(幅方向中央)の水銀の温度分布

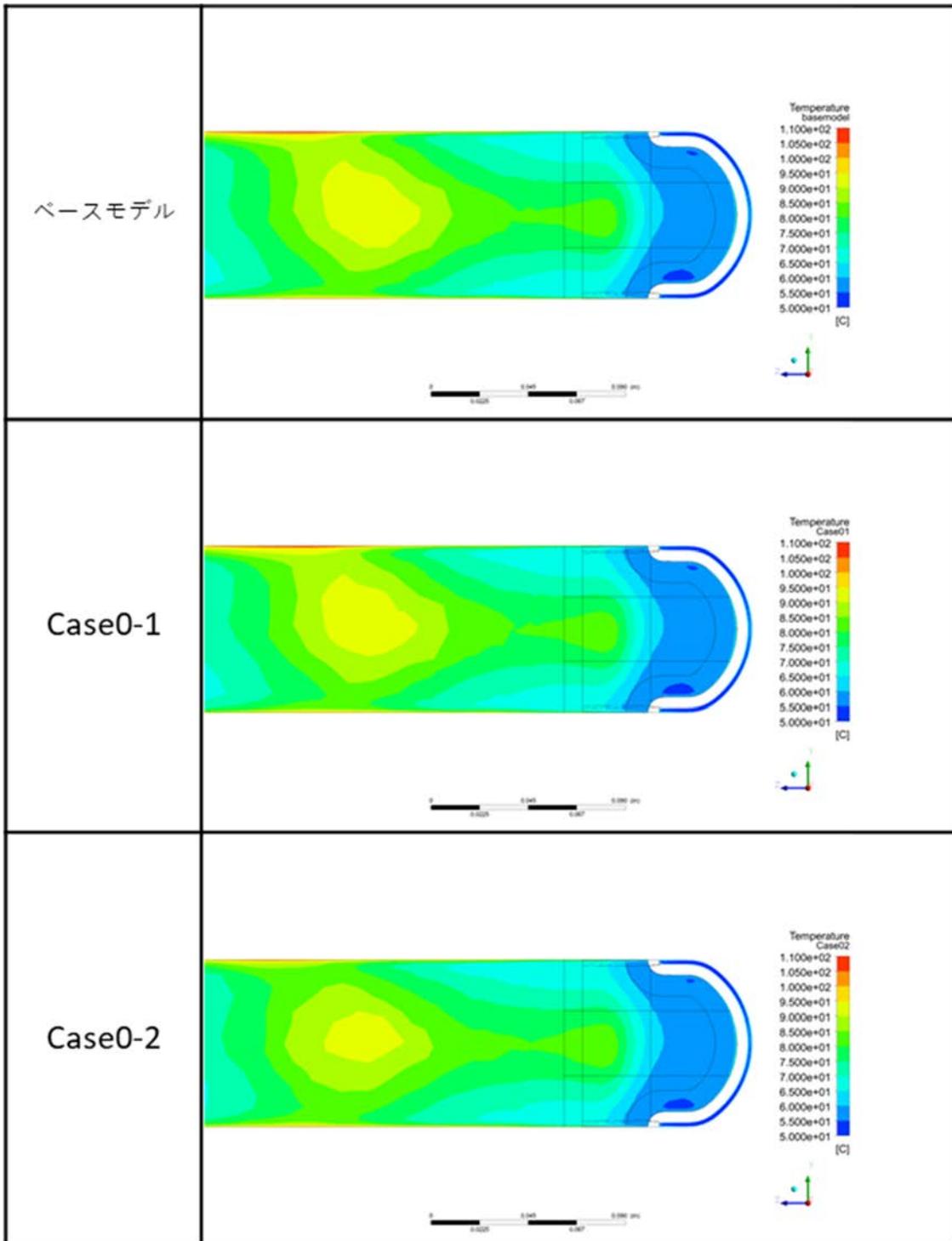


Fig. 3-52 断面 4(幅方向中央)の水銀の温度分布(ビーム窓部注視)

• 速度分布(ベクトル表示)

事前解析の水銀の流動状態を確認するため、Fig. 3-41 及び Fig. 3-42 に示す断面位置において、水銀の速度ベクトル図を Fig. 3-53～Fig. 3-55 に示した。

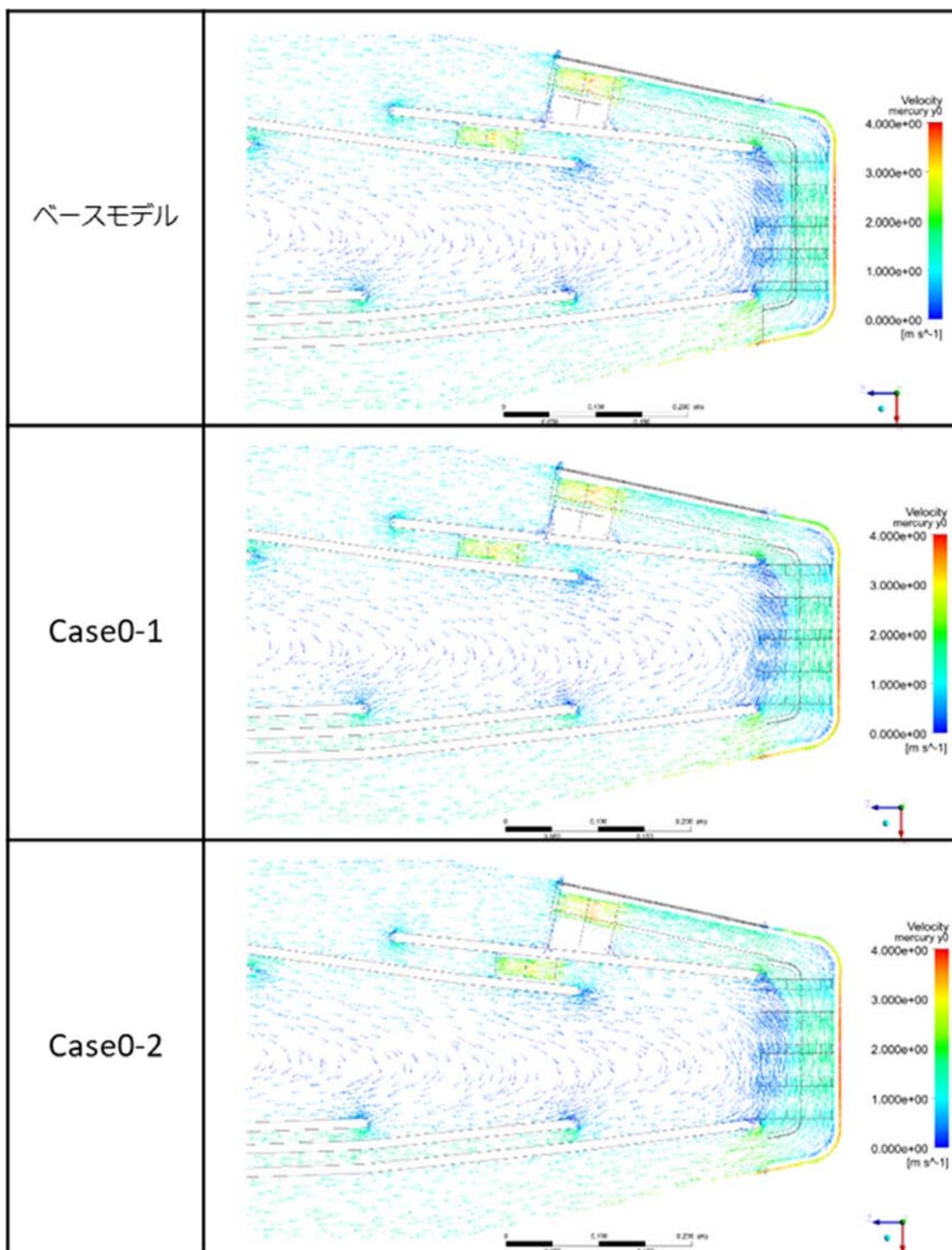


Fig. 3-53 断面 1(高さ方向中央)の水銀の流速分布

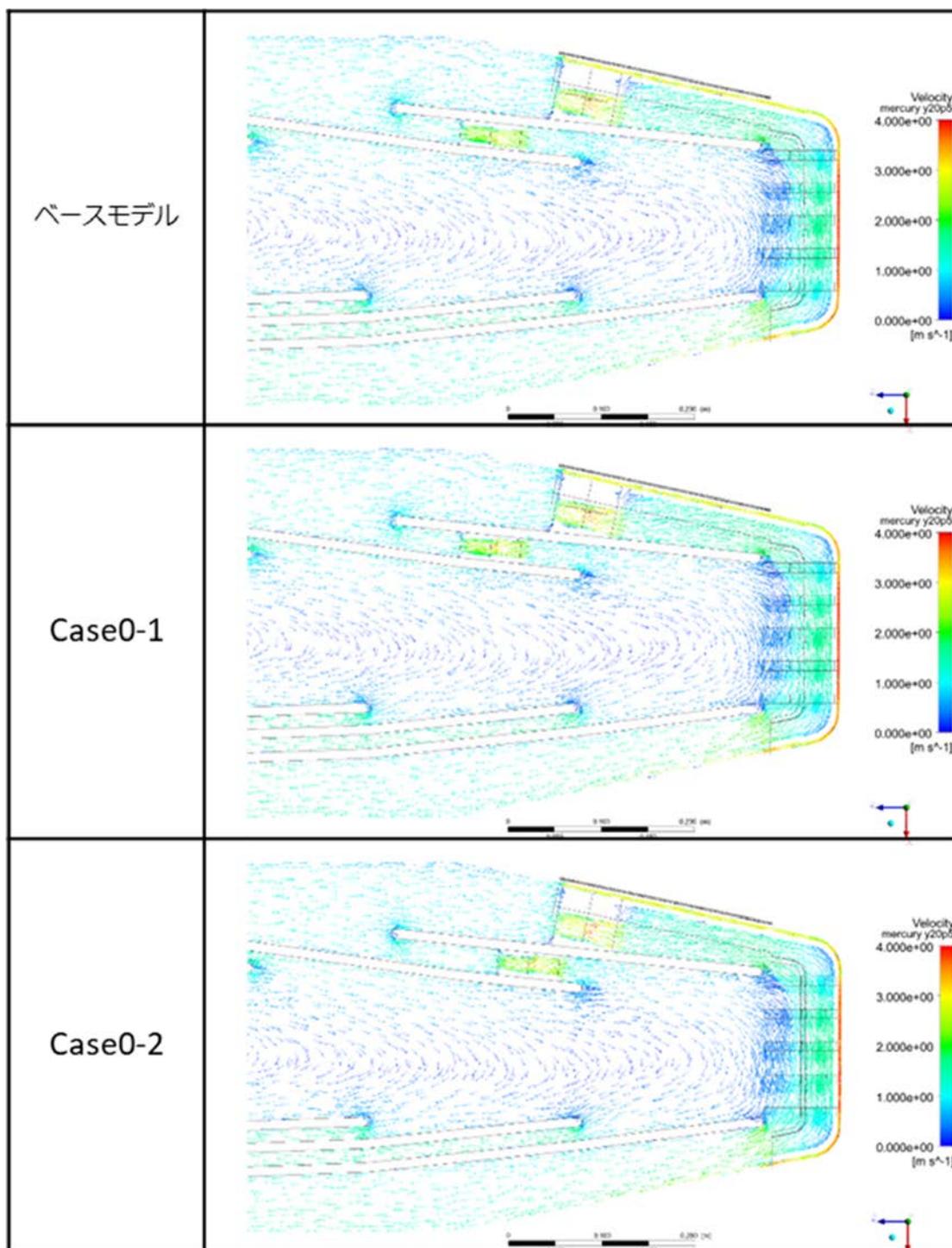


Fig. 3-54 断面 2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)の水銀の流速分布

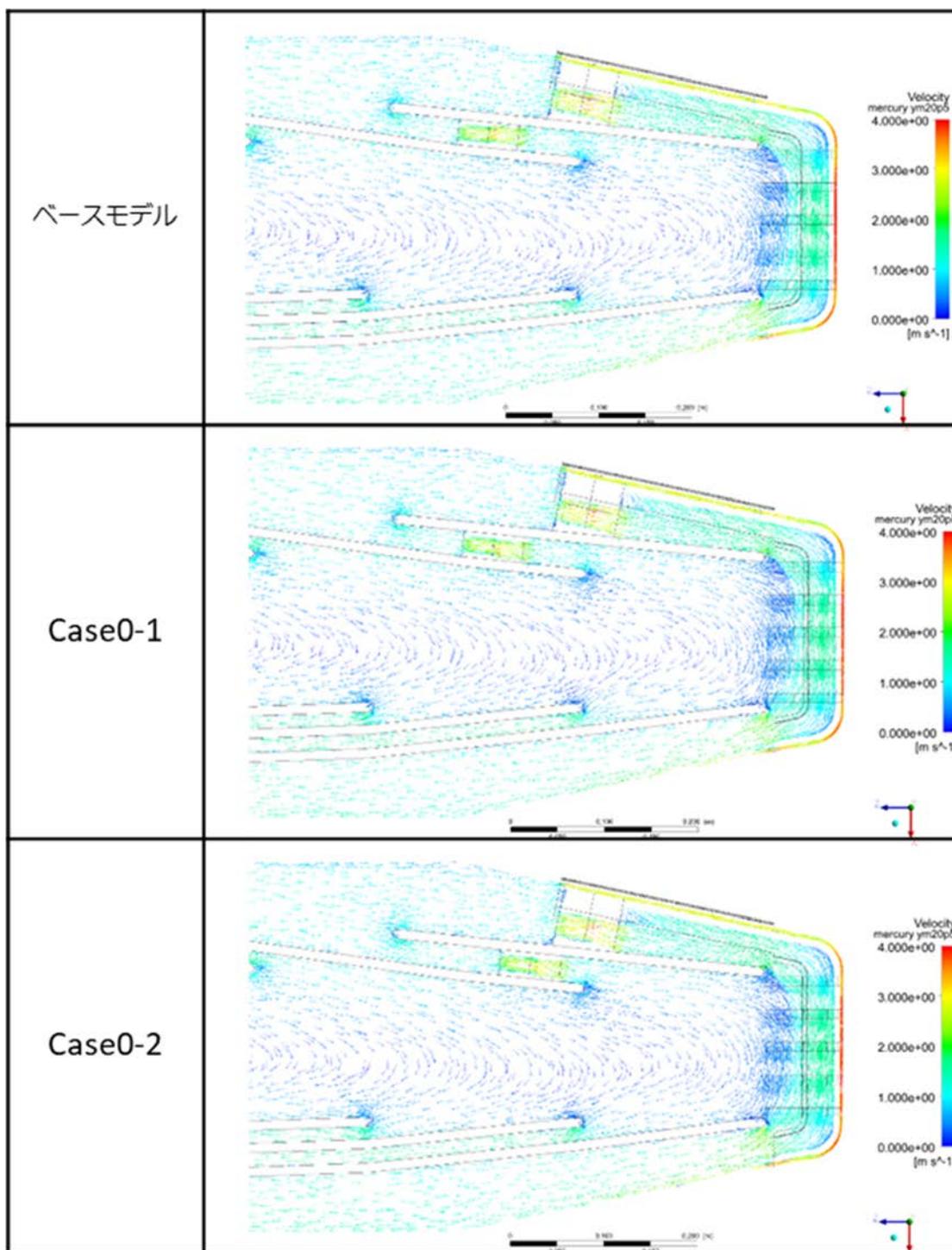


Fig. 3-55 断面3 (高さ方向中央から 20.5mm 下)の水銀の流速分布

・圧力損失及び最大温度

流入出口間の圧力損失を Table 3-15 に、水銀容器、バブラーブロック、水銀の各最大温度を Table 3-16 に示す。

Table 3-15 流入出口間の圧力損失

圧力損失	ベースモデル	0.270 [MPa]
	Case0-1	0.270 [MPa]
	Case0-2	0.270 [MPa]

Table 3-16 最大温度

水銀容器	ベースモデル	430K(= 157degC)
	Case0-1	431K(= 158degC)
	Case0-2	431K(= 158degC)
バブラーブロック	ベースモデル	347K(= 74degC)
	Case0-1	347K(= 74degC)
	Case0-2	356K(= 83degC)
水銀	ベースモデル	392K(= 119degC)
	Case0-1	392K(= 119degC)
	Case0-2	388K(= 115degC)

・水銀流量分配

水銀容器内で案内羽根や内壁によって仕切られた流路における水銀の流量分配を Fig. 3-56 に示す面の①、②で評価した。その結果を Table 3-17 に示す。

Table 3-17 水銀流量分配

モデル名	質量流量[kg/s]	
	評価面①	評価面②
ベースモデル	53.64	29.05
Case0-1	53.65	29.05
Case0-2	53.61	29.01

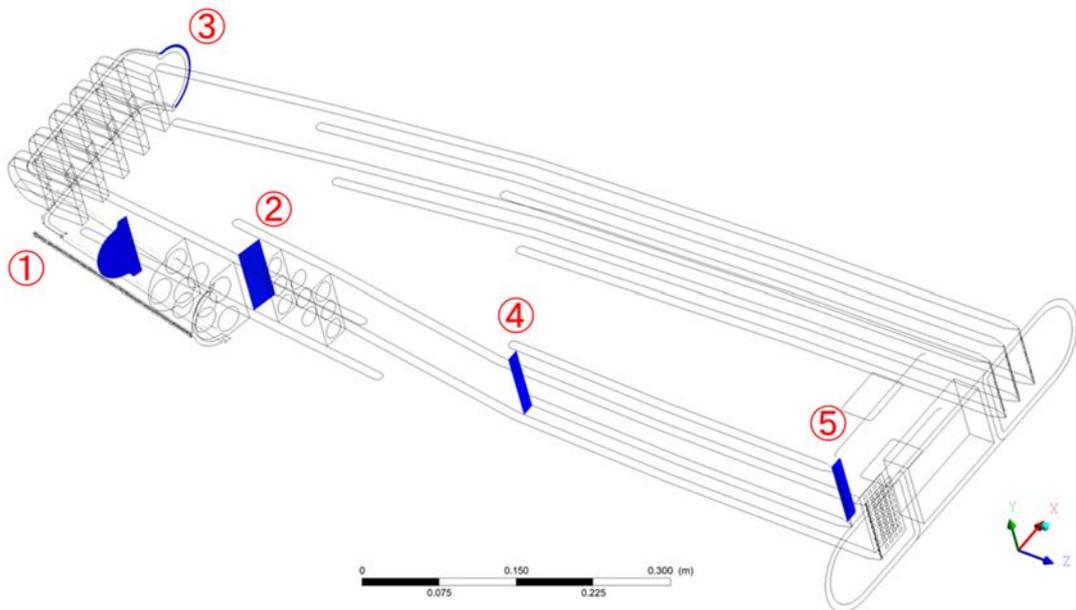


Fig. 3-56 流量分配評価面

・狭隘流路部の流速

ビーム窓部の狭隘流路における水銀の流速を Fig. 3-57 に示す位置で取得した。その結果を Table 3-18 に示す。

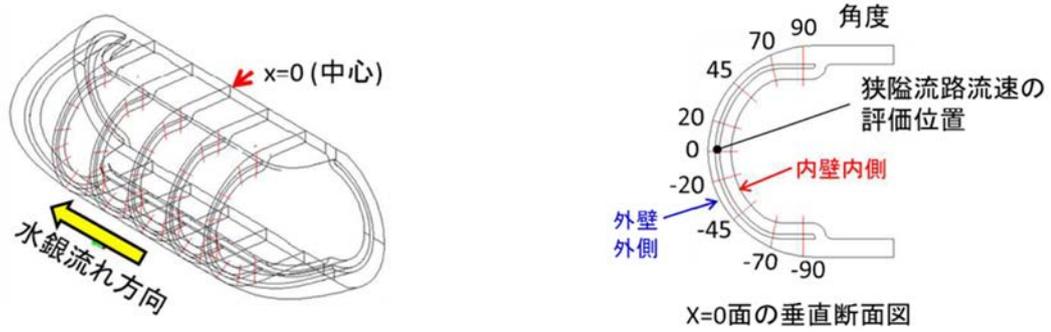


Fig. 3-57 狭隘流路部評価位置

Table 3-18 狭隘流路部の流速

モデル名	流速[m/s]
ベースモデル	4.33
Case0-1	4.33
Case0-2	4.34

3.1.5 事前解析結果(気泡挙動)

・気泡軌跡

バブラー出口から注入される気泡(気泡半径: 50, 100, 150 [μm])の軌跡を Fig. 3-58 に示す。

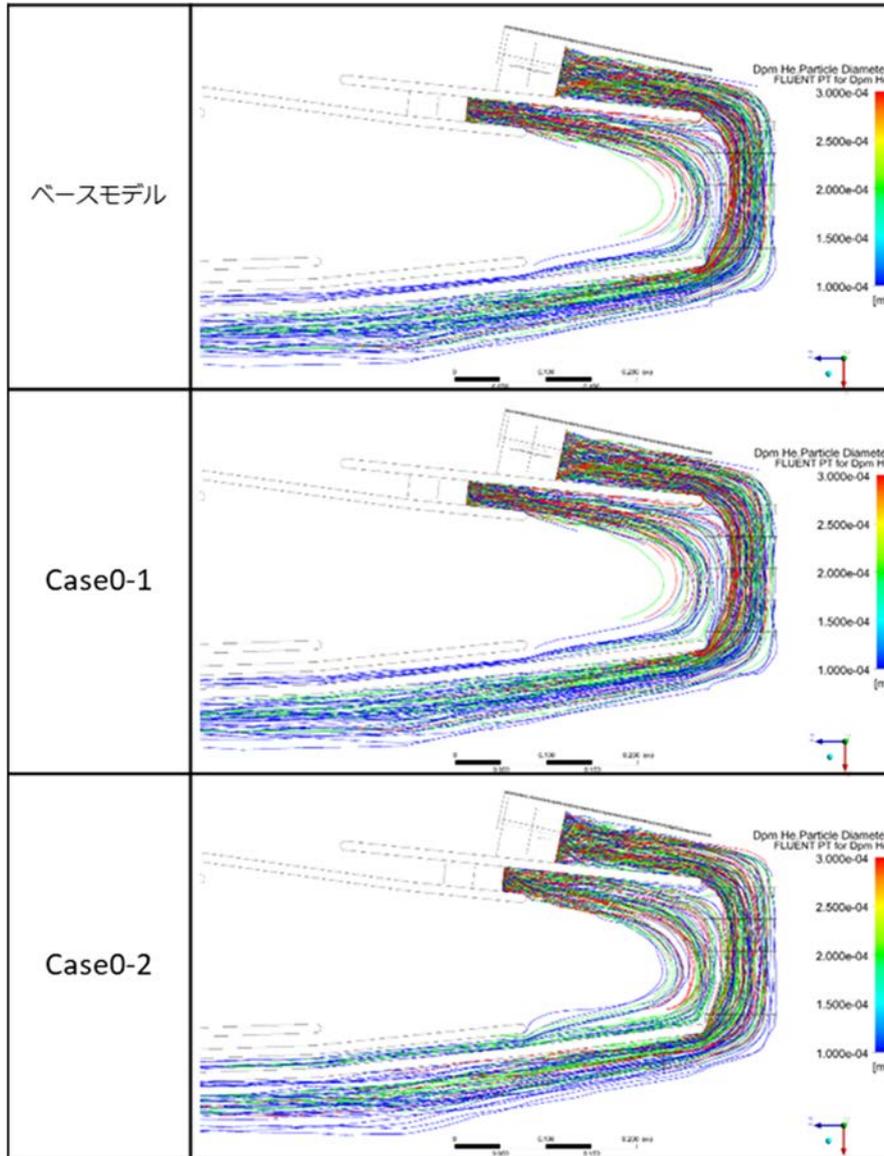


Fig. 3-58 気泡軌跡

・気泡質量密度分布

Fig. 3-41 及び Fig. 3-42 に示す断面位置において、気泡質量密度分布を Fig. 3-59～Fig. 3-66 に示す。

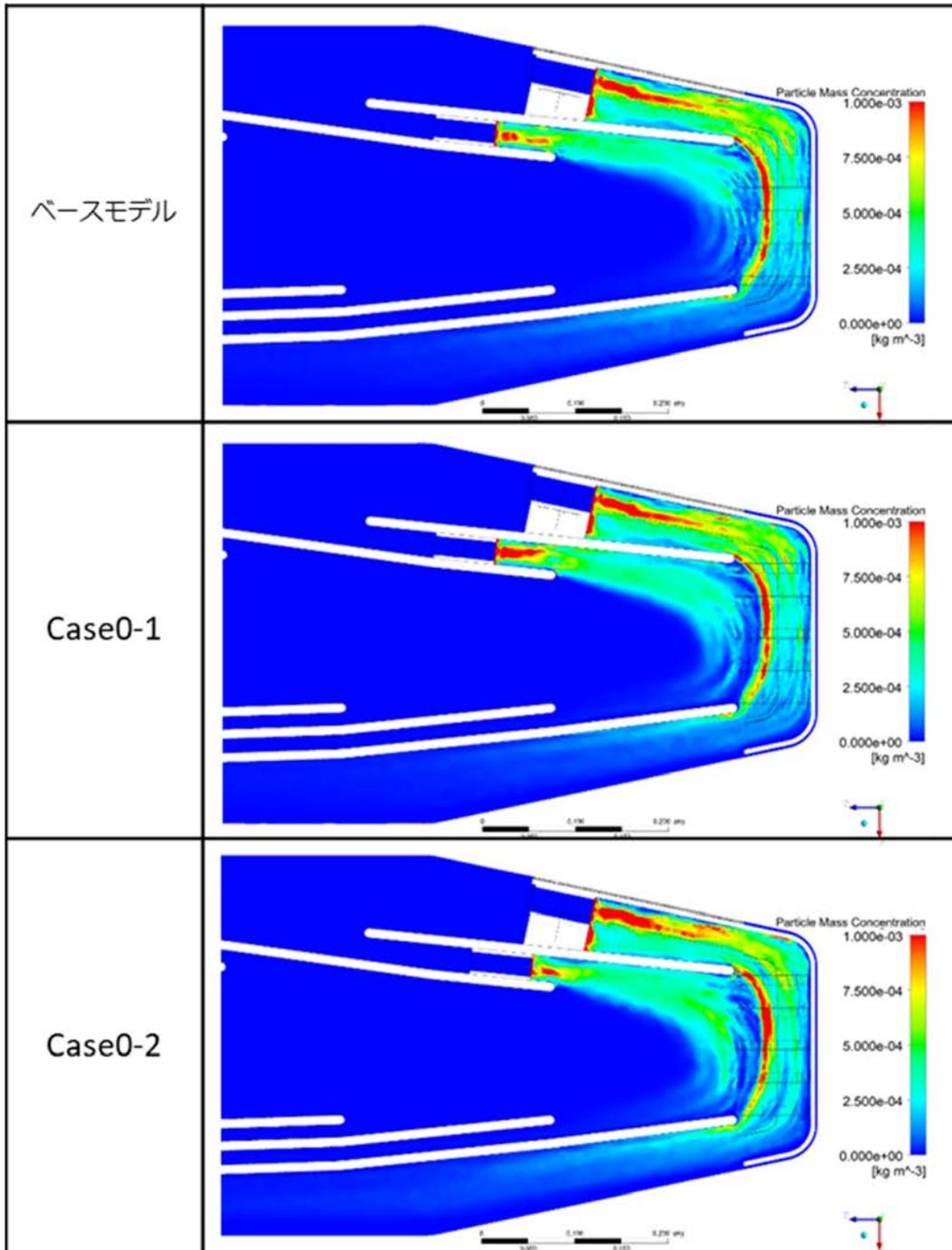


Fig. 3-59 水銀 気泡質量密度分布 断面1(高さ方向中央)
 コンターレンジ : $0 \sim 1 \times 10^{-3} \text{ [kg/m}^3\text{]}$

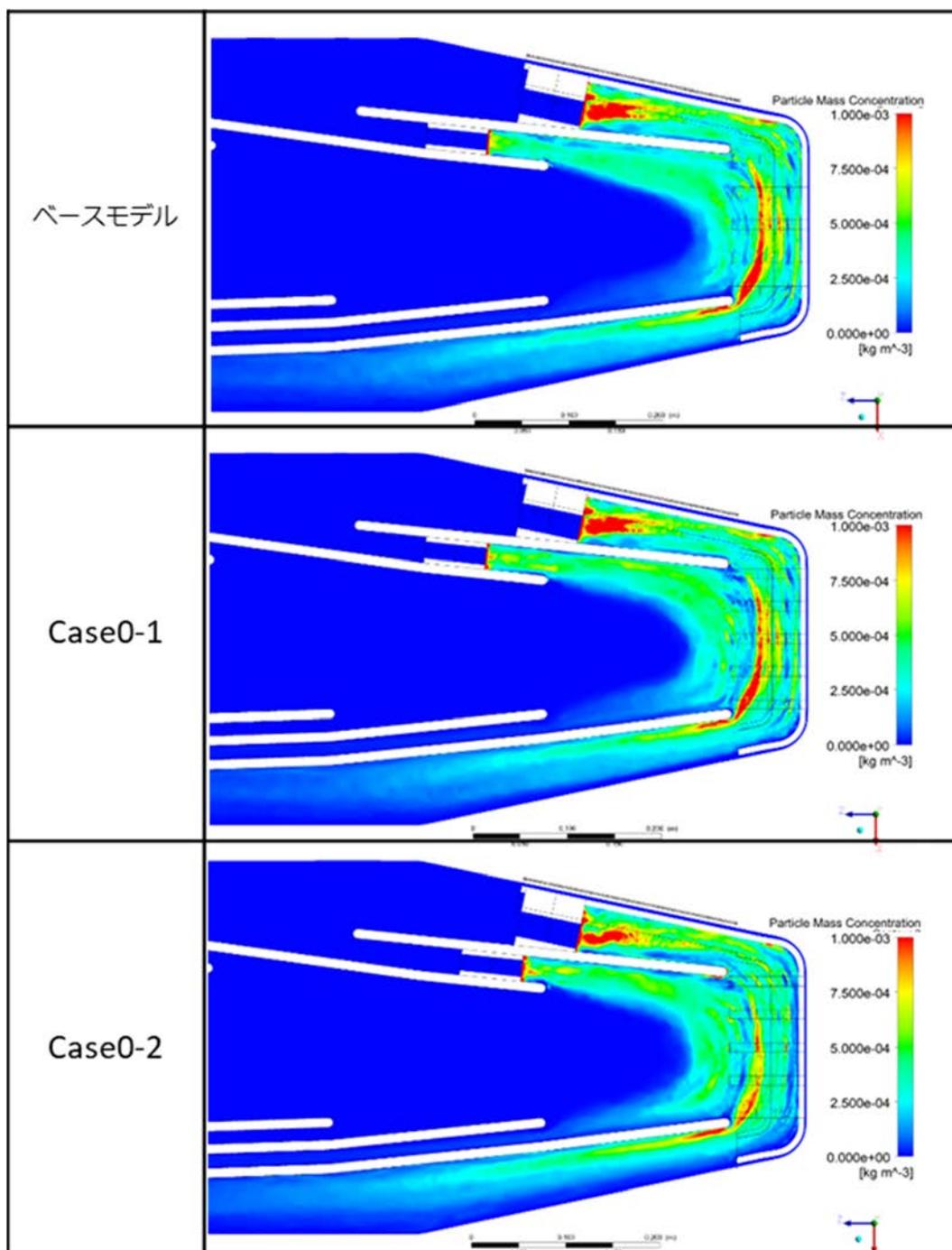


Fig. 3-60 水銀 気泡質量密度分布 断面2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)
 コンターレンジ : 0 ~ 1 × 10⁻³ [kg/m³]

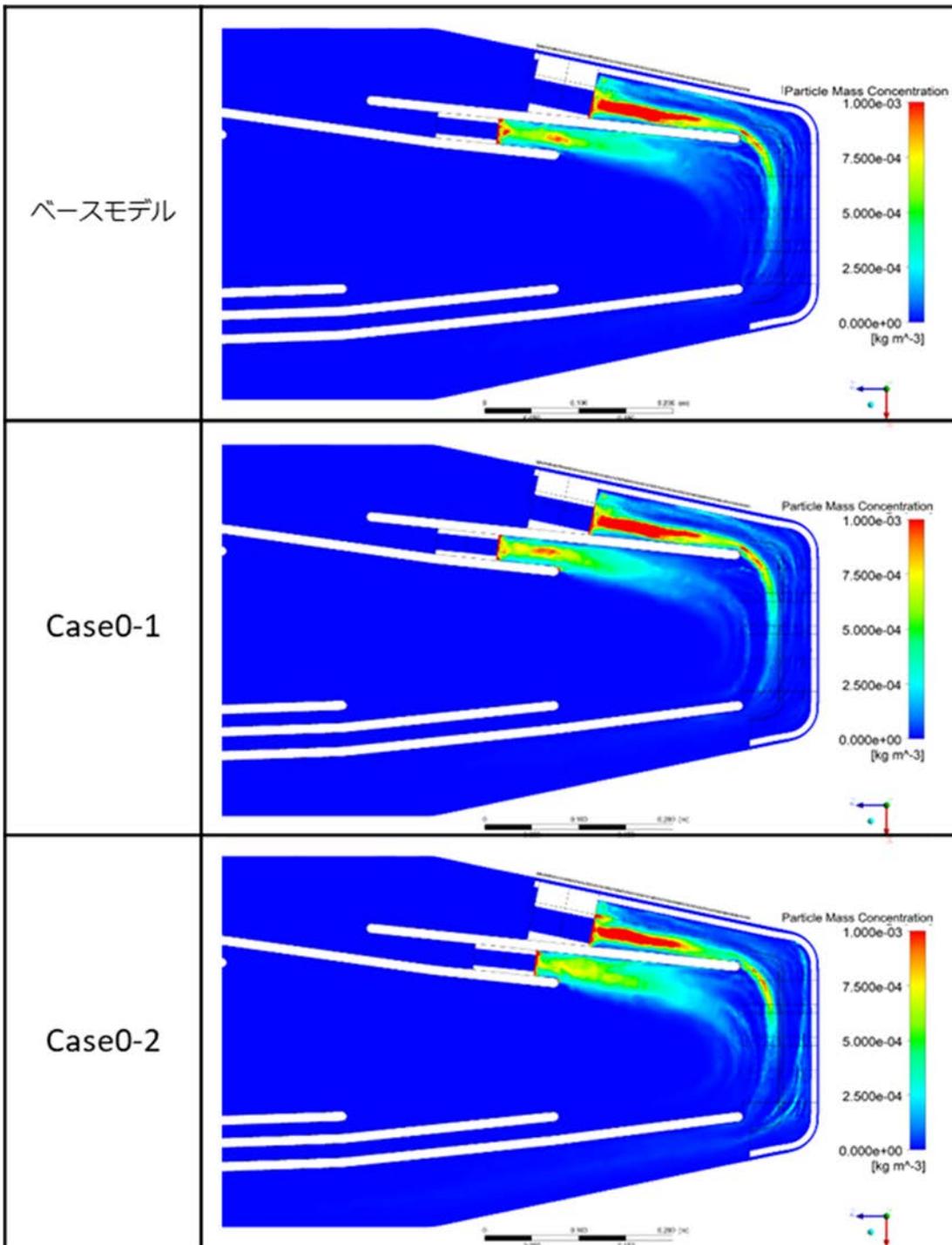


Fig. 3-61 水銀 気泡質量密度分布 断面3 (高さ方向中央から20.5mm 下)
 コンターレンジ : $0 \sim 1 \times 10^{-3} [\text{kg/m}^3]$

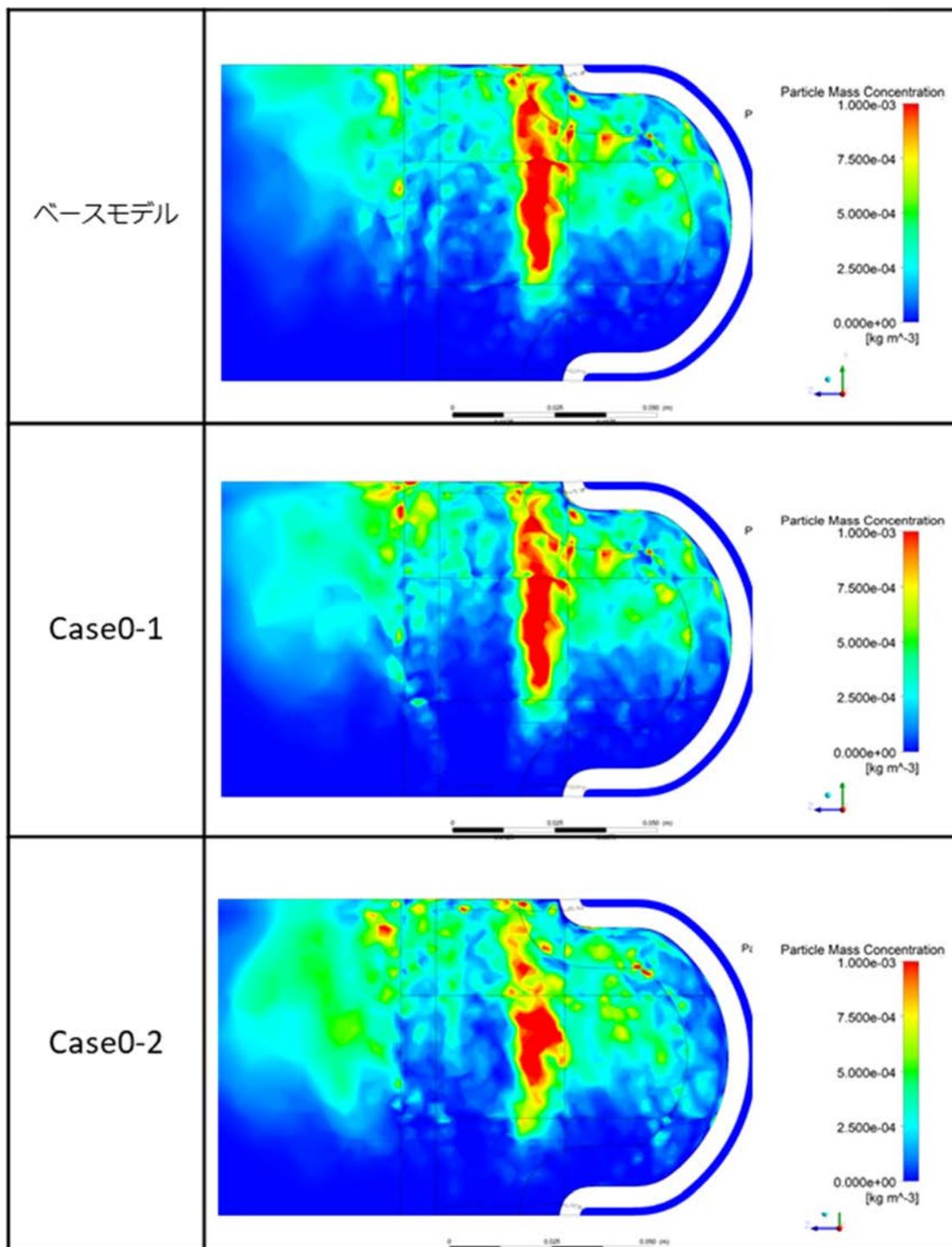


Fig. 3-62 水銀 気泡質量密度分布 断面4(幅方向中央)
 コンターレンジ : $0 \sim 1 \times 10^{-3}$ [kg/m³]

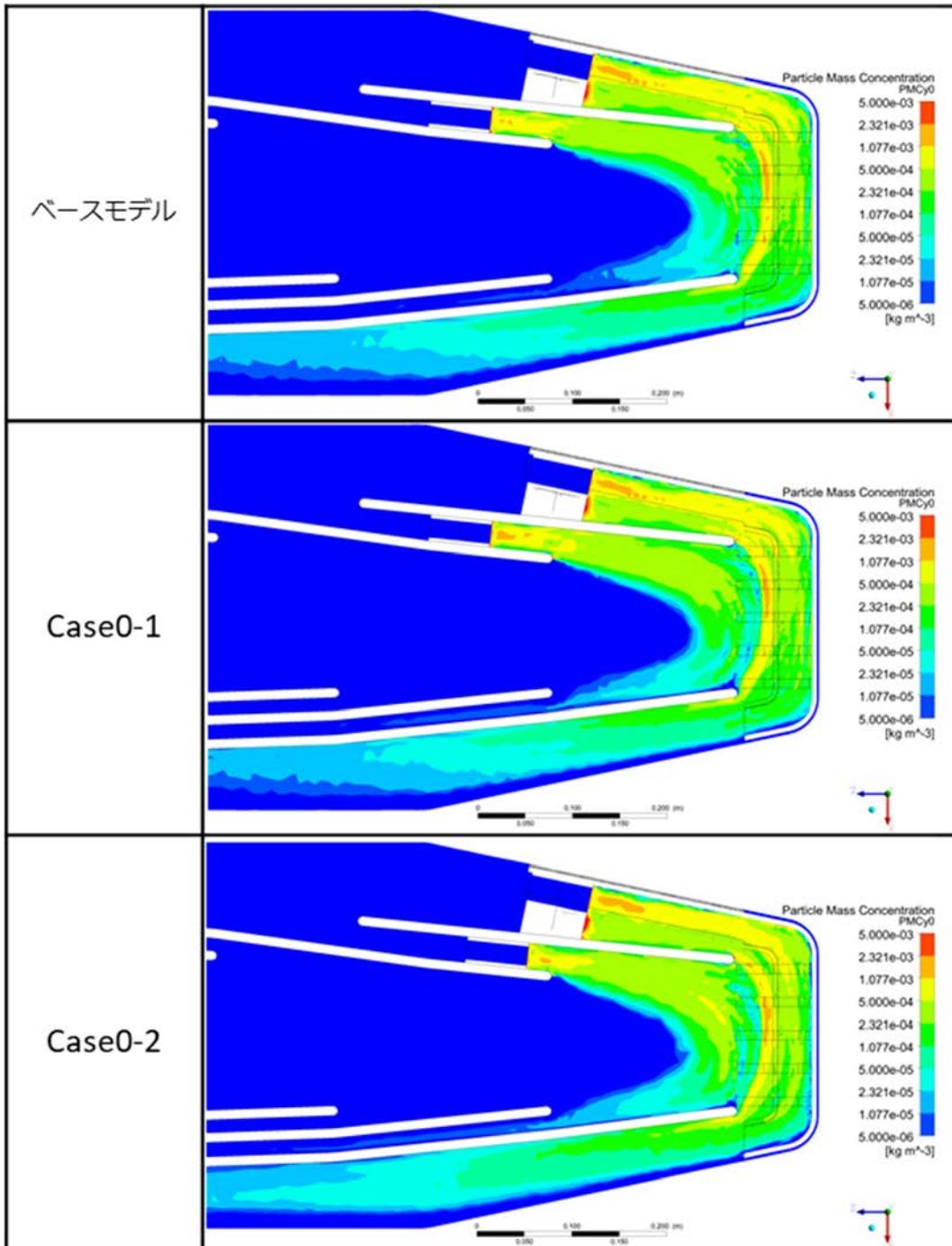


Fig. 3-63 水銀 気泡質量密度分布 断面1(高さ方向中央)
 コンターレンジ : $5 \times 10^{-6} \sim 5 \times 10^{-3} [\text{kg/m}^3]$ 、対数表示

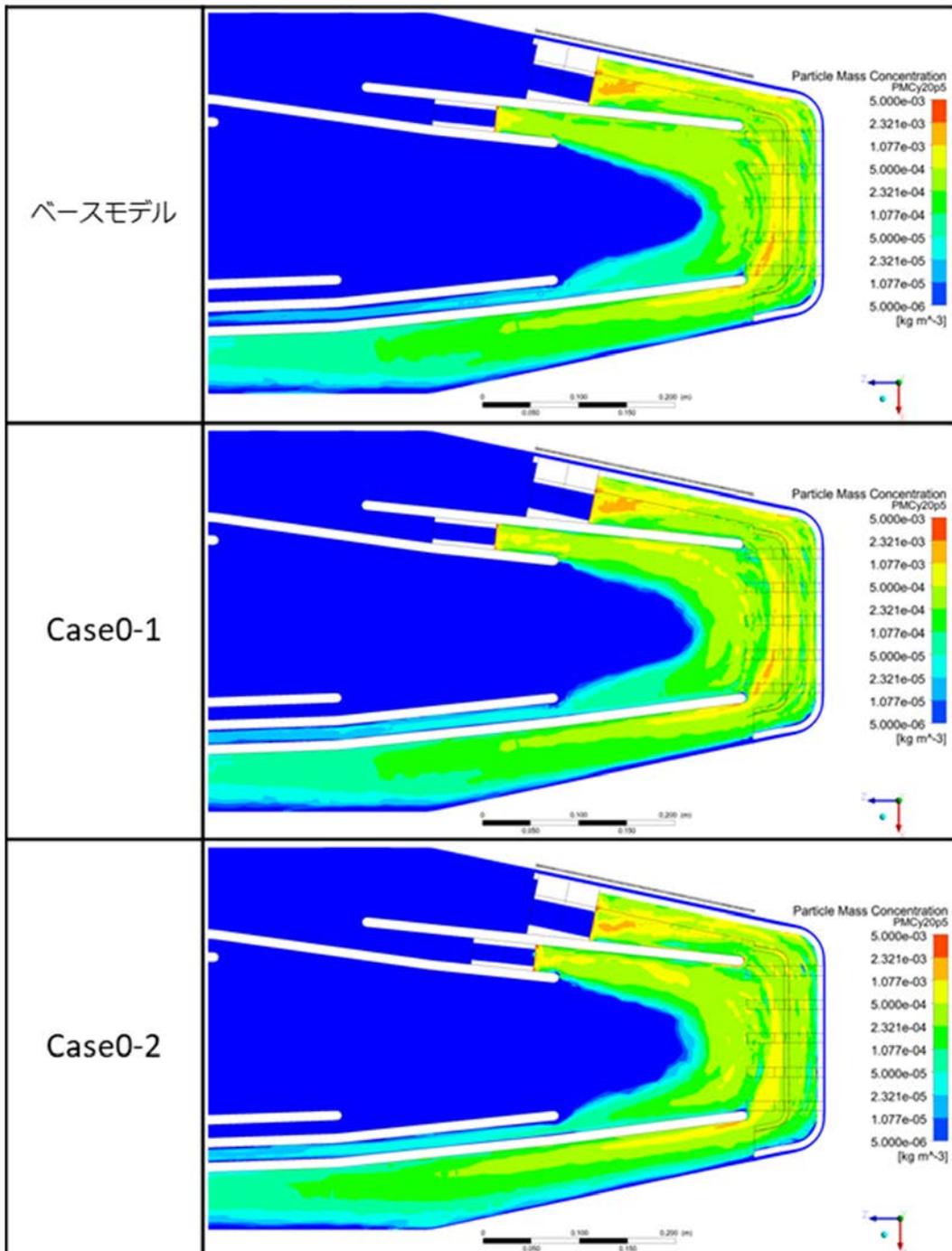


Fig. 3-64 水銀 気泡質量密度分布 断面 2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)
 コンターレンジ : $5 \times 10^{-6} \sim 5 \times 10^{-3} \text{ [kg/m}^3\text{]}$ 、対数表示

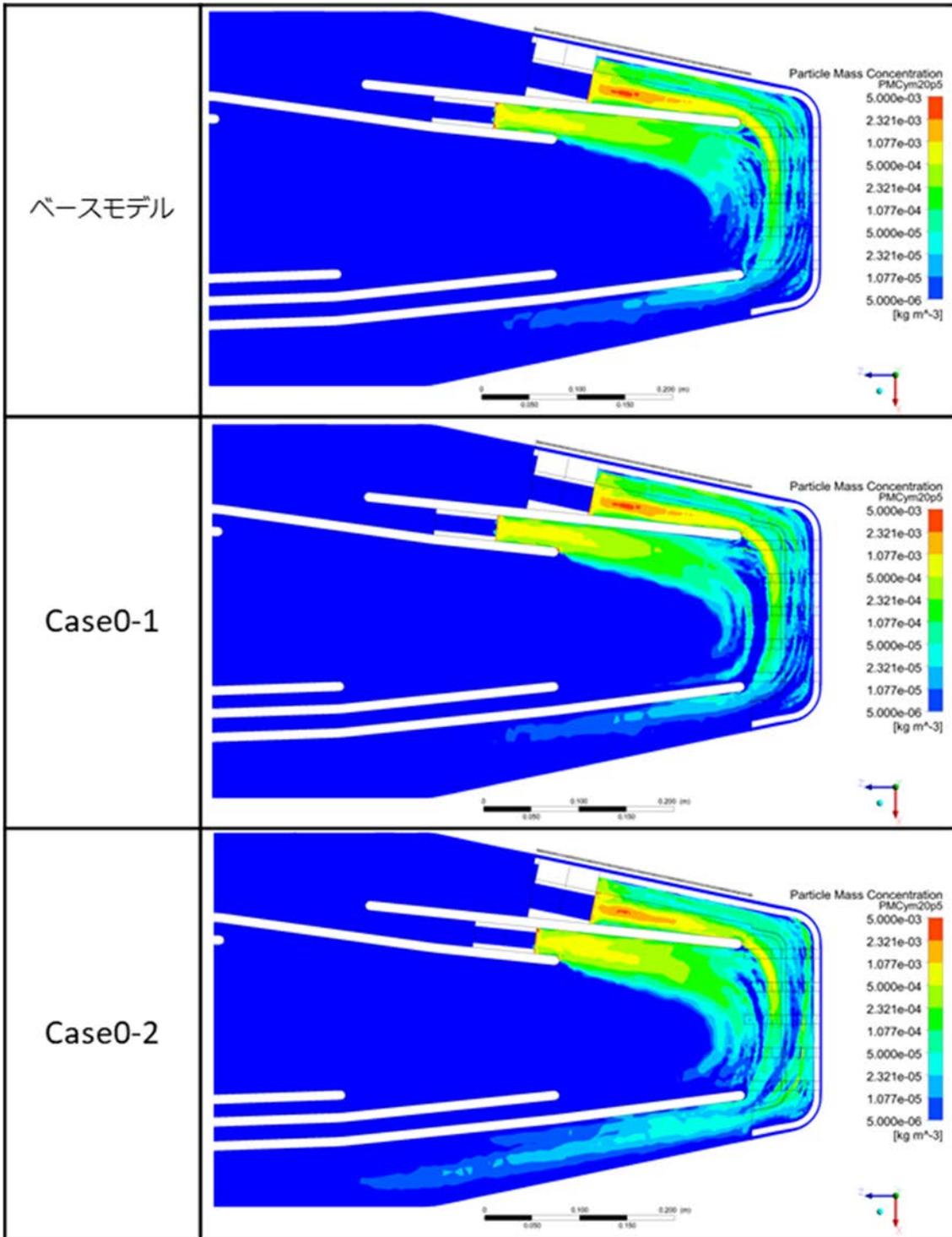


Fig. 3-65 水銀 気泡質量密度分布 断面3(高さ方向中央から20.5mm下)
 コンターレンジ : $5 \times 10^{-6} \sim 5 \times 10^{-3} [\text{kg/m}^3]$ 、対数表示

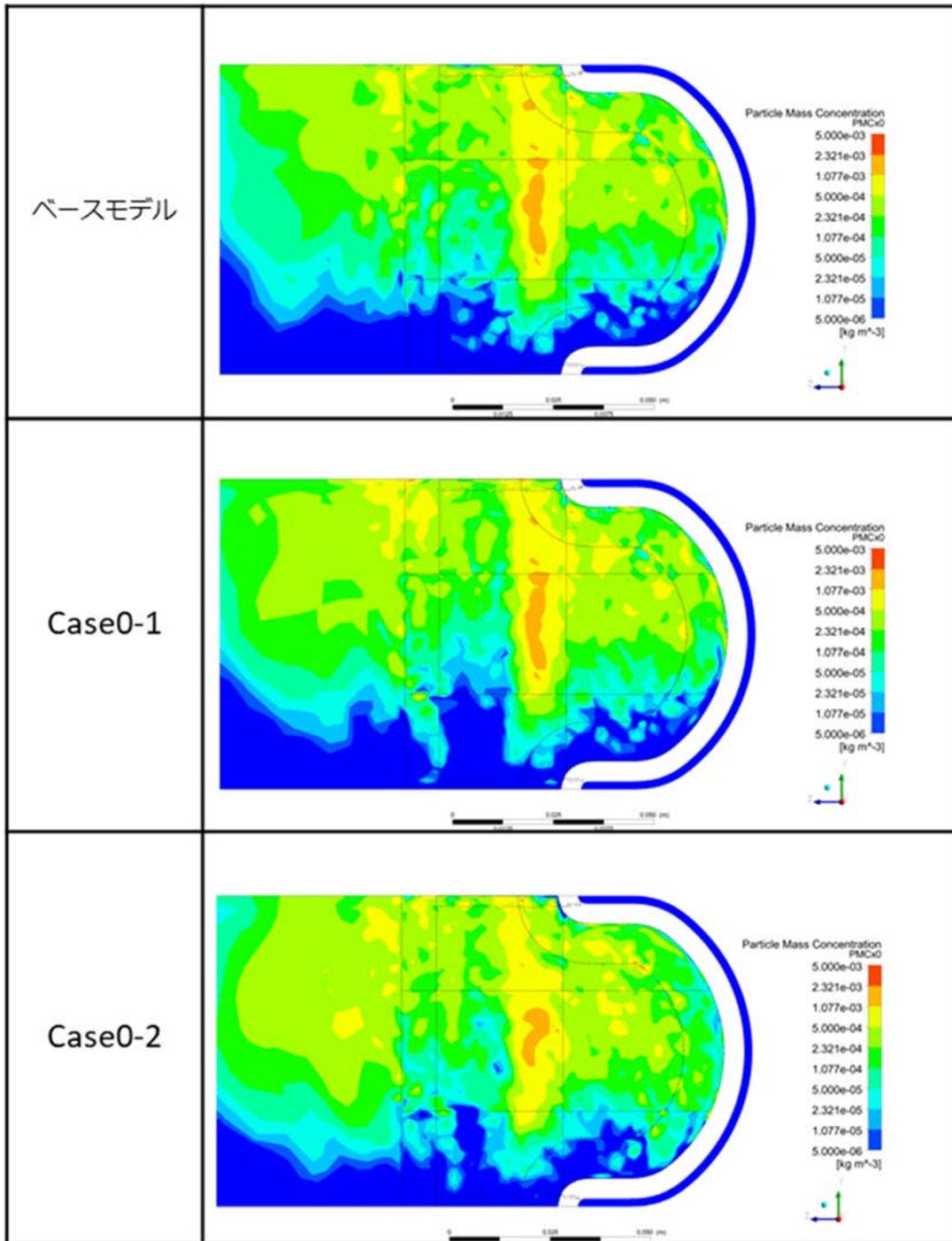


Fig. 3-66 水銀 気泡質量密度分布 断面4(幅方向中央)
 コンターレンジ: $5 \times 10^{-6} \sim 5 \times 10^{-3} \text{ [kg/m}^3\text{]}$ 、対数表示

・気泡率評価

水銀容器ビーム窓部における気泡率を Fig. 3-67～Fig. 3-69 に示す領域で評価した。評価領域 7,8,9 は壁面から法線方向に 10 mm この気泡率をボイド率とし、Eq. 13 の様に定義した。

$$\text{気泡率} = \frac{\text{気泡粒子が占める体積}}{\text{評価領域の体積}} \quad \text{Eq. 13}$$

更に、Fluent で出力される物理量が気泡の質量密度であることから Eq. 13 を評価する為、等価な Eq. 14 で気泡率の評価を実施した。

$$\text{気泡率} = \frac{\text{評価領域における気泡の質量密度の体積平均}}{\text{気泡の密度物性値}} \quad \text{Eq. 14}$$

各々の評価領域での気泡率を Table 3-19～Table 3-22 及び Fig. 3-70～Fig. 3-73 に示した。

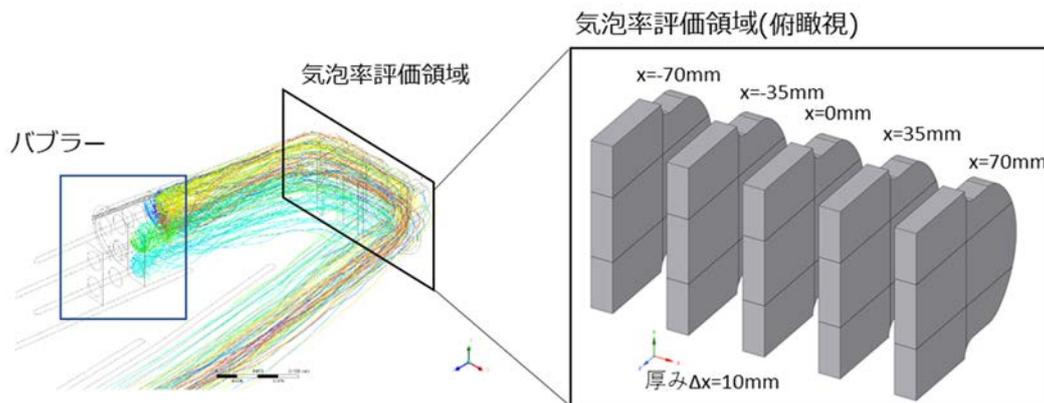


Fig. 3-67 気泡率評価領域(俯瞰視)

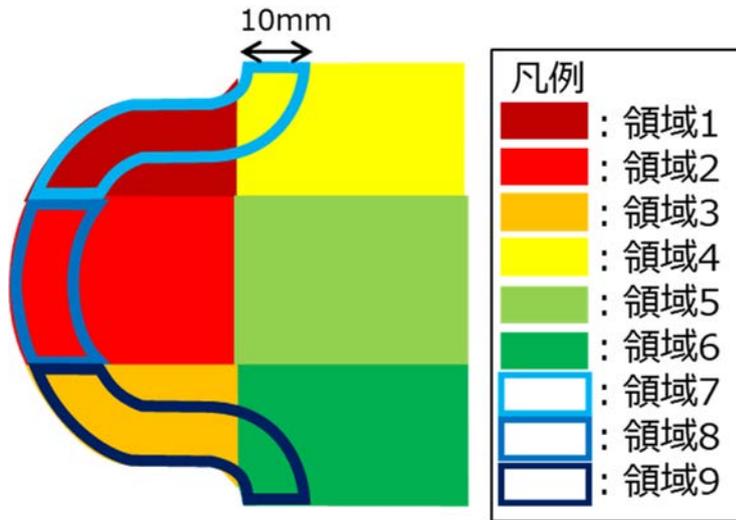
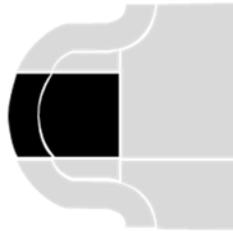


Fig. 3-68 気泡率評価領域(側面視)

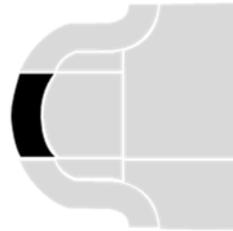
A) 1+2+3+7+8+9



B) 2+8



C) 8



D) 1+2+3+4+5+6+7+8+9

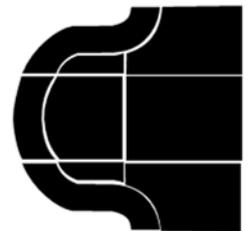


Fig. 3-69 気泡率評価領域定義

Table 3-19 評価領域 A の気泡率

	x=-70mm	x=-35mm	x=0mm	x=35mm	x=70mm
ベースモデル	0.001359	0.001328	0.001367	0.001314	0.001063
Case0-1	0.001364	0.001329	0.001367	0.001317	0.001064
Case0-2	0.001356	0.001262	0.00129	0.001254	0.001029

Table 3-20 評価領域 B の気泡率

	x=-70mm	x=-35mm	x=0mm	x=35mm	x=70mm
ベースモデル	0.001762	0.001551	0.00145	0.001297	0.001081
Case0-1	0.001769	0.001552	0.001449	0.001301	0.001084
Case0-2	0.001818	0.001599	0.001537	0.001392	0.001081

Table 3-21 評価領域 C の気泡率

	x=-70mm	x=-35mm	x=0mm	x=35mm	x=70mm
ベースモデル	0.000936	0.000999	0.001025	0.001031	0.000916
Case0-1	0.000932	0.001	0.001026	0.001039	0.000918
Case0-2	0.000919	0.00093	0.000894	0.000725	0.000482

Table 3-22 評価領域 D の気泡率

	x=-70mm	x=-35mm	x=0mm	x=35mm	x=70mm
ベースモデル	0.001742	0.001681	0.001572	0.001566	0.001534
Case0-1	0.001705	0.001577	0.001553	0.001533	0.001485
Case0-2	0.001608	0.001599	0.001505	0.00147	0.001454

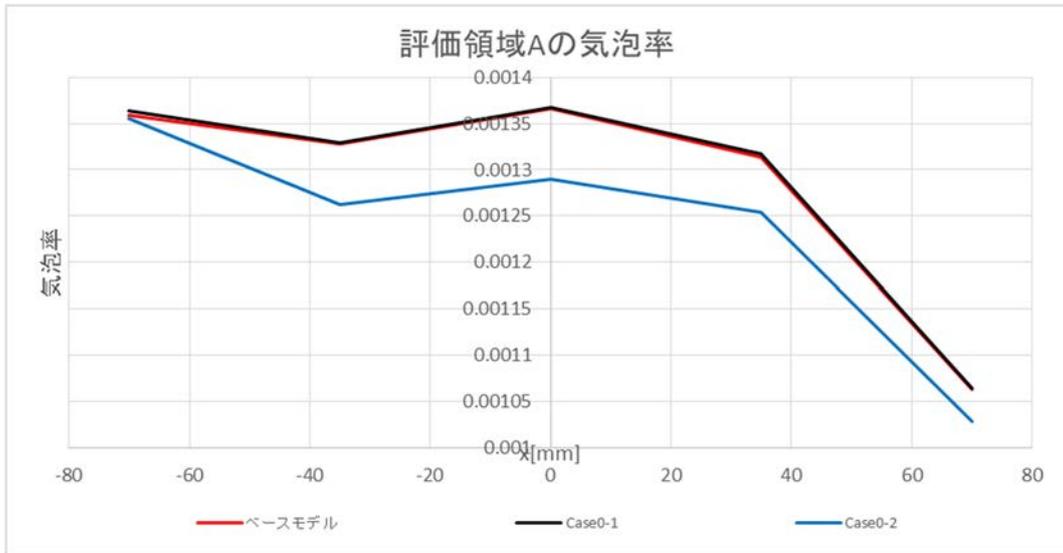


Fig. 3-70 評価領域 A の気泡率グラフ

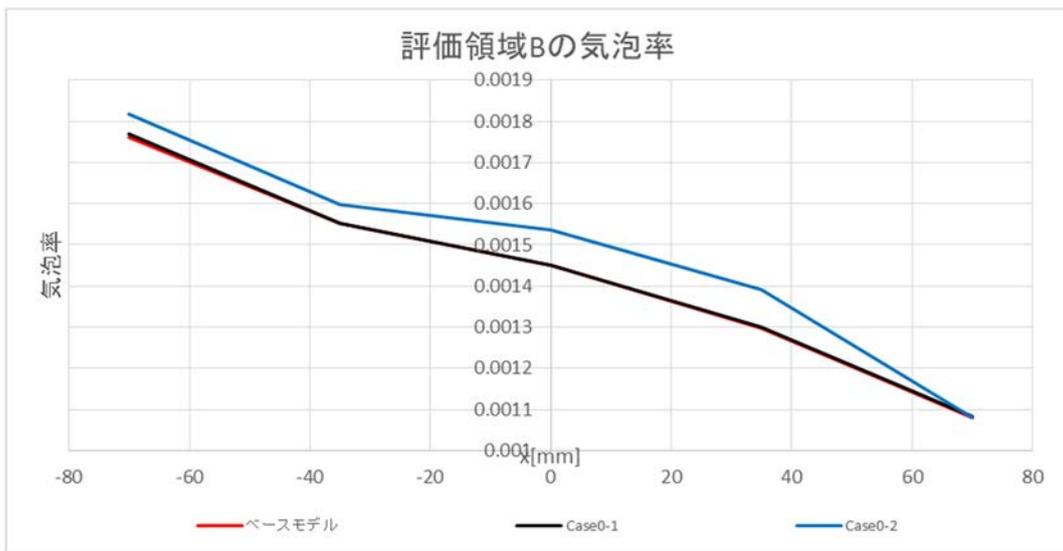


Fig. 3-71 評価領域 B の気泡率グラフ

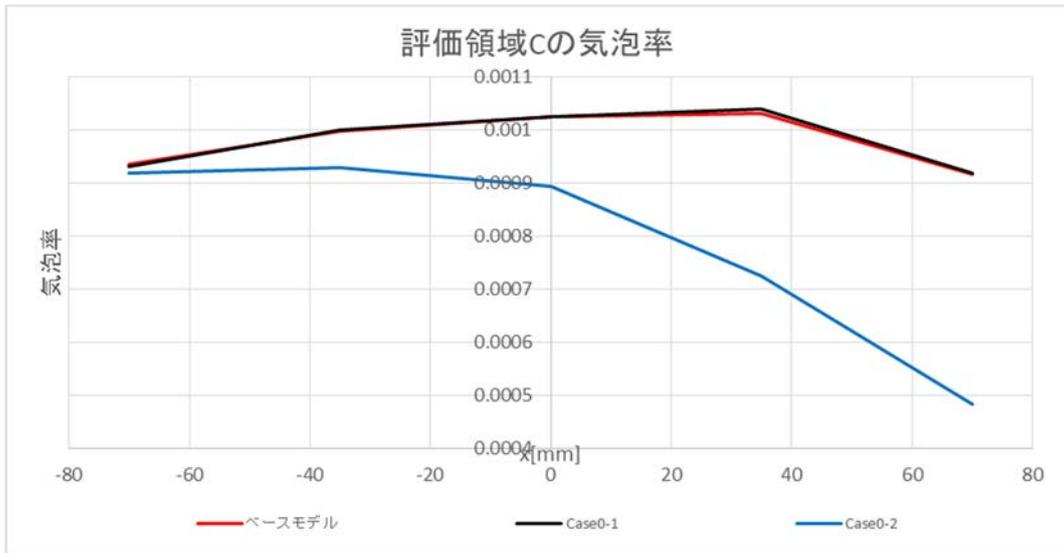


Fig. 3-72 評価領域 C の気泡率グラフ

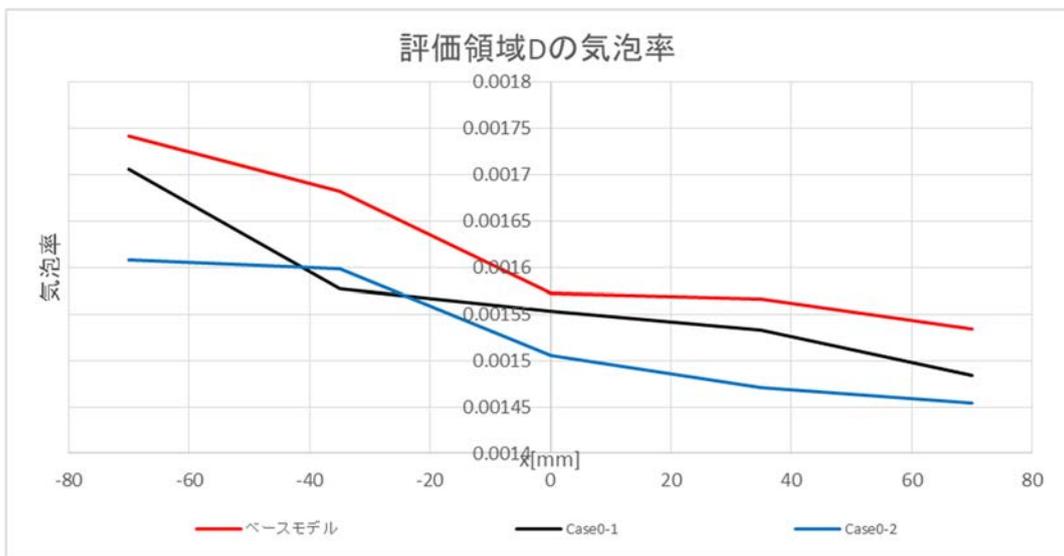


Fig. 3-73 評価領域 D の気泡率グラフ

3.1.6 事前解析考察

Fig. 3-73 に示すように、標的容器先端全体の評価領域である領域 D において、ベースモデルの気泡率が最も高い。Fig. 3-74 にバブラー及び評価領域 D を含むビーム窓部周辺で気泡質量密度分布を評価結果の比較を示す。ベースモデルで、バブラーB2 から出た気泡が評価領域 D まで届いたことによる気泡質量密度が最も高くなっている。Case0-1 及び Case0-2 ではバブラーB2 群の合成した旋回方向によりビーム窓から離れる水銀流速成分が強くなるため、ベースモデルに比べて評価領域 D まで気泡が届きにくくなっていると考えられる。

また、評価領域 D 付近のベースモデルの流速ベクトルに x 方向の流速で色を付け Fig. 3-75 に表示した。この結果を基に、x 方向の流速の等高線をベースモデル、Case0-1 及び Case0-2 で重ねて Fig. 3-76 に表示した。Fig. 3-76 に示すように、バブラーB2 をビーム窓に近づけた Case0-2 では、 $V_x=0.10\text{m/s}$ 及び 0.15m/s の等高線表示に置いて、若干ではあるが x 方向の流速の大きい領域が z 方向に広いことがわかる。これにより、Case0-2 では気泡が評価領域 D に届く前に x 方向に広がり、評価領域 D での気泡質量密度が 3 ケース中で最も低くなったと考えられる。

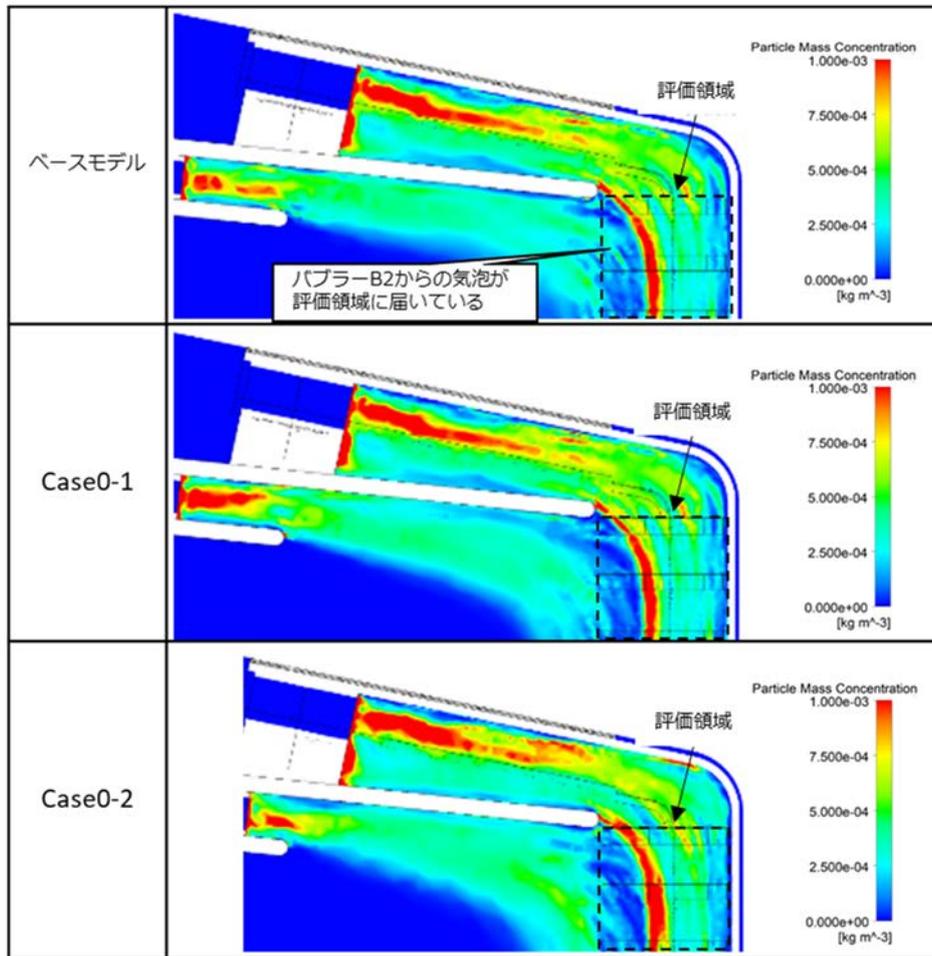


Fig. 3-74 ビーム窓部付近の質量気泡密度分布

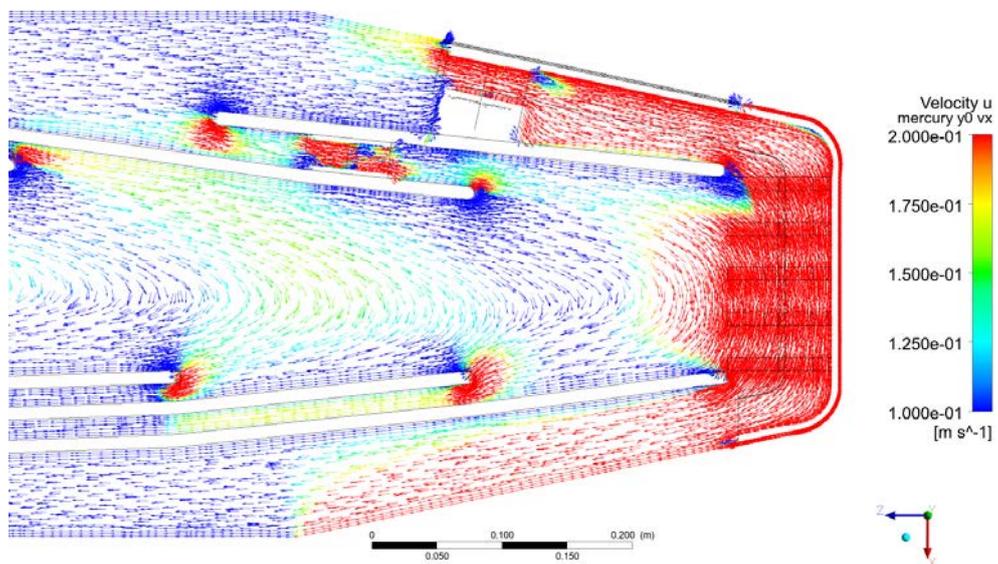


Fig. 3-75 ベースモデルの x 方向速度分布

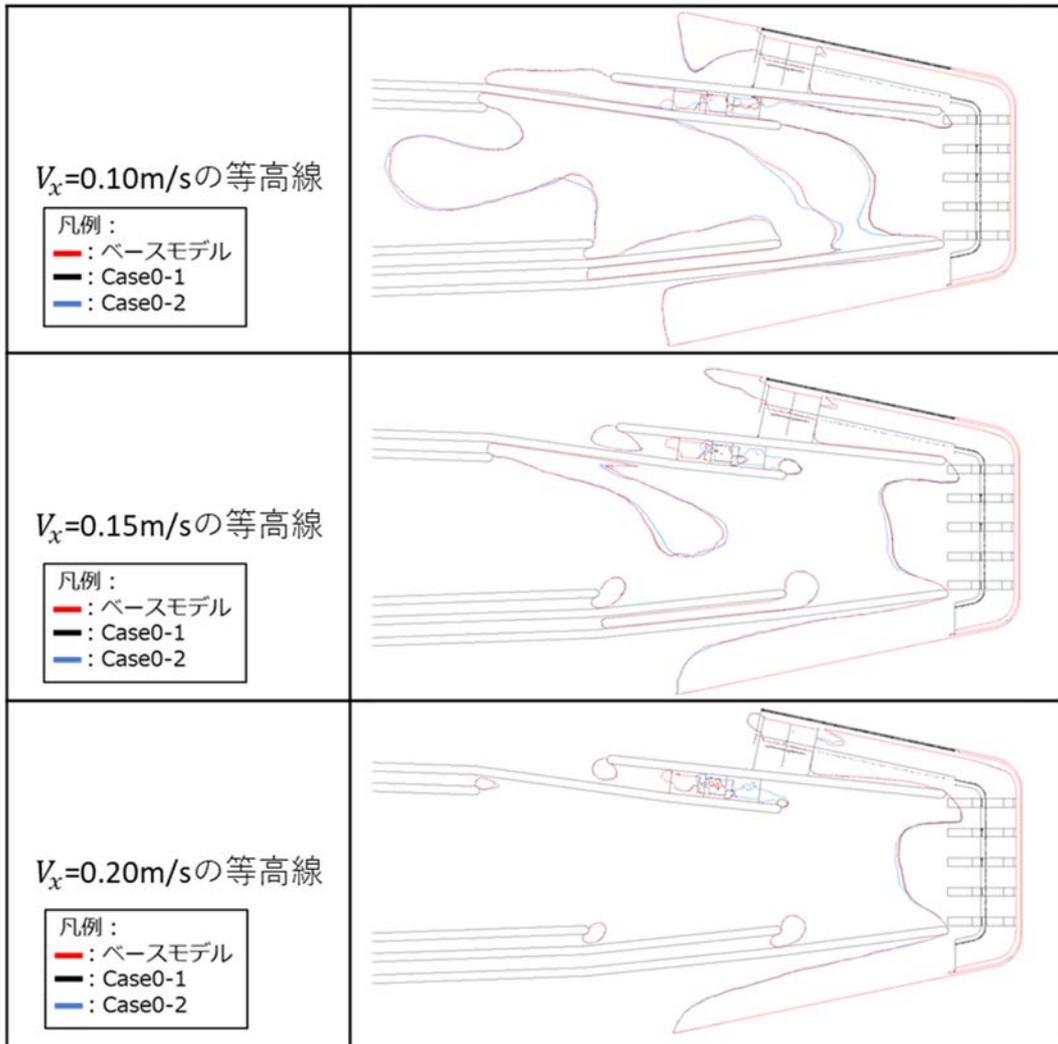


Fig. 3-76 各モデルの x 方向流速の等高線比較

3.1.7 事前解析まとめ

Fig. 3-70～Fig. 3-73 を比較し、ベースモデルの気泡率が最も良かったため、機械学習データの生成はベースモデルを基にモデルを変更し、実施することとした。

3.2 機械学習データの生成

3.2.1 概要

機械学習を実施するための入力データを水銀標的容器内部の気泡を含んだ水銀の流動解析によって生成する。

Table 1-1 に示す設計変数を変更し、Table 1-2 に示す目的関数及び制約条件がどのように変化するか評価する。設計変数の範囲を Table 3-23 に示す。

3.2.2 設計変数について

・サンプリング

ラテン超方格法サンプリングを用いて、設計変数サンプルの生成を行った。

ラテン超方格法サンプリングは指定した実験数で設計空間を可能な限り均一にサンプリングするように因子の組合せを生成する手法である。その手順を以下に示す(Fig. 3-77)。

ラテン超方格法サンプリング手順 (2 因子例)

1. 因子 x_1, x_2 の範囲をそれぞれ 3 分割して格子空間をつくり、各因子の水準が 1 度ずつ選ばれる組み合わせを生成する。
 2. 格子セルを等分割し、いずれかにサンプリングデータを割り当てる。
 3. 各行と各列で重複のないサンプリング点を新たに追加する。
- *. 以降、2 と 3 の繰り返し

D1=27.5、D2=21.0 として、形状 1(p.82 にて後述)に対する 250 ケースのサンプリング結果例を Fig. 3-78～Fig. 3-80 に示す。いずれも設計変数空間内を均等にサンプリング出来ている。

Table 3-23 設計変数範囲

	バブラーB1		バブラーB2		抵抗係数
	絞り部内径 D _e 1	旋回羽根角度 θ1	絞り部内径 D _e 2	旋回羽根角度 θ2	
最大値	入口内径 D1	75	入口内径 D2	75	30
最小値	D1/2	55	D2/2	55	5

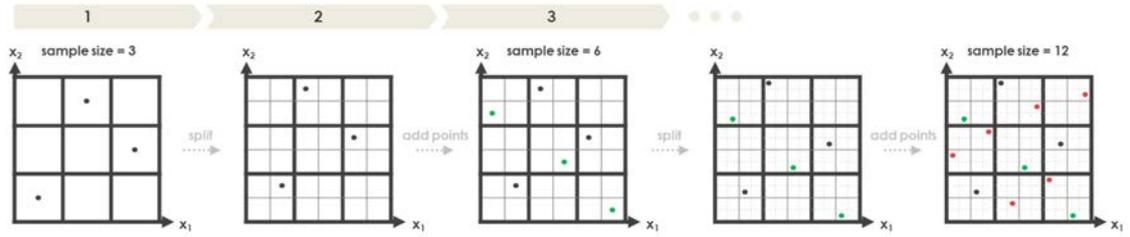


Fig. 3-77 ラテン超方格法サンプリング手順

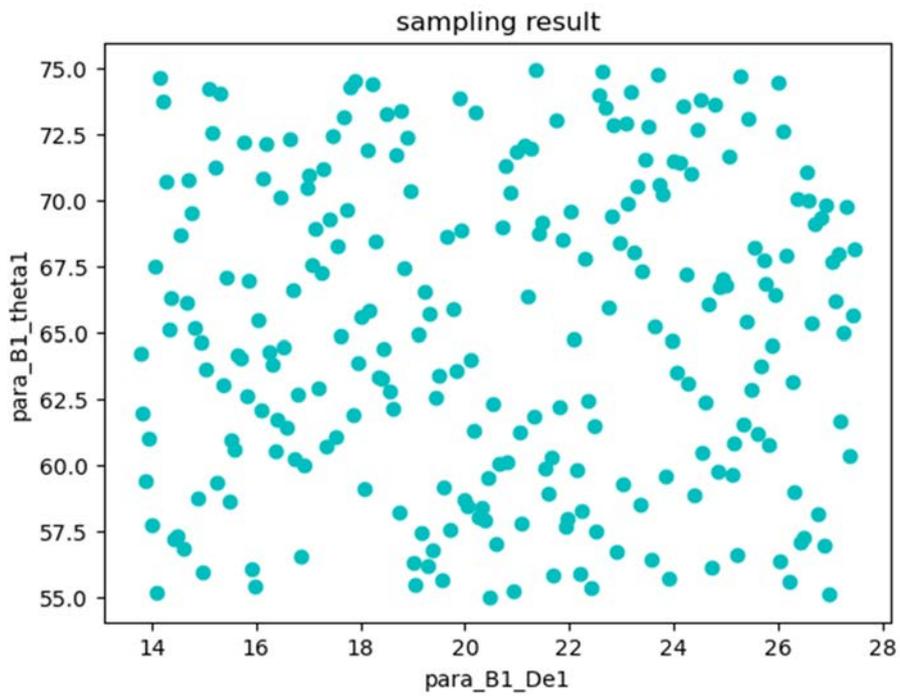


Fig. 3-78 サンプリング結果(θ_1 と D_{e1})

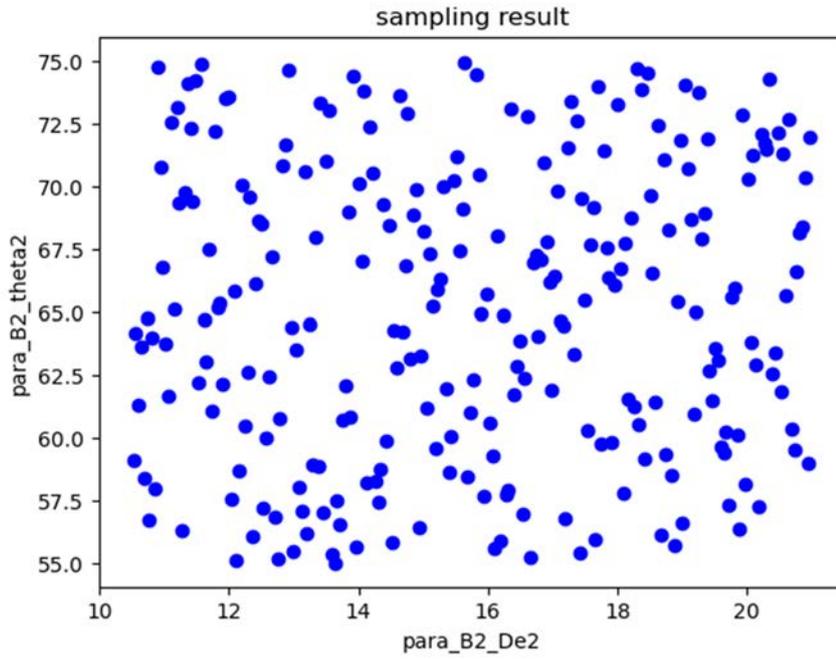


Fig. 3-79 サンプリング結果(θ_2 と D_{e2})

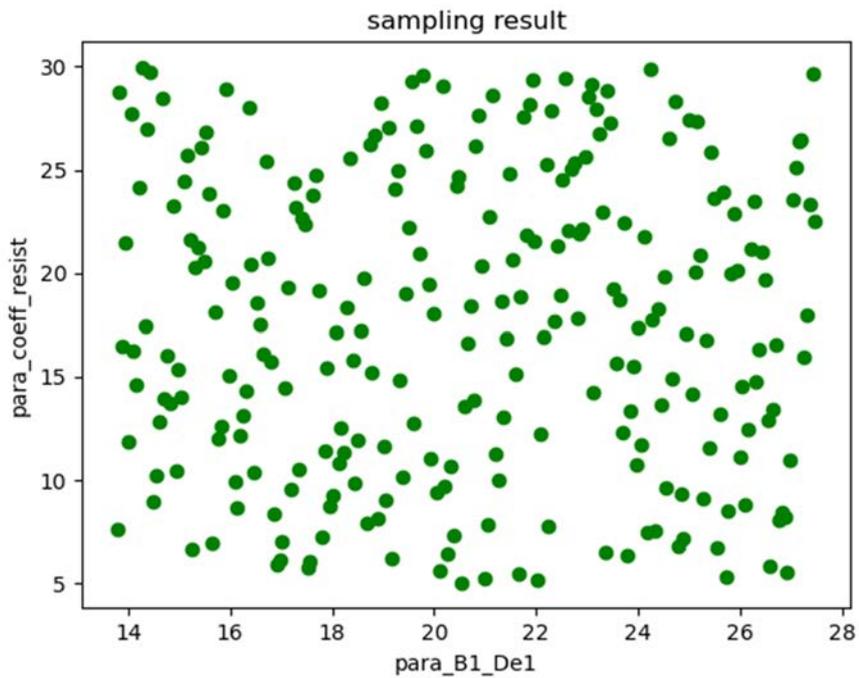


Fig. 3-80 サンプリング結果(抵抗係数と D_{e1})

本件では、ラテン超方格法サンプリングを用いて設計変数をサンプリングするためのプログラムを用いた。プログラムの実装には、オープンソースツールの SMT ライブラリ⁶⁾の機能を利用した。

・解析用データ生成手順

サンプリングした設計変数の組から、機械学習データの生成のための目的関数、制約条件の値を評価するフローを Fig. 3-81 に示す。これにより、設計変数の組を基に機械学習データを生成した。

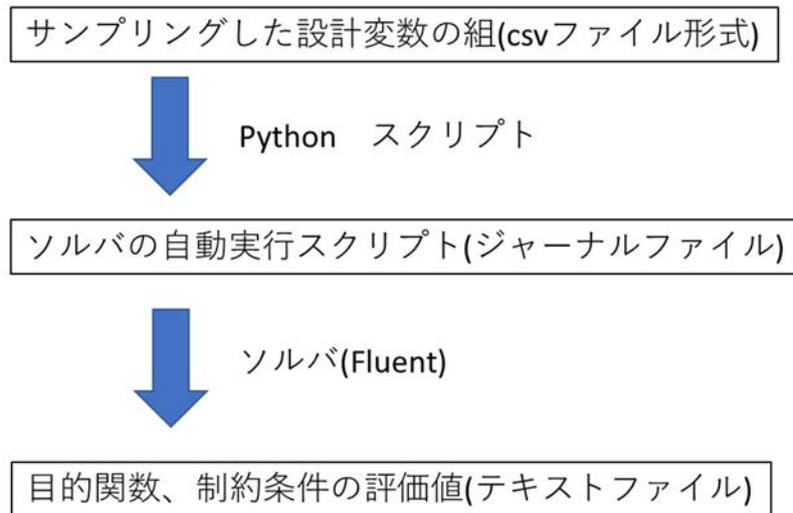


Fig. 3-81 機械学習データの生成手順

3.2.3 設計変数と解析モデル

・設計変数のモデル化方法

最適化を実施する設計変数を変更した際に、解析モデルへの反映方法を Table 3-24 に示す。メッシュ変更としたものは設計変数の変更に伴い、モデル形状を変更してモデルに反映させたものである。また、パラメータ変更としたものは境界条件パラメータを変更し、モデルへ反映させたものである(Table 3-25)。Cd と D, D_e , θ の関係を「D, D_e , θ とバブラー境界条件(圧力損失係数)」に、旋回流と θ の関係を「 θ とバブラー境界条件(旋回流)」に示した。

Fig. 3-82 で示した A-A'断面において、バブラーに設けた Porous Jump BC の位置を Fig. 3-83 に示した。Porous Jump BC に設定する Cd と設計変数 D, D_e , θ の関係を p.80 に示す。

バブラーに設けた Fan BC の位置を Fig. 3-83 に示した。バブラー内の軸方向平均速度(V_L)からバブラー内(径が D の部分)の最外周の周方向速度(V_ϕ)を Fan BC で設定するが、 V_L と V_ϕ と設計変数 θ の関係を p.81 に示す。

Table 3-24 最適化を実施する設計変数とモデル化方法

最適化箇所	最適化する項目	モデル化方法
バブラーB1	位置	メッシュ変更
	入口内径(D1)	パラメータ変更
	絞り部内径(D_{e1})	パラメータ変更
	旋回羽根角度(θ_1)	パラメータ変更
バブラーB2	入口内径(D2)	パラメータ変更
	絞り部内径(D_{e2})	パラメータ変更
	旋回羽根角度(θ_2)	パラメータ変更
案内羽根	案内羽根角度(Θ)	メッシュ変更
圧損要素	抵抗係数	パラメータ変更

Table 3-25 バブラーの境界条件と設計変数との依存性

	境界条件パラメータ	依存する設計変数
バブラーB1	圧力損失係数(C_D)	D1, D_{e1} , θ_1
	旋回流	θ_1
バブラーB2	圧力損失係数(C_D)	D2, D_{e2} , θ_2
	旋回流	θ_2



Fig. 3-82 断面位置

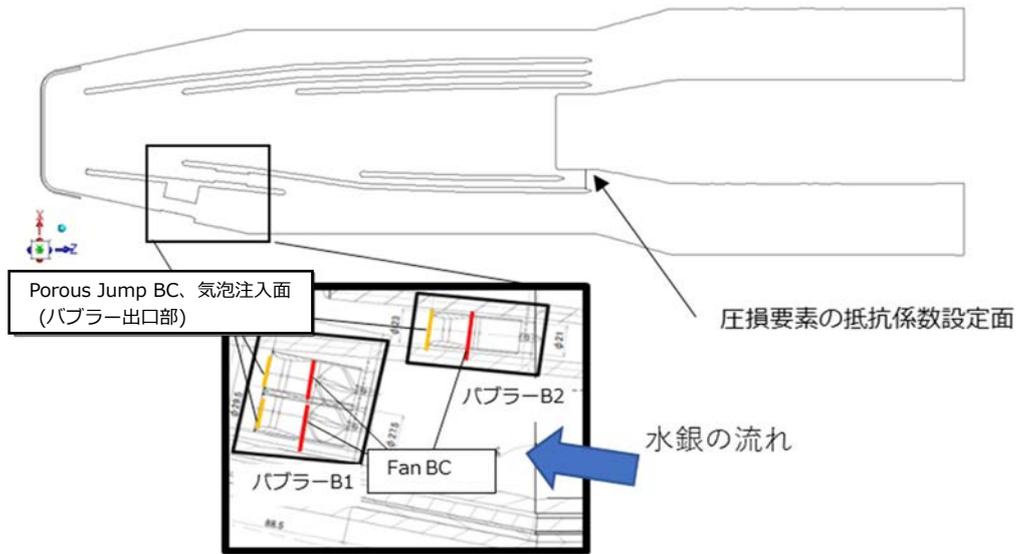


Fig. 3-83 設計変数が関連する境界条件位置

・ D , D_e , θ とバブラー境界条件(圧力損失係数)

バブラーの Porous Jump BC に設定した C_d と設計変数の関係を示す。設計変数 D , D_e 及びファンハブ直径(h)を Fig. 3-84 に示す。

バブラー部に設けた Porous Jump BC の C_d と D , D_e , θ を Eq. 15 で関係づける。Eq. 15 中の h は Eq. 16 で定義される。Eq. 15 の関係を Porous Jump BC で設定した。バブラー-B1、B2 とともに同じ方法で設定した。

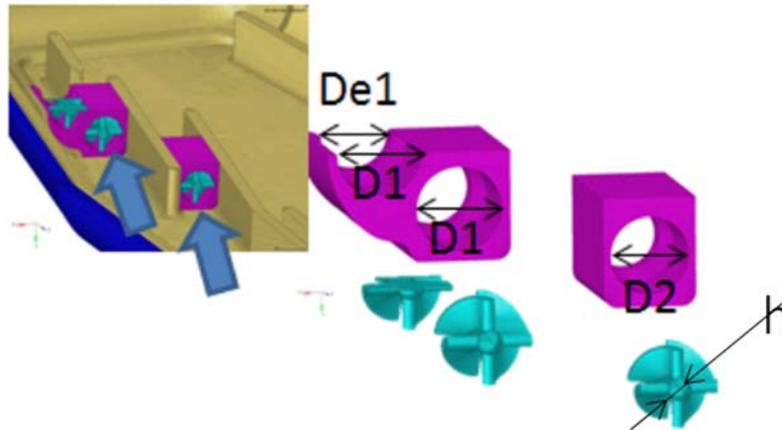


Fig. 3-84 D, De, h の位置

$$C_d = 1.27 \times \left(\frac{0.25495 \times \tan^{1.8617} \theta}{D^{0.6232}} + 6.121 \times \left(\left(\frac{D}{D_e} \right)^2 - 1 \right) \times \tan^{1.8617} \theta \right) \times \left(2.5059 \times \left(\frac{h}{D} \right)^2 + 0.36746 \right) \quad \text{Eq. 15}$$

$$h = 0.2 \times D \quad \text{Eq. 16}$$

• θ とバブラー境界条件(旋回流)

バブラー内の軸方向平均速度(V_L)からバブラー内(径が D の部分)の最外周の周方向速度 (V_ϕ)と設計変数(θ)の関係を示す。Fig. 3-85 にバブラー部の V_L と V_ϕ を示す。

V_L と V_ϕ と設計変数 θ を Eq. 17 で関係づけ、この関係を Fan BC でモデル化した。バブラー B1、B2 とともに同じ方法で設定した。

$$V_\phi = 1.1364 \times \tan \theta \times V_L \quad \text{Eq. 17}$$

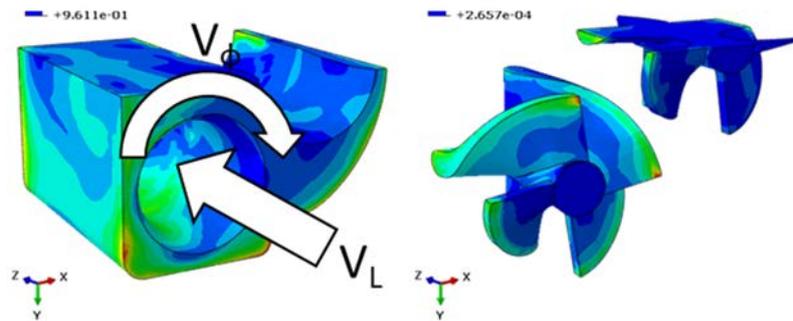


Fig. 3-85 バブラー部の V_L と V_ϕ

・案内羽根角度、バブラーB1位置の変更による形状変更

案内羽根角度及びバブラーB1位置を変更し、4つのCAD形状及びメッシュを作成した。これらを形状1,2,3,4と呼び、各々のバブラー位置と案内羽根角度と入口内径D1,D2の値をTable 3-26に示す。設計変数のバブラーB1位置の定義をFig.3-86に示す。案内羽根角度を変更した場合の水銀容器の形状を(Fig.3-82で示したA-A'断面において)Fig. 3-87及びFig. 3-88に示す。案内羽根角度を変えた場合、バブラーB2の形状も付随して変わる(Fig. 3-89)。形状1~4の水銀容器、バブラーB1、B2位置をFig. 3-90~Fig. 3-93に示す。

また、バブラー入口内径D1,D2は以下のルールに従って決定した。

D1:仮想直径Dv1を $Dv1=D1+2\text{ mm}$ と定義し、それを3個配置した場合に、隣り合うバブラーとの距離が1.5mm以上となる最大D1

D2:仮想直径Dv2を $Dv2=D2+2\text{ mm}$ と定義し、それを3個配置した場合に、隣り合うバブラーとの距離が3.0mm以上となる最大D2

なお、形状1のバブラーB1位置、案内羽根角度、D1,D2の大きさは事前解析のベースモデルと同じである。

Table 3-26 各形状のバブラー位置と案内羽根角度と入口内径D1,D2

形状名	バブラーB1位置	案内羽角度	入口内径 D1	入口内径 D2
1	108.4	6°	27.5 x3	21.0 x3
2	230.0	6°	22.0 x3	21.0 x3
3	230.0	10°	21.0 x3	15.5 x3
4	100.0	10°	23.0 x3	15.5 x3

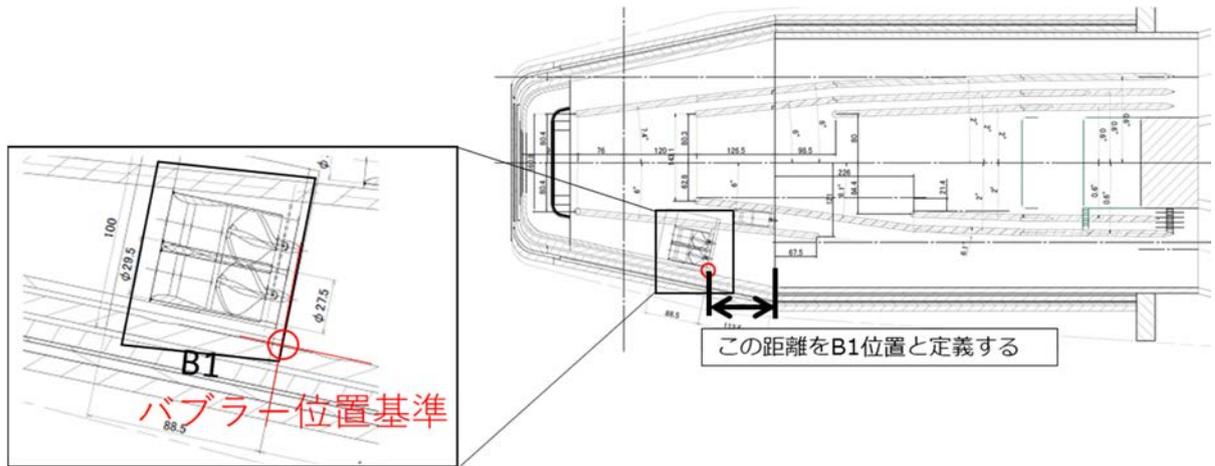


Fig. 3-86 バブラーB1の位置の定義

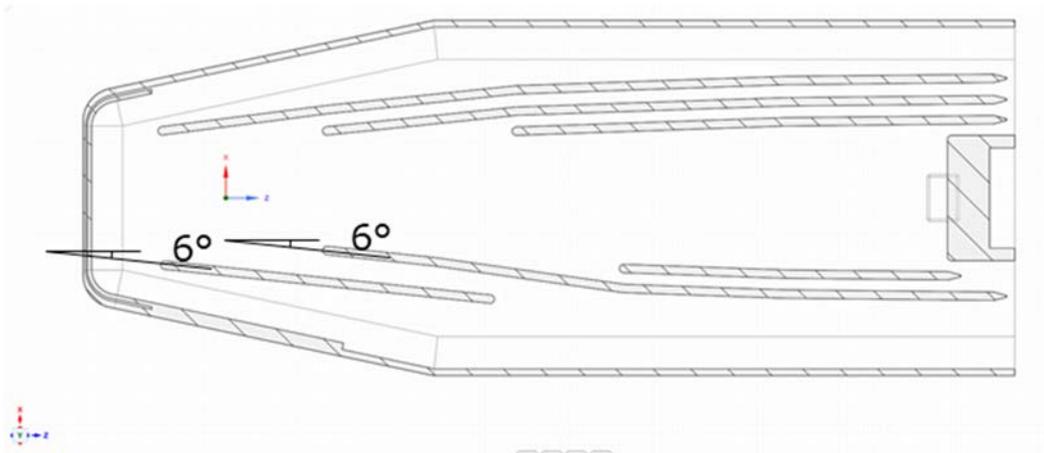


Fig. 3-87 案内羽根角度が6°の場合の形状(A-A'断面)

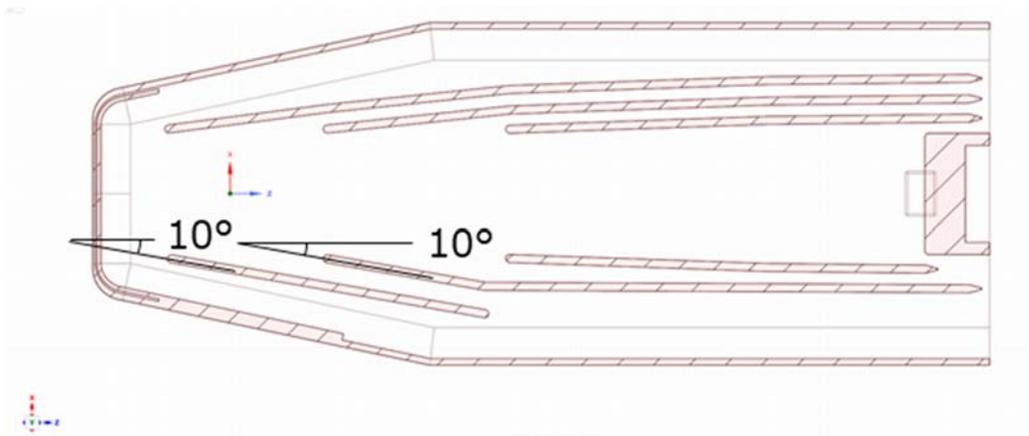


Fig. 3-88 案内羽根角度が10°の場合の形状(A-A'断面)

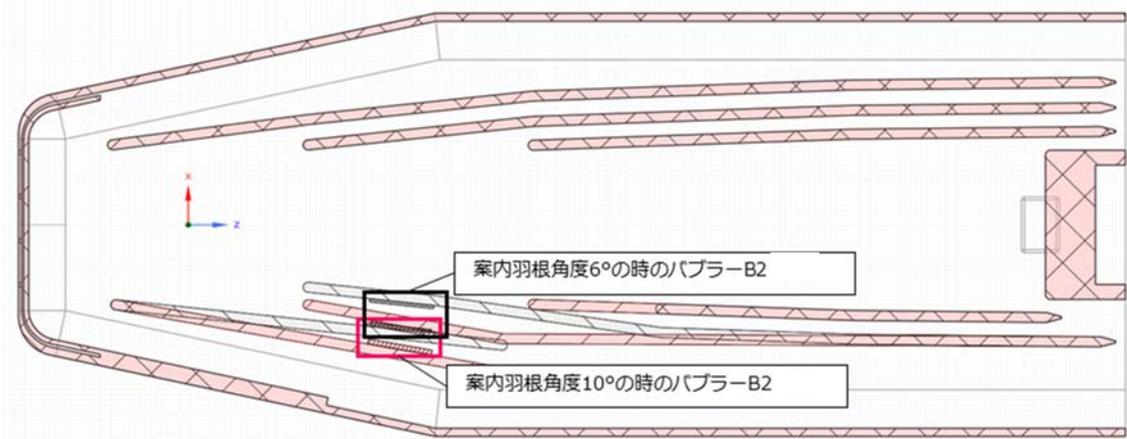


Fig. 3-89 案内羽根角度 6°と 10°の案内羽根、バブラーB2 形状比較(A-A'断面)

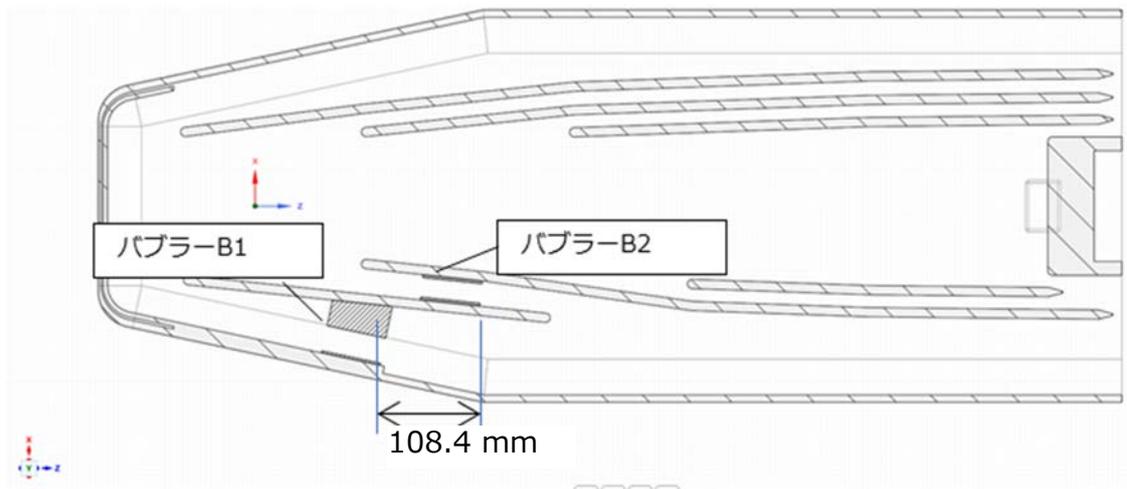


Fig. 3-90 A-A'断面の形状 1(バブラーB1 位置 : 108.4 mm, 案内羽根角度:6°)の形状

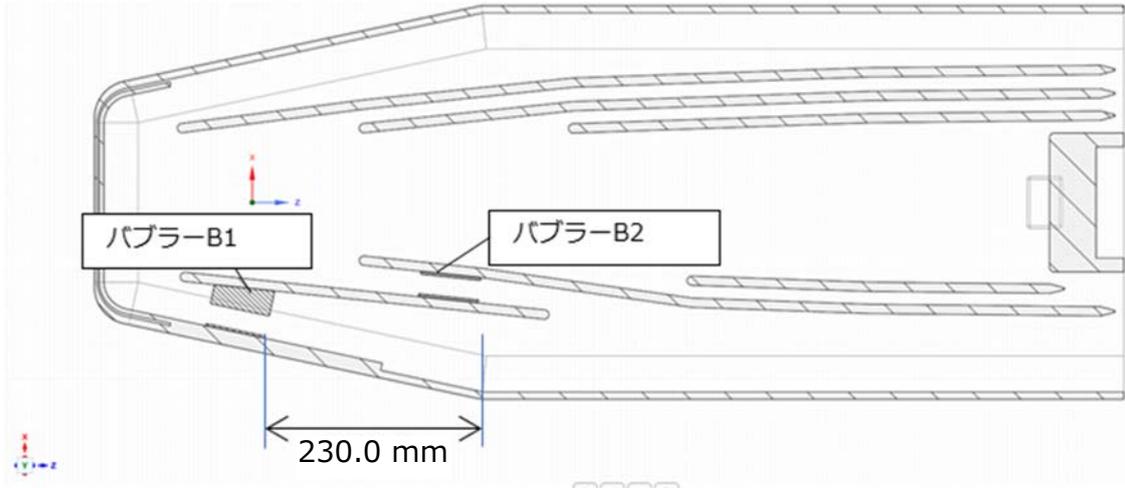


Fig. 3-91 A-A'断面の形状 2 (バブラーB1 位置 : 230.0 mm, 案内羽根角度:6°)の形状

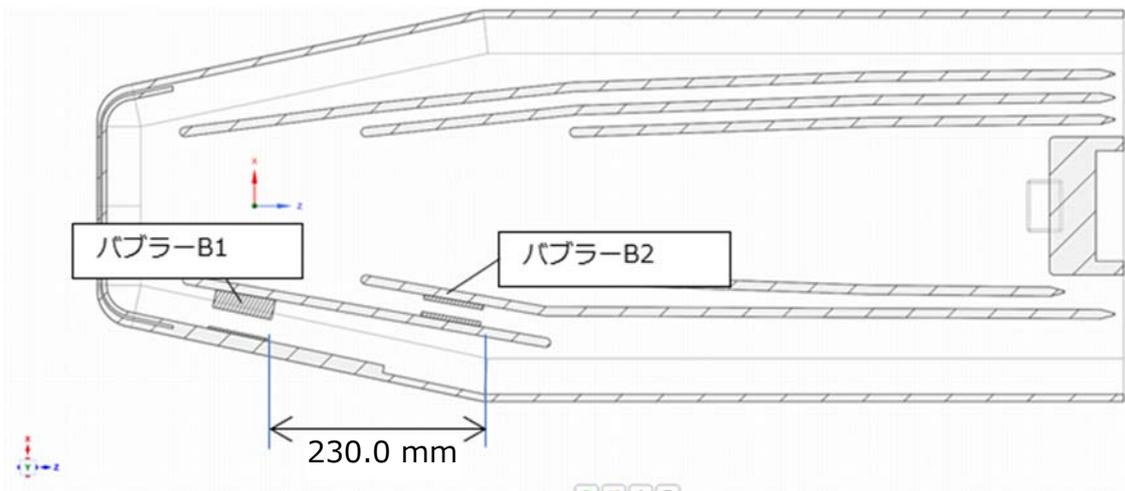


Fig. 3-92 A-A'断面の形状 3 (バブラーB1 位置 : 230.0 mm, 案内羽根角度:10°)の形状

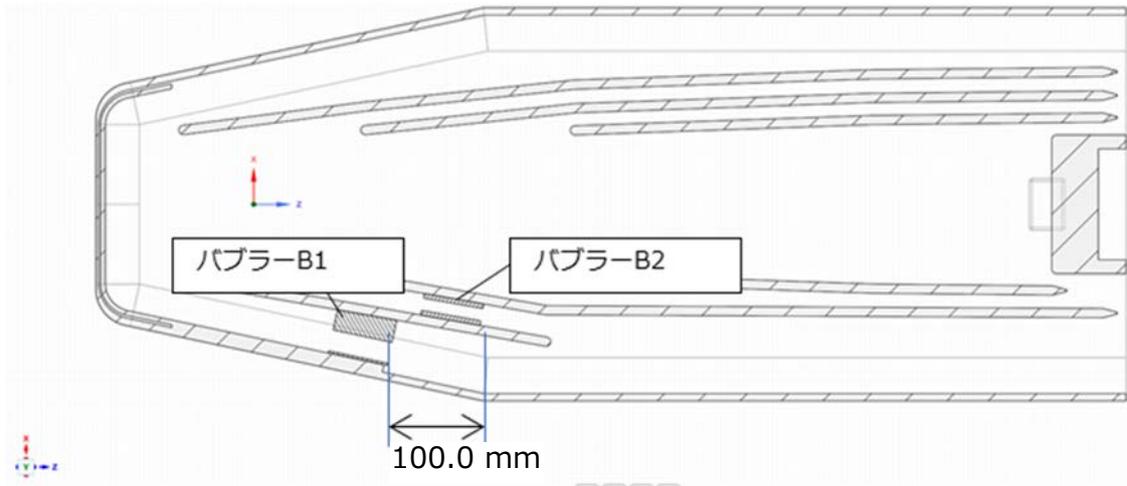


Fig. 3-93 A-A'断面の形状4 (バブラーB1 位置 : 100.0 mm, 案内羽根角度:10°)の形状

・ 圧損要素の抵抗係数

圧損要素の位置に Porous Jump BC を設け、抵抗係数をパラメータとしてモデルに設定できるようにした。抵抗係数を設定した面を Fig. 3-94 に示す。

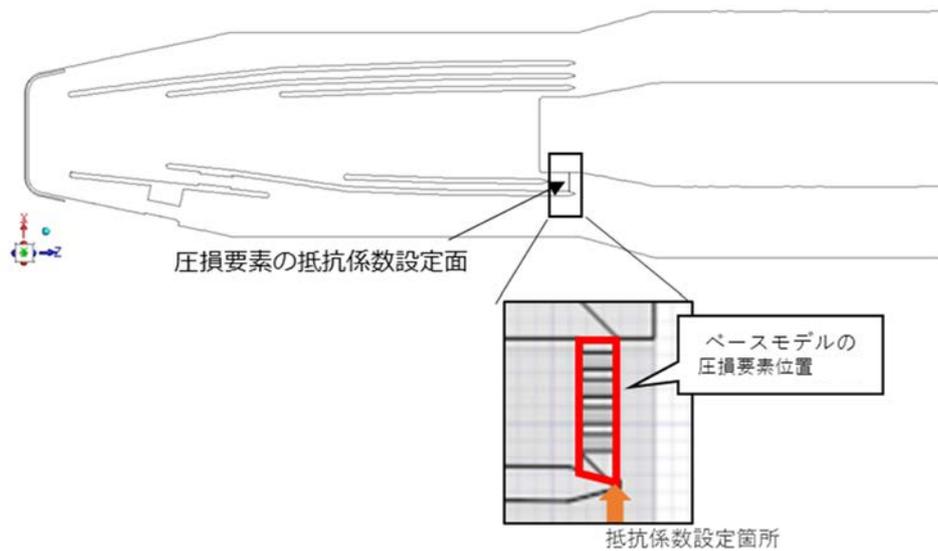


Fig. 3-94 圧損要素の設定位置

3.2.4 速度に応じた気泡径分布

・概要

Fig. 3-83 に示すバブラー出口の気泡注入面から、気泡を注入している。機械学習データの生成に用いたモデルは、水銀速度に応じた気泡径分布の気泡を注入し、気泡率を評価している。Fig. 3-95 に示した評価フローに従って、各バブラーでの水銀速度に応じて、各バブラーから注入される気泡径分布を決定し、気泡率を評価した。なお、気泡の物性値は Table 3-5 のものを用いた。

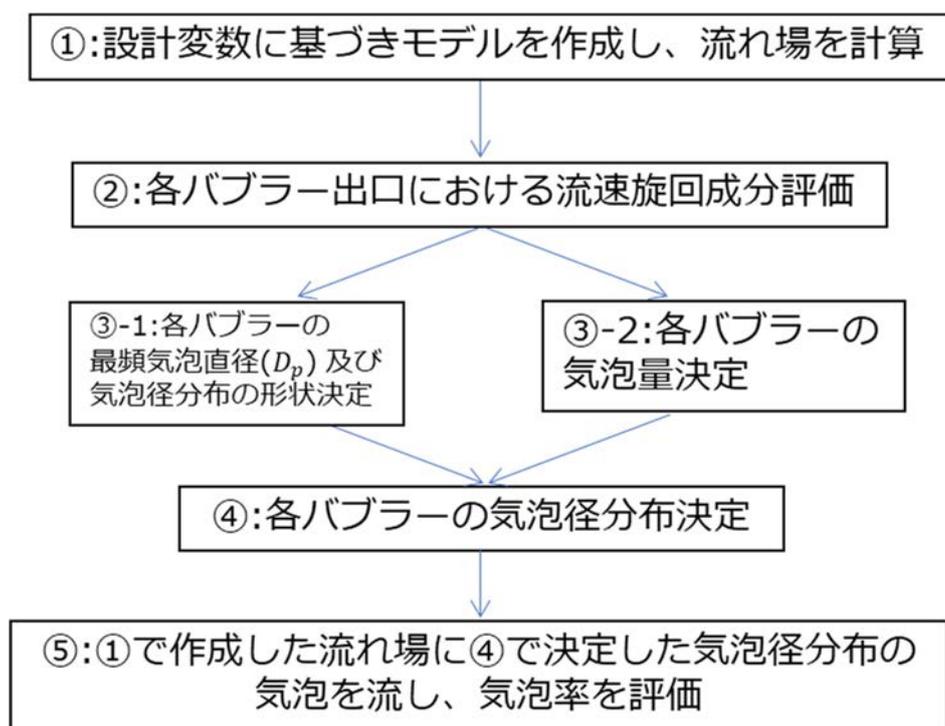


Fig. 3-95 流速に応じた気泡径分布を用いた最頻気泡径及び気泡率の評価フロー

・旋回流評価

水銀速度に応じた気泡径分布を評価するために、バブラー出口部において旋回方向流速 ($V_{\phi i}$) を評価した (Fig. 3-95 の②)。その評価した面の位置を Fig. 3-96 に示す。

各バブラーでの旋回方向流速 $V_{\phi i}$ は Eq. 17 で求めた。

$$V_{\phi i} = 1.1364 \times \tan\theta \times V_{L i} \quad \text{Eq. 17}$$

ここで、 $V_{L i}$ は i 番目のバブラーの流速評価面において面積平均した軸方向流速であり、Eq. 18 で表される。Eq. 18 の添え字 i はバブラーを表し、添え字 ij は i 番目のバブラーの旋回方向流速評価面に属する j 番目の面を表す。そのため、 S_{ij} は i 番目のバブラーの旋回方向流速評価面に属する j 番目の面の面積、 \vec{n}_{ij} は i 番目のバブラーの旋回方向流速評価面に属する j 番

目の面の単位法線ベクトル、 \vec{v}_{ij} は*i*番目のバブラーの巡回方向流速評価面に属する*j*番目の面の速度ベクトルである。

$$V_{Li} = \frac{\sum_j (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}) S_{ij}}{\sum_j S_{ij}} \quad \text{Eq. 18}$$

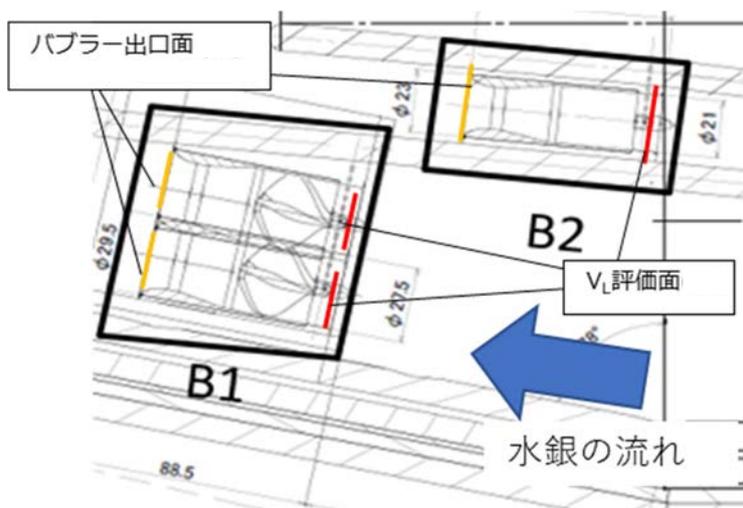


Fig. 3-96 巡回流評価位置

・最頻気泡径の決め方

評価した巡回流速に応じて、最頻気泡直径(D_p)を決定した(Fig. 3-95 の③-1)。 D_p は Eq. 19 を用いて決定した。Eq. 19 中の σ は水銀の表面張力であり $0.47[N/m]$ である。また、 ρ は水銀密度で $13472.51 [kg/m^3]$ 、 ε は Eq. 20、 f_e は Eq. 21 で定義される。

$$D_p = 0.63 \times \left(\frac{\sigma^3}{\rho^3 \times \varepsilon^2} \right)^{1/5} \quad \text{Eq. 19}^1$$

$$\varepsilon = D_e^2 \times f_e^3 \quad \text{Eq. 20}$$

$$f_e = \frac{V_\phi \times D}{\pi D_e^2} \quad \text{Eq. 21}$$

・気泡径分布の決め方

Eq. 19 を用いて、各バブラーの D_{pi} を評価した。Fig. 3-97 及び Table 3-27 に示す D_{pi} と気泡径分布の関係を用いて、気泡径分布を決定した。各バブラーの気泡径分布は Table 3-27 の値に、Eq. 22 で定義する係数をかけて決定される。この気泡径分布をもつ気泡を Fig. 3-83 に

示す位置から注入した。

$$coeff(i) = \frac{V_{\phi i}}{\sum_i V_{\phi i}} \quad \text{Eq. 22}$$

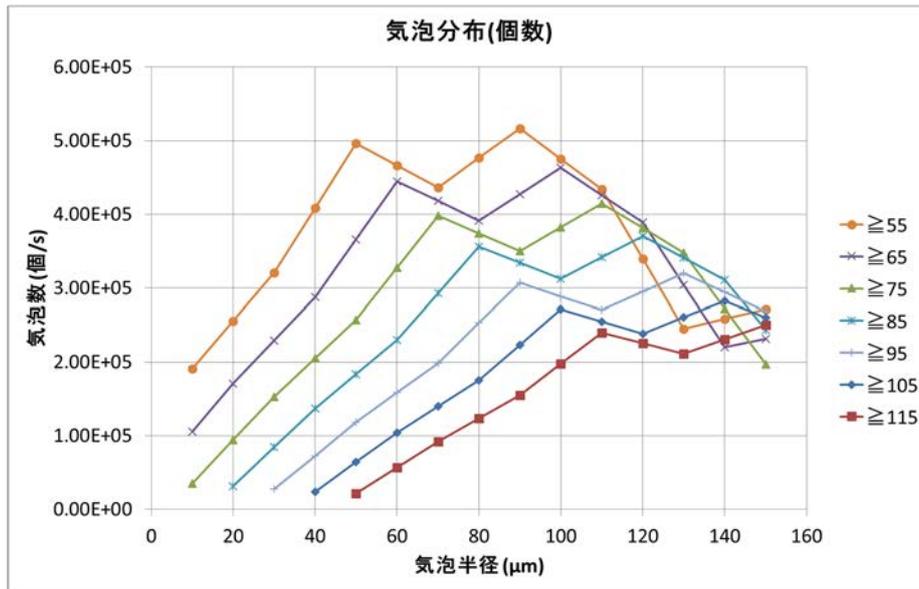


Fig. 3-97 $D_p/2$ と気泡径分布

Table 3-27 D_p と気泡径分布

気泡 半径 [μm]	気泡数[個/s]						
	$D_p/2 \geq 115$ の場合	$D_p/2 \geq 105$ の場合	$D_p/2 \geq 95$ の場合	$D_p/2 \geq 85$ の場合	$D_p/2 \geq 75$ の場合	$D_p/2 \geq 65$ の場合	$D_p/2 \geq 55$ の場合
10	-	-	-	-	3.54E+04	1.05E+05	1.91E+05
20	-	-	-	3.17E+04	9.43E+04	1.71E+05	2.56E+05
30	-	-	2.74E+04	8.43E+04	1.53E+05	2.29E+05	3.21E+05
40	-	2.41E+04	7.28E+04	1.37E+05	2.05E+05	2.88E+05	4.08E+05
50	2.14E+04	6.42E+04	1.18E+05	1.84E+05	2.57E+05	3.66E+05	4.96E+05
60	5.68E+04	1.04E+05	1.59E+05	2.30E+05	3.28E+05	4.45E+05	4.66E+05
70	9.24E+04	1.40E+05	1.99E+05	2.93E+05	3.98E+05	4.18E+05	4.36E+05
80	1.24E+05	1.75E+05	2.53E+05	3.56E+05	3.74E+05	3.91E+05	4.77E+05
90	1.55E+05	2.23E+05	3.07E+05	3.34E+05	3.50E+05	4.27E+05	5.17E+05
100	1.98E+05	2.71E+05	2.89E+05	3.13E+05	3.82E+05	4.63E+05	4.75E+05
110	2.40E+05	2.55E+05	2.70E+05	3.42E+05	4.15E+05	4.26E+05	4.34E+05
120	2.26E+05	2.39E+05	2.95E+05	3.71E+05	3.81E+05	3.89E+05	3.40E+05
130	2.11E+05	2.60E+05	3.20E+05	3.41E+05	3.48E+05	3.04E+05	2.45E+05
140	2.31E+05	2.83E+05	2.94E+05	3.11E+05	2.72E+05	2.20E+05	2.58E+05
150	2.50E+05	2.60E+05	2.69E+05	2.44E+05	1.97E+05	2.32E+05	2.71E+05

3.2.5 解析モデル

機械学習データの生成に用いたモデルを示す。

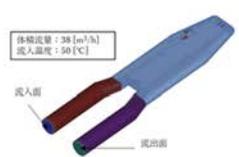
計算条件の概要、物性値は事前解析と同様である。バブラーのモデル化は3.2.3項で、気泡条件は3.2.4項で述べたとおりである。事前解析から変更した機械学習用データの生成に用いた解析モデルについて下述する。

・事前解析からの変更箇所

機械学習データの生成は事前解析のベースモデルに変更を加えて作成した。3.2.3節及び3.2.4節で示したほかに、機械学習データの生成に用いたモデルと事前解析のベースモデルの違いをTable 3-28にまとめた。

なお、機械学習データの生成に用いた物性値はベースモデルの温度50°Cのものである。

Table 3-28 事前解析と機械学習データの生成のモデルの違い

番号	変更項目	ベースモデル	モデル形状1
1	流入条件	流量を規定 ・流量：38 [m ³ /h] 	圧力差を規定 ・圧力差：0.23MPa (圧力差=流入面の圧力-流出面の圧力)
2	熱の計算	あり	なし(全体を50°Cとしている)

・メッシュ

機械学習データの生成に用いたメッシュは、3.1.2項で示した、事前解析と同様のメッシュ作成指針でメッシュを作成した。

・収束判定

各ケースで、Table 3-6に示す値以下の残差になった場合に収束したとして、そのケースの解析を終えた。残差が振動し、2000 iterationしても収束しない場合は、収束していないとした。

・流入出条件

水銀の流入出口はFig. 3-98で示す様に流入面と流出面の圧力差を0.23 [MPa]になる様に境界条件を設定した。また、流入温度は50 [°C]とした。

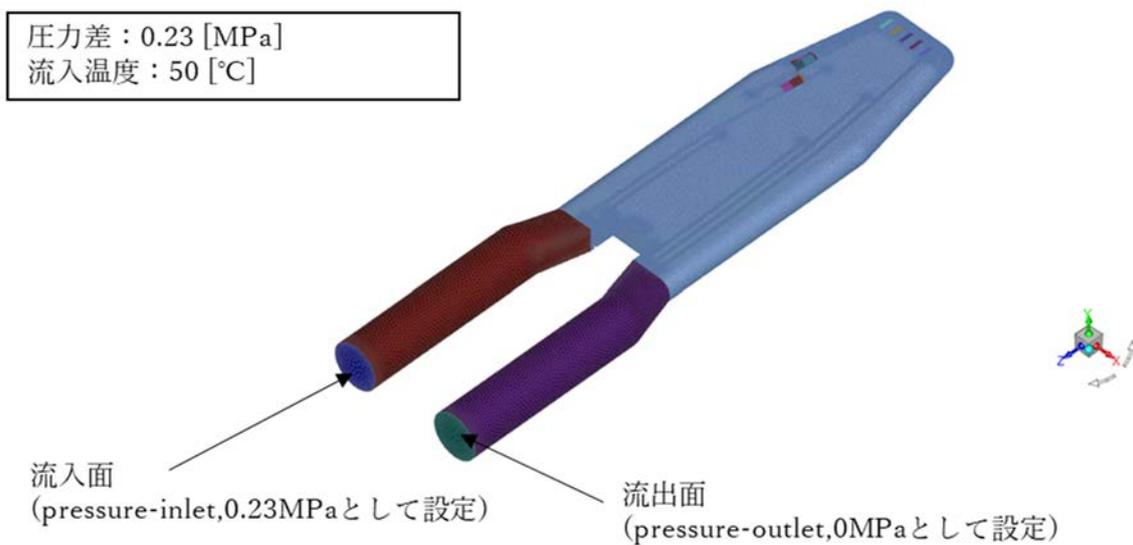


Fig. 3-98 機械学習データの生成の流入出条件

3.2.6 解析結果

・事前解析との比較

事前解析のベースモデルと各設計変数を同じにした形状 1(Fig. 3-90)の解析(以下、同条件解析と呼ぶ。)を実施した。計算条件の比較を Table 3-29 に、水銀流れに関する結果の比較を Table 3-30 に示す。総水銀流量が事前解析と同条件解析で異なるので、それが一致するような係数をバブラー部の質量流量、狭隘流路部流速にかけた結果も示す(流量補正)。また、Fig. 3-99 に事前解析と同条件解析の水銀の流速分布の比較を示す。両者に大きな相違はなく、Table 3-30 に示すように事前解析と同条件解析(流量補正)を比較するとほぼ同じ値になっていることから、圧損要素に Pours Jump BC を適用し、入口境界条件を流量から圧力に変更した解析手法に問題はないと判断した。

事前解析と同条件解析の気泡の挙動を比較した。事前解析と同条件解析では、Fig. 3-100 に示すように注入した気泡径分布が異なり、バブラーでの水銀流量の影響を考慮した同条件解析の方が注入した気泡数が多いが、注入気泡率(注入気泡質量/水銀質量流量)は同じである。Fig. 3-100 において、同条件解析(B1)は同条件解析において、バブラーB1 から注入された気泡径分布を表し、同条件解析(B2)は同条件解析において、バブラーB2 から注入された気泡径分布を示している。Fig. 3-101～Fig. 3-104 に評価領域 A～D の気泡率の比較を、Fig. 3-105～Fig. 3-108 に断面 1～4 での気泡質量密度分布を記載した。事前解析と同条件解析で領域 A,B,D の気泡率及び気泡質量密度分布に差異が見られた。その理由を考察するため、断面 1 における事前解析と同条件解析の広がり方向の速度割合(速さ(V_{mag}))で規格化した広がり方向(x 軸方向)の速度の大きさ(V_x/V_{mag})分布を Fig. 3-109 にて比較した。Fig. 3-109 において、 $V_x/V_{mag} = 0.2$ の図より、事前解析の方が同条件解析よりも広がり方向の速度の割合が大きいことがわかる。この流速により、評価領域に到達する前に気泡が広がってしまい、事前解析では気泡率が下がったと考えられる。

Table 3-29 事前解析と同条件解析の解析条件比較

項目	異なる箇所
形状	若干異なる。形状の違いを以下に示す。 <ul style="list-style-type: none"> ・事前解析→圧損要素の圧損を形状としてモデル化 ・同条件解析→圧損要素の圧損を境界条件としてモデル化
メッシュ	圧損要素の形状が異なっており、メッシュも異なる。 メッシュ作成の指針は同一。
境界条件 (流入出条件)	異なる。 流入出条件を規定している箇所は同じだが、条件が異なる。 条件の違いを以下に示す。 <ul style="list-style-type: none"> ・事前解析→流量を規定。38.0 [m³/h]の水銀流量を規定。 ・同条件解析→入口と出口の圧力差を規定。圧力差として、0.23[MPa]を規定。
境界条件 (バブラー部)	異なる箇所はない。
発熱	異なる。条件の違いを以下に示す。 <ul style="list-style-type: none"> ・事前解析→水銀及び水銀容器が発熱している。 ・同条件解析→発熱しているものはない。
気泡条件	異なる。 条件の違いを以下に示し、実際に用いた気泡径分布を Fig. 3-100 に示した。 <ul style="list-style-type: none"> ・事前解析→気泡径分布は水銀の流速に依存しない。 ・同条件解析→気泡径分布は水銀の流速に依存する。

Table 3-30 事前解析と同条件解析の比較

モデル名	総水銀流量 [m ³ /h]	バブラー部の 質量流量[kg/s]		狭隘流路部流速[m/s]
		評価面①	評価面②	
事前解析(ベースモデル)	38.0	53.64	29.05	4.33
同条件解析	35.1	49.35	26.69	3.88
同条件解析(流量補正)	38.0	53.43	28.89	4.21

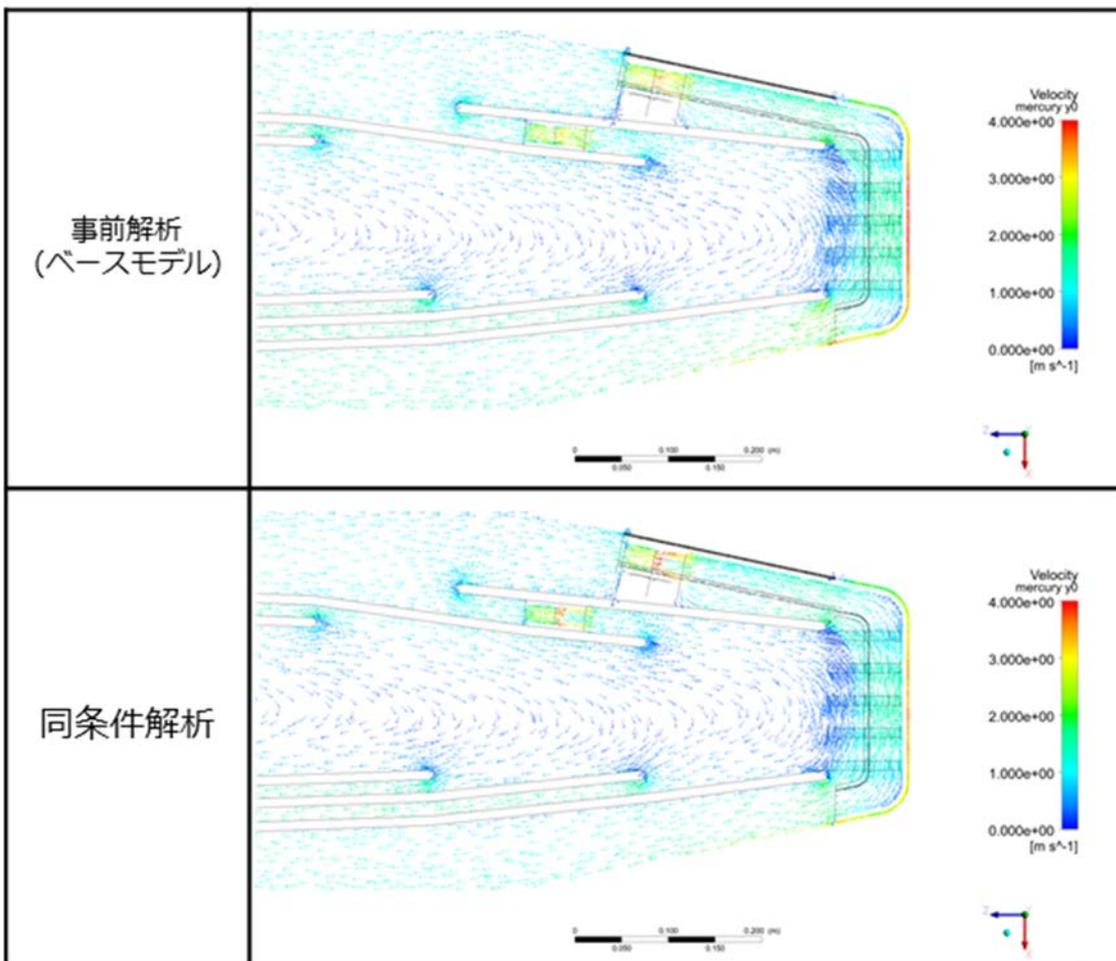


Fig. 3-99 断面 1(高さ方向中央)の水銀の流速分布比較

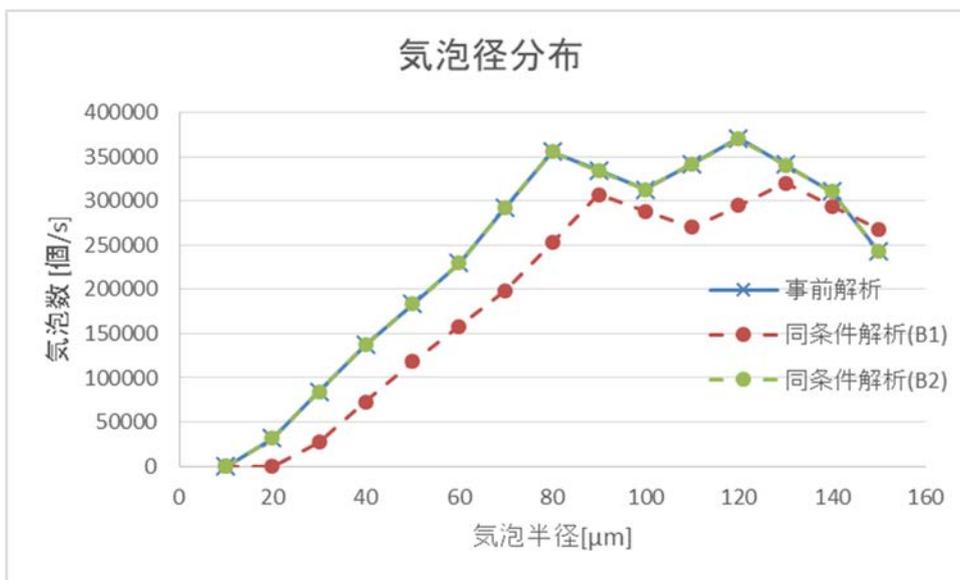


Fig. 3-100 事前解析と同条件解析の気泡径分布

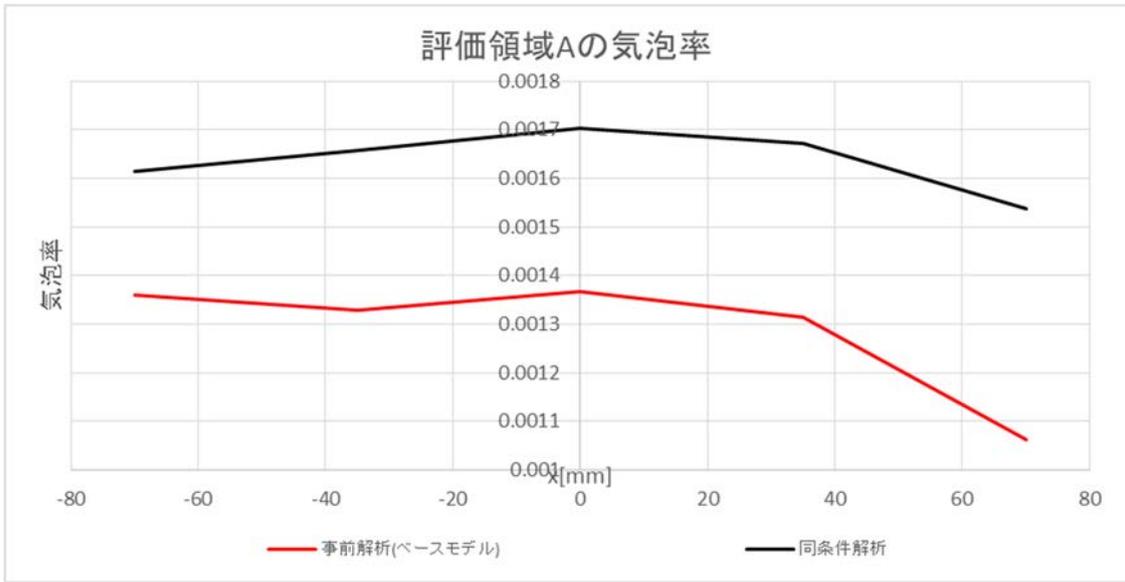


Fig. 3-101 評価領域 A の気泡率比較

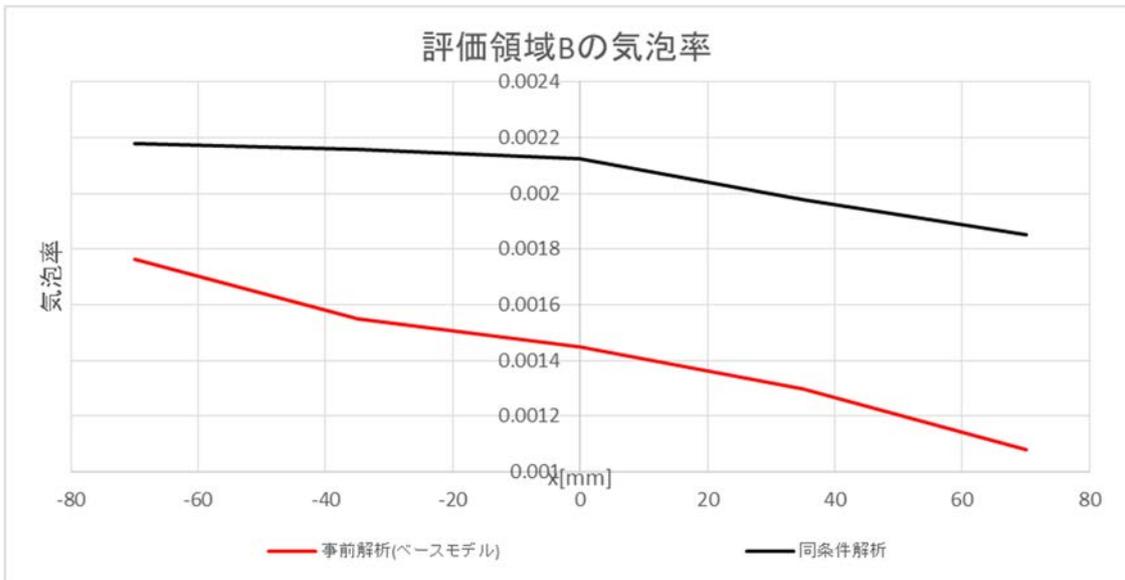


Fig. 3-102 評価領域 B の気泡率比較

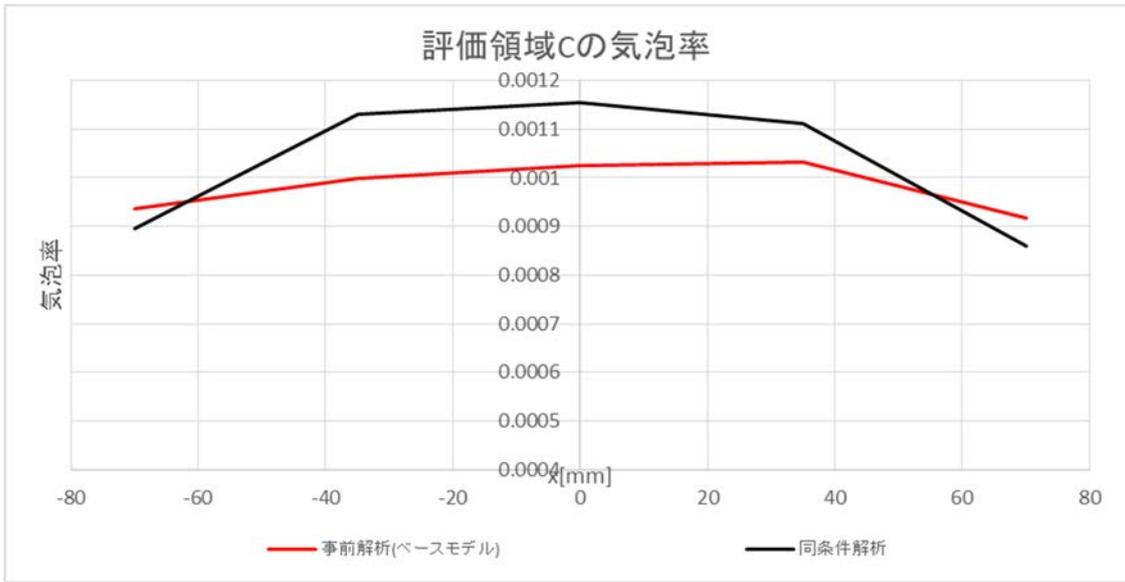


Fig. 3-103 評価領域 C の気泡率比較

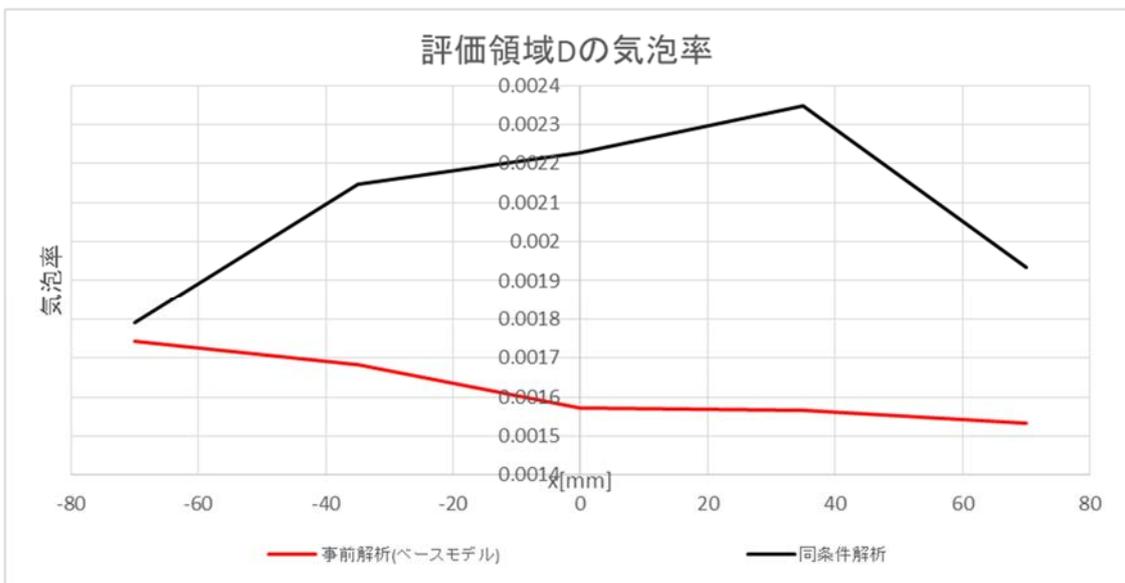


Fig. 3-104 評価領域 D の気泡率比較

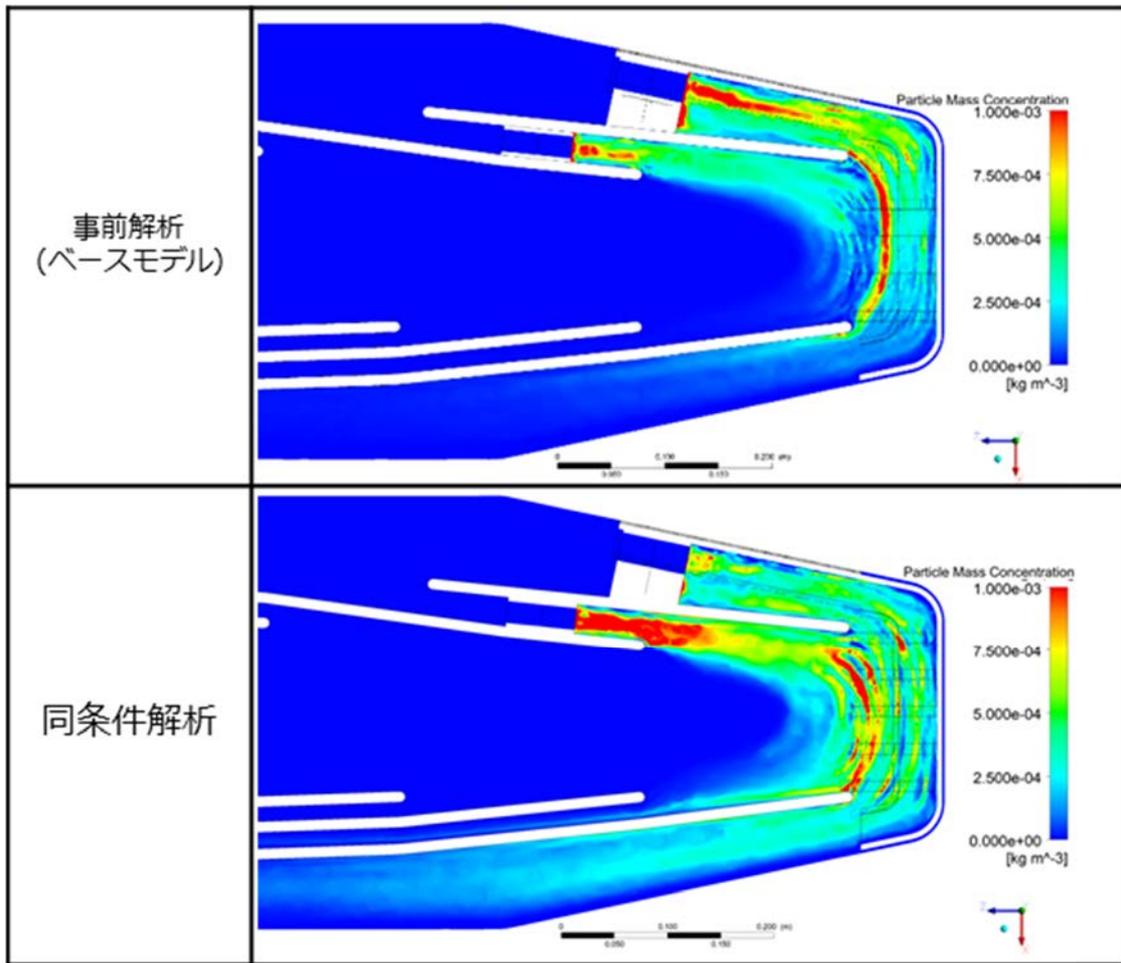


Fig. 3-105 水銀 気泡質量密度分布 断面1(高さ方向中央)の
事前解析と同条件解析の比較(コンターレンジ : 0 ~ 1 ×10⁻³ [kg/m³])

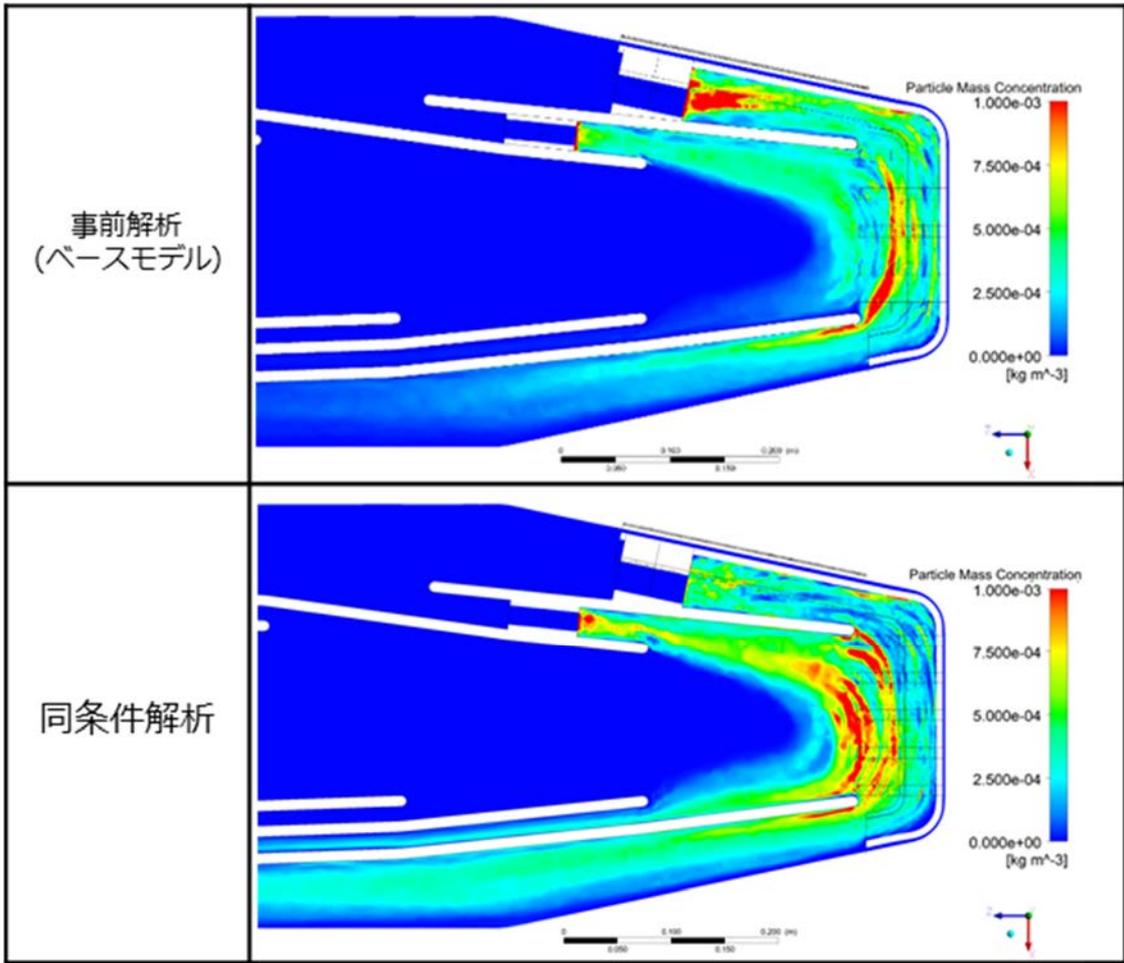


Fig. 3-106 水銀 気泡質量密度分布 断面 2 (高さ方向中央から 20.5mm 上)の
事前解析と同条件解析の比較(コンターレンジ : 0 ~ 1 ×10⁻³ [kg/m³])

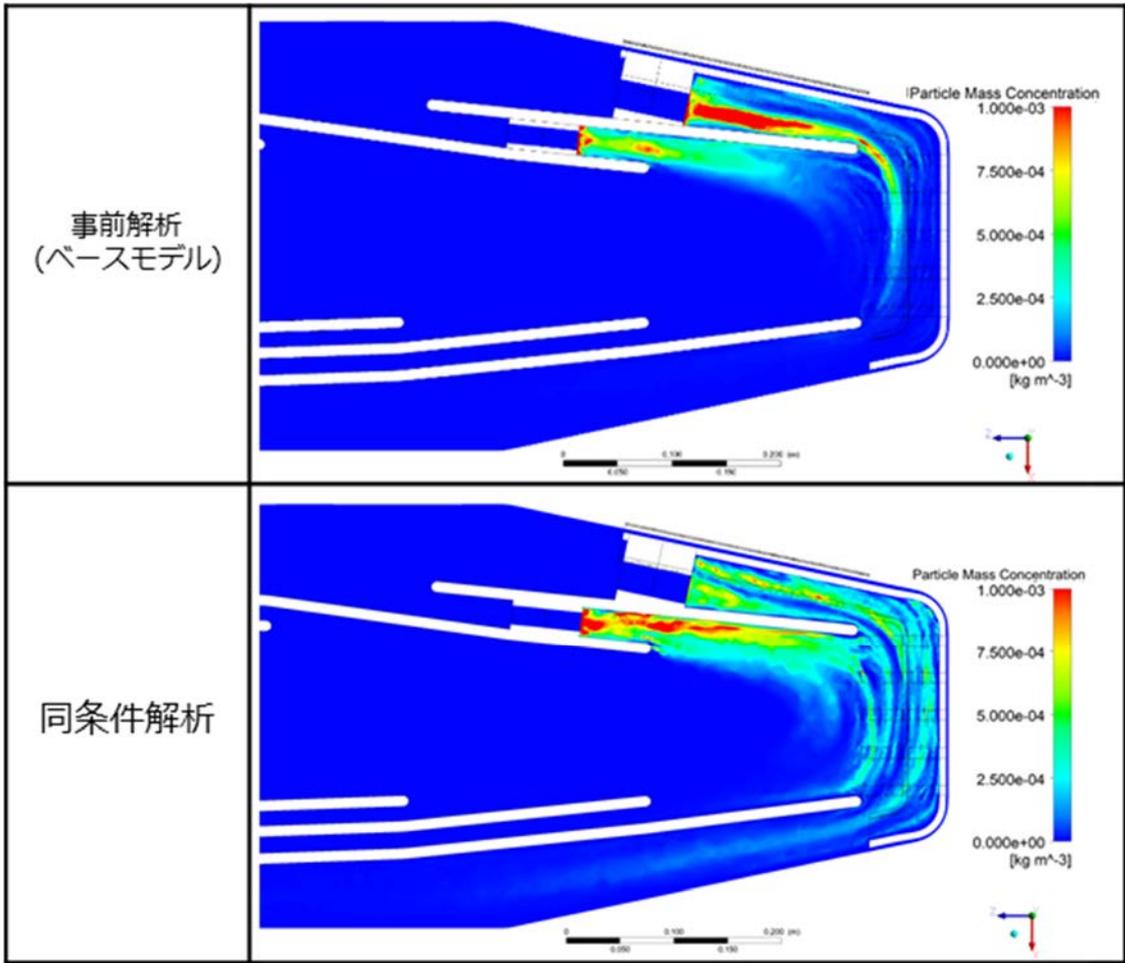


Fig. 3-107 水銀 気泡質量密度分布 断面3 (高さ方向中央から 20.5mm 下)の
事前解析と同条件解析の比較(コンターレンジ : 0 ~ 1 ×10⁻³ [kg/m³])

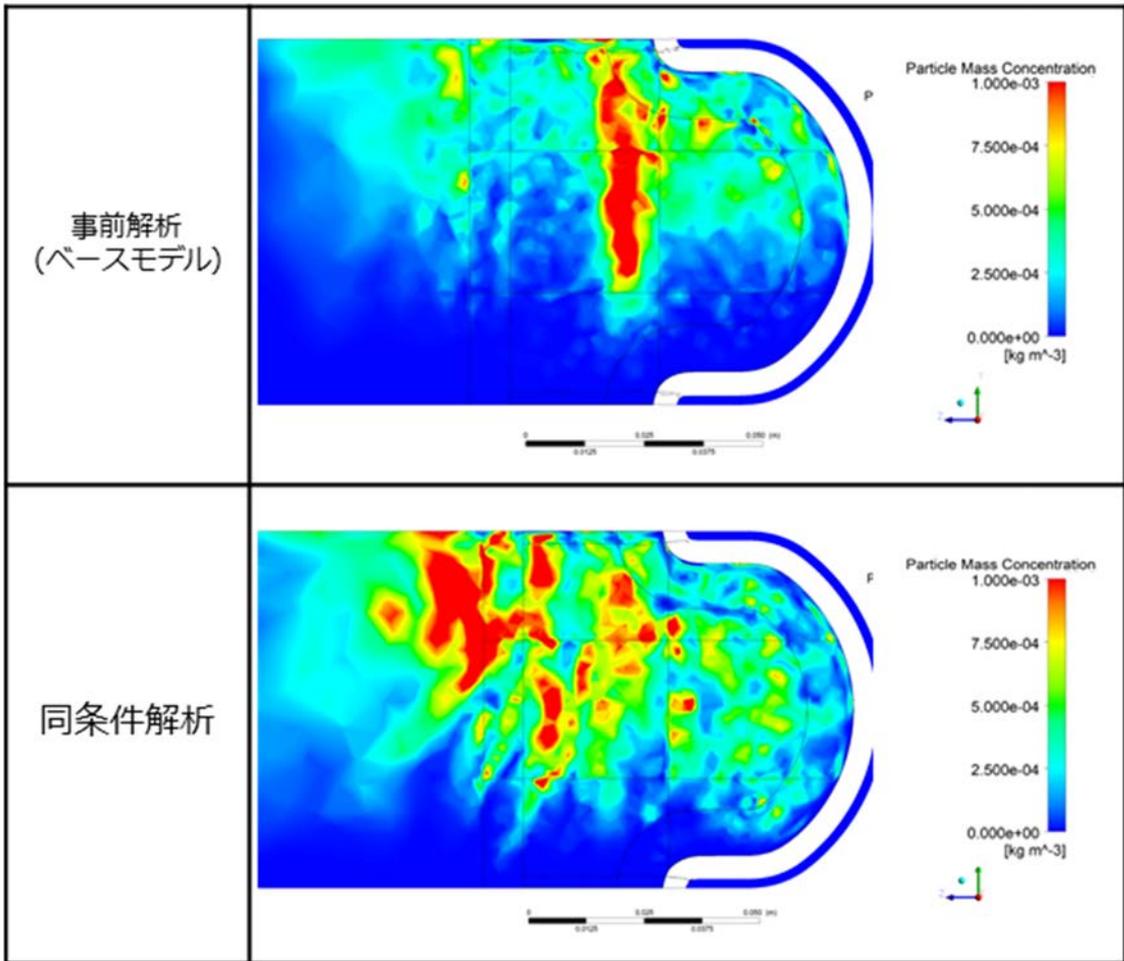


Fig. 3-108 水銀 気泡質量密度分布 断面4(幅方向中央)の
事前解析と同条件解析の比較(コンターレンジ: $0 \sim 1 \times 10^{-3} \text{ [kg/m}^3\text{]}$)

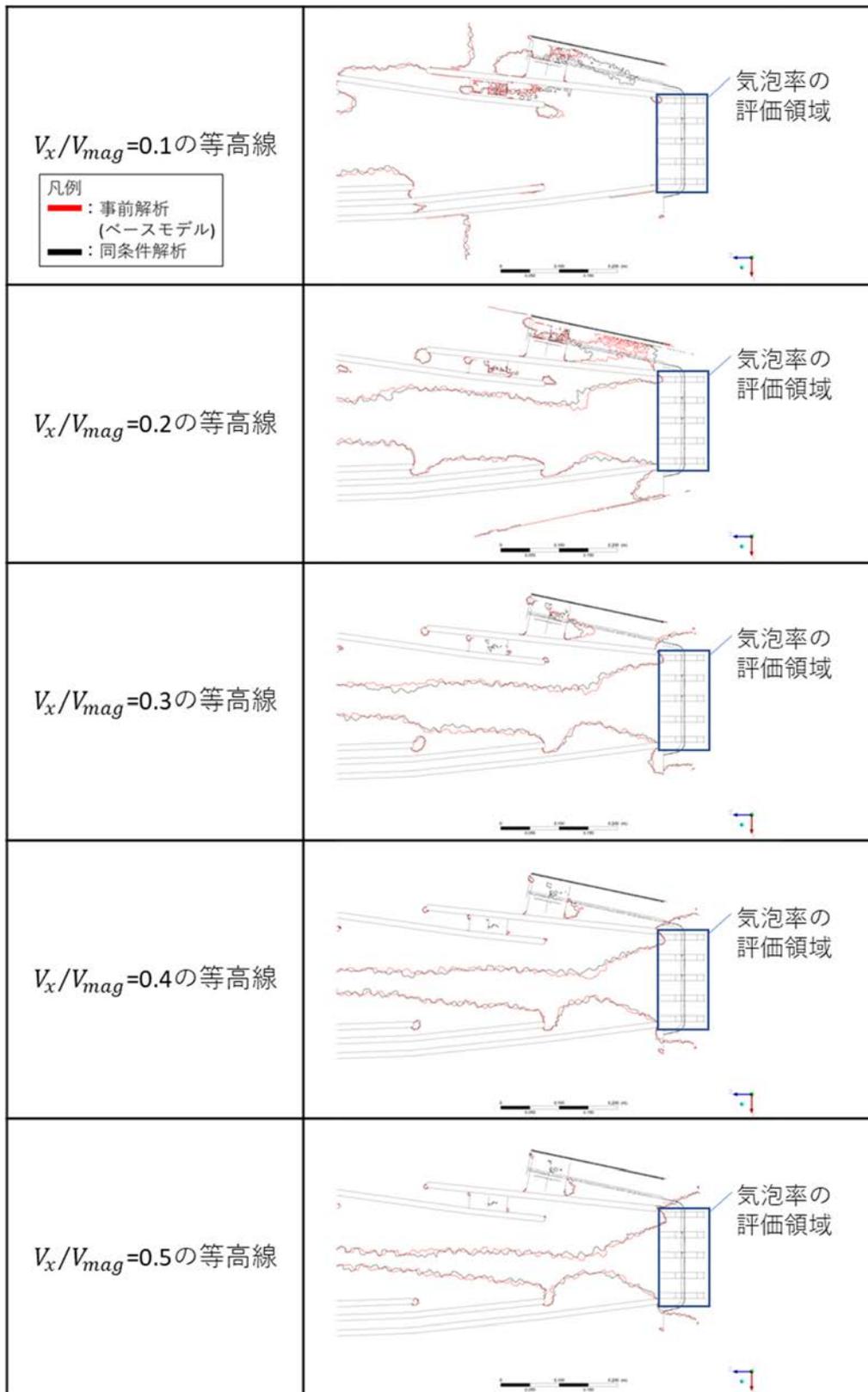


Fig. 3-109 事前解析と同条件解析の広がり方向の速度割合比較

4. 機械学習による水銀標的容器の最適化

4.1 機械学習によるサロゲートモデルの構築

4.1.1 機械学習データの確認

機械学習に用いるデータの性質を確認するために、収束した機械学習用解析結果 547 ケースについて制約条件値および目的関数のヒストグラムを作成した。各変数について最大最小値から 20 分割して bin を作成し、出現頻度をプロットした(Fig. 4-1)。また、Table 4-1 に各項目の最大値及び最小値を示す。制約条件値および目的関数に相関関係に悪影響を与えるような大きな外れ値は見られない。

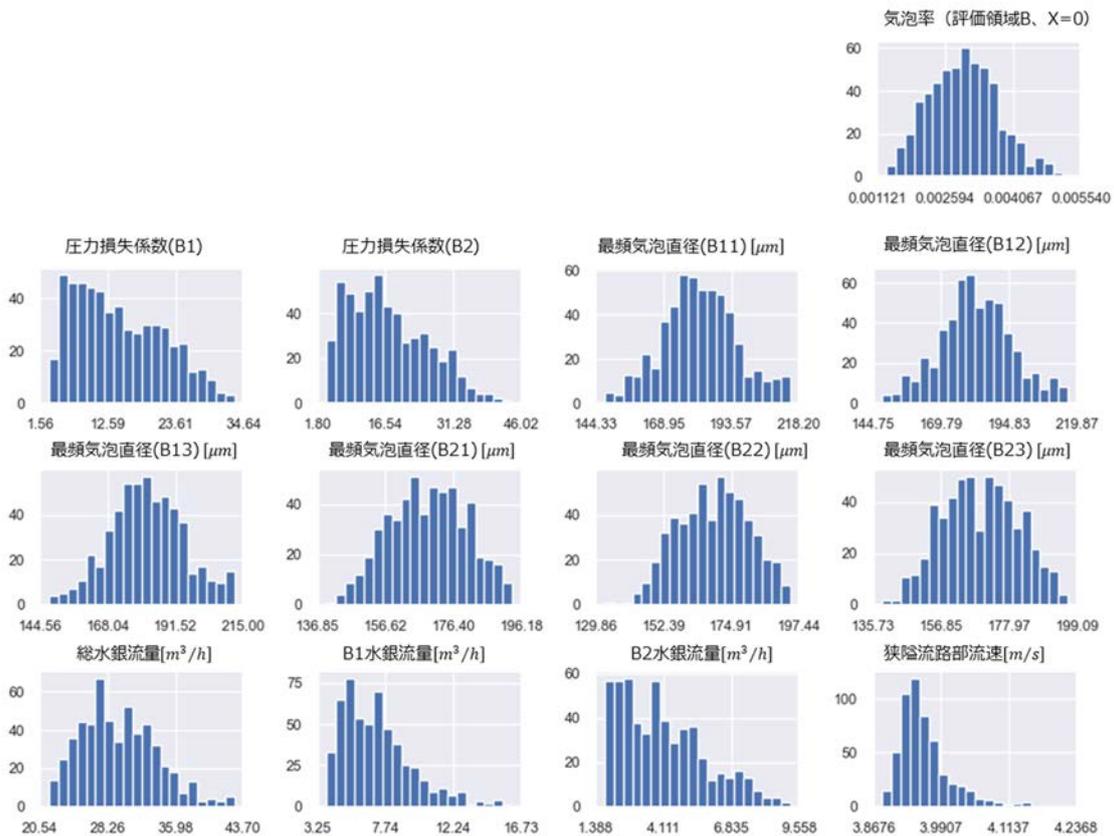


Fig. 4-1 制約条件値および目的関数ヒストグラム

Table 4-1 学習データの制約条件値および目的関数範囲

	最小	最大
気泡率 (評価領域 B、X=0)	0.001322	0.005339
総水銀流量 [m ³ /h]	21.59449	42.6496
B1 水銀流量 [m ³ /h]	3.862208	16.11839
B2 水銀流量 [m ³ /h]	1.759289	9.186595
狭隘流路部流速 [m/s]	3.884419	4.220003
最頻気泡直径(B11) [μm]	147.6831	214.8419
最頻気泡直径(B12) [μm]	148.1651	216.4596
最頻気泡直径(B13) [μm]	147.7585	211.7991
最頻気泡直径(B21) [μm]	139.5464	193.4787
最頻気泡直径(B22) [μm]	132.933	194.3655
最頻気泡直径(B23) [μm]	138.6115	196.2123
圧力損失係数(B1)	3.061798	33.13779
圧力損失係数(B2)	3.807501	44.00812

4.1.2 設計変数と目的関数、制約条件の相関

最初に、設計変数間に強い相関がないことの確認及び、設計変数および目的関数のおおまかな関係の把握のために相関係数を評価した(Fig. 4-2)。

ここで、 x と y の相関係数 r として、ここでは次式に示す一般的に相関係数として使用されるピアソンの積率相関係数を使用した。

$$r = \frac{s_{xy}}{s_x s_y} = \frac{\frac{1}{n} \sum_i^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad \text{Eq. 23}$$

s_{xy} : x と y の共分散	x_i : x の i 番目のデータ
s_x : x の標準偏差	y_i : y の i 番目のデータ
s_y : y の標準偏差	\bar{x} : x の平均値
n : x と y のデータ数	\bar{y} : y の平均値

B1 位置、案内羽根角度はサンプル数が少なく、また収束したデータのみを抽出しているため、設計変数間の一部の相関が大きくなっていると考えられる。

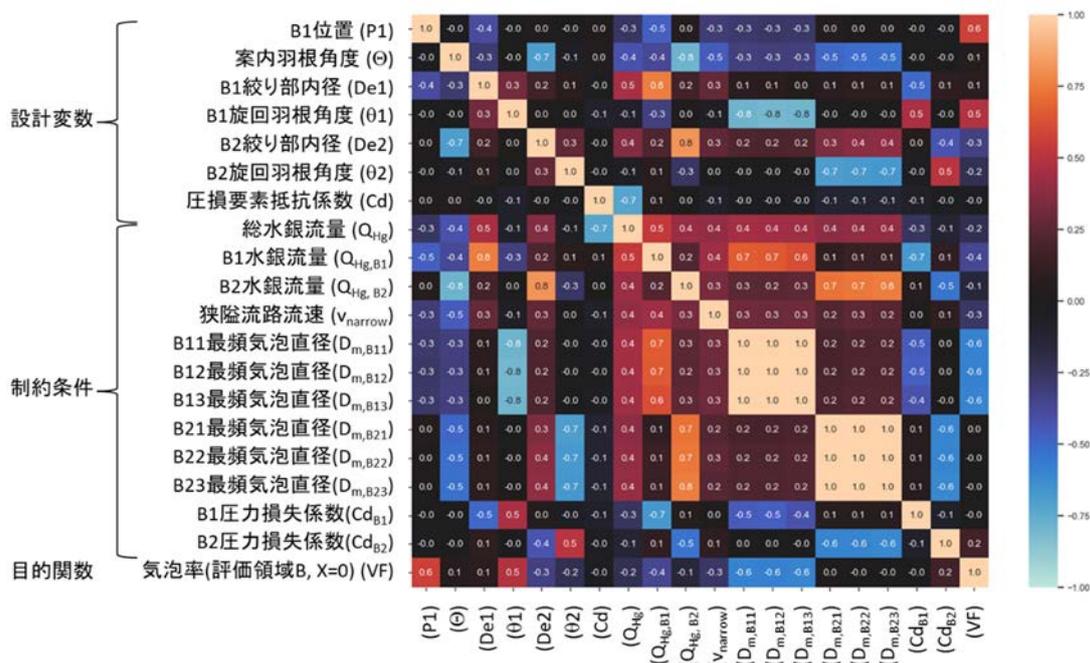


Fig. 4-2 設計変数と制約条件の相関

4.1.3 サロゲートモデル構築

B1 位置、案内羽根角度、B1 絞り部内径、B1 旋回羽根角度、B2 絞り部内径、B2 旋回羽根角度、抵抗係数の設計変数を基に、制約条件の総水銀流量、バブラーB1 水銀流量、バブラーB2 水銀流量、狭隘流路部流速および目的関数の気泡率(評価領域 B、X=0)を予測する機械学習モデルを以下の3種類の手法で試行した。

1. 線形回帰(linear)
2. サポートベクター回帰(support_vector)
3. ガウス過程回帰(gaussian_process)

以下に各手法の概要を説明する。

・線形回帰(linear)

線形回帰では、目的関数が設計変数の重み付き線形和で表現できるとし、その重み係数を最小二乗法で求める。

$$y = f(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{j=1}^m w_j x_j$$

Eq. 24

m : \mathbf{x} の次元数

学習データセット(\mathbf{x}_i, y_i)がある場合、最小二乗法を用いて係数 w_j を計算する。すなわち、二乗和誤差 S を最小化する。

$$S = \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i)]^2 = \sum_{i=1}^n \left[y_i - \left(w_0 + \sum_{j=1}^m w_j x_{ij} \right) \right]^2$$

$$= (\mathbf{y} - X\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - X\mathbf{w})$$

Eq. 25

ここで、 $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$, $X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}$, $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{pmatrix}$

線形近似の範囲で表現できる問題であれば、高速かつ頑健な学習および予測が可能である。

・サポートベクター回帰(support_vector)

線形回帰は、1次元であれば直線、多次元であれば超平面のモデルとなる。一般のデータ分布には非線形性があるため、1次元であれば曲線、多次元であれば超曲面によるモデル化が必要である。非線形性を考慮した回帰モデルとしては、カーネル関数を用いたカーネル回帰が一般的である。サポートベクター回帰⁷⁾もカーネル関数を用いる。

<カーネル回帰>

カーネル回帰では、次式のモデルを用いて非線形応答を近似する。

$$y = f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \alpha_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}),$$

n : \mathbf{x} と \mathbf{y} のデータ数

Eq. 26

$k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})$ はカーネル関数と呼ばれ、以下のガウスクーネル(Radial Basis Function, RBF)がよく使われる。

$$k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) = \exp(-\beta \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}\|^2) = \exp\left(-\beta \sum_{k=1}^m (x_{jk} - x_k)^2\right)$$

m : \mathbf{x} の次元数

Eq. 27

本解析でもガウスクーネルを用いている。カーネル回帰はガウス関数の重み付き和となる。一般的なカーネル回帰では、線形回帰と同じように学習データセット (\mathbf{x}_i, y_i) に対して、最小二乗法を用いて係数 α_j を計算する。すなわち、二乗和誤差 S を最小化する。

$$S = \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i)]^2 = \sum_{i=1}^n \left[y_i - \sum_{j=1}^n \alpha_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i) \right]^2$$

Eq. 28

<サポートベクター回帰>

サポートベクター回帰では、最小化する対象が二乗和誤差ではなく、次式となる。

$$S = \frac{1}{2} \|\mathbf{a}\|^2 + C \sum_{i=1}^n h(y_i - f(\mathbf{x}_i)) \tag{Eq. 29}$$

ここで、 h は誤差関数であり、Fig. 4-3 に示すように真値周辺にある不感帯のデータを除外する。本解析では ϵ の値として0.01を採用した。

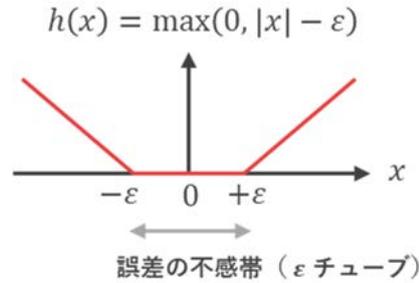


Fig. 4-3 サポートベクター回帰における誤差関数

Eq. 29 の第 1 項は重みの最小化(正則化)であり、第 2 項が誤差の最小化を表す。係数 C は両項のバランスを表すパラメータである。サポートベクター回帰は、不感帯のデータを除外することにより、高速な学習とノイズに強い特徴をもつ。

・ **ガウス過程回帰(gaussian_process)**

ガウス過程回帰⁸⁾は、学習データセット (\mathbf{x}_i, y_i) が事前確率分布として与えられていると仮定し、新たな \mathbf{x}_* に対する y_* の事後確率分布(平均と分散)をベイズ推定により計算する。線形回帰やサポートベクター回帰と異なり、 y_* の値ではなく確率分布を計算し、その平均を予測値とする。

計算モデルは、次式で定義する。

$$y = f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{w} + \epsilon \quad \Rightarrow \quad \mathbf{y} = X^T \mathbf{w} + \epsilon I$$

ここで、 $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}, \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{pmatrix}$ Eq. 30

ただし

ϵ : 誤差項

I : 単位行列

n : \mathbf{x} と \mathbf{y} のデータ数

m : \mathbf{x} の次元数

である。

ここで示す例は、 \mathbf{x} の重み付き線形和で \mathbf{y} を表しており、線形回帰に近い。一般には、カーネル回帰と同様に X をなんらかの基底で拡張し、カーネル関数を定義して計算を行う。本解析では、RBF カーネルに定数項の積および和を追加したカーネル($C_1 \times \text{RBF} + C_2$)を使用した。

線形回帰では特定の関数を最小化して \mathbf{w} を求めるのに対して、ガウス過程回帰ではベイズ推定を用いて、あるデータセットが与えられた時の \mathbf{w} の事後確率分布(平均と分散)を計算する。

正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ に対して $\epsilon \sim N(0, \alpha)$ を仮定すると、 X, \mathbf{w} が得られたときの \mathbf{y} の条件付き確率が次式で与えられる。

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}|X, \mathbf{w}) &= \prod_{i=1}^n p(y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{n/2}} \prod_{i=1}^n \exp\left(-\frac{(y_i - \mathbf{x}_i^T \mathbf{w})}{2\alpha}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\alpha)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y}^T - X^T \mathbf{w})^T (\alpha I)^{-1} (\mathbf{y}^T - X^T \mathbf{w})\right) \\ &= \dots = N(X^T \mathbf{w}, \alpha I) \end{aligned} \quad \text{Eq. 31}$$

一方、 \mathbf{w} を確率変数と考え、事前分布として $\mathbf{w} \sim N(0, \beta I)$ と仮定すると、 X, \mathbf{y} が得られたときの \mathbf{w} の条件付き確率は、ベイズの定理を用いて次のように表せる。

$$p(\mathbf{w}|X, \mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|X, \mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathbf{y}|X)} \propto p(\mathbf{y}|X, \mathbf{w})p(\mathbf{w}) = \dots \sim N(A^{-1}\mathbf{b}, A^{-1}) \quad \text{Eq. 32}$$

$$\text{ここで、 } A = \alpha^{-1}XX^T + \beta^{-1}I, \mathbf{b} = \alpha^{-1}X\mathbf{y}$$

$p(\mathbf{w}|X, \mathbf{y}) \sim N(A^{-1}\mathbf{b}, A^{-1})$ より、 \mathbf{w} の平均値は $E[\mathbf{w}] = A^{-1}\mathbf{b}$ 、分散は $V[\mathbf{w}] = A^{-1}$ である。

以上より、 \mathbf{x}_* が与えられたときの \mathbf{y}_* の事後確率分布(平均と分散)を次のとおり計算できる。

$$\begin{aligned} E[\mathbf{y}_*] &= E[f(\mathbf{x}_*)] = E[\mathbf{x}_*^T \mathbf{w}] = \mathbf{x}_*^T E[\mathbf{w}] = \mathbf{x}_*^T A^{-1} \mathbf{b} \\ V[\mathbf{y}_*] &= V[f(\mathbf{x}_*)] = E[(\mathbf{x}_*^T \mathbf{w} - E[\mathbf{x}_*^T \mathbf{w}])(\mathbf{x}_*^T \mathbf{w} - E[\mathbf{x}_*^T \mathbf{w}])^T] = \dots = \mathbf{x}_*^T A^{-1} \mathbf{x}_* \end{aligned} \quad \text{Eq. 33}$$

すなわち、 $p(\mathbf{y}_*|\mathbf{x}_*) = N(\mathbf{x}_*^T A^{-1} \mathbf{b}, \mathbf{x}_*^T A^{-1} \mathbf{x}_*)$ となり、 \mathbf{w} を求めることなく事後確率分布が決定する。 $E[\mathbf{y}_*]$ が求める予測値である。

ガウス過程回帰は高い表現力を持つが、多手法と比べて学習コストは高い。各手法の学習コストを Table 4-2 に示す。今回の学習データセット数(約 500)では、特に問題は無く、許容範囲ではあるが、今後学習データセット数を大幅に増やす場合は、機械学習の一種である Neural Network の採用も考慮する必要がある。

Table 4-2 各手法の学習コスト

線形回帰	サポートベクター回帰	ガウス過程回帰
$O(m^2n + m^3)$	$O(mn^2)$	$O(n^3)$

n : \mathbf{x} と \mathbf{y} のデータ数

m : \mathbf{x} の次元数

・前処理

全データの 80%を学習データ、残り 20%をテストデータとして分割した。学習データで学習を行い、学習に用いていないテストデータで最終的な予測精度評価を実施した。また前処理として外れ値に頑健な Robust Scaling による規格化を実施した(Eq. 34)。

$$X = \frac{x - Q_2}{Q_3 - Q_1} \tag{Eq. 34}$$

ここで、 Q_1, Q_2, Q_3 は x の第 1~3 四分位数(データを昇順に並べ、25・50・75%に位置する値)である。

・評価値

評価値としては Eq. 35 で定義される R2 スコアを用いた。Eq. 35 中の \bar{y} は y の平均値であり Eq. 36 で表される。この値は、正解データと予測データが完全一致する場合は 1 となり、1 に近いほど精度の高い予測ができているものである。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \tag{Eq. 35}$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \tag{Eq. 36}$$

・実装

機械学習モデルの実装には、Scikit-learn⁹⁾ライブラリの各機能を用いている。

・学習結果

学習に用いていないテストデータに対する評価結果を Fig. 4-4~Fig. 4-14 に score と表記されているのが R2 スコアである。手法ごとに、横軸にシミュレーション結果(正解値)、縦軸に機械学習モデルによる予測値をプロットしている。対角線に乗るほど予測精度が高いことを示す。

気泡率(評価領域 B、X=0)、制約条件とも高い予測精度が得られた。また狭隘流路部流速を除く全てのケースで線形回帰<サポートベクトル回帰<ガウス過程回帰の順に予測精度が高いことが確認できる。

一方、狭隘流路部流速は予測が難しいことが示唆された。ただし今回評価したものは全て制約条件(3 [m/s]以上)を満たしており、今回の設計変数範囲においては最適化の上では大き

な問題にならないと考えられる。

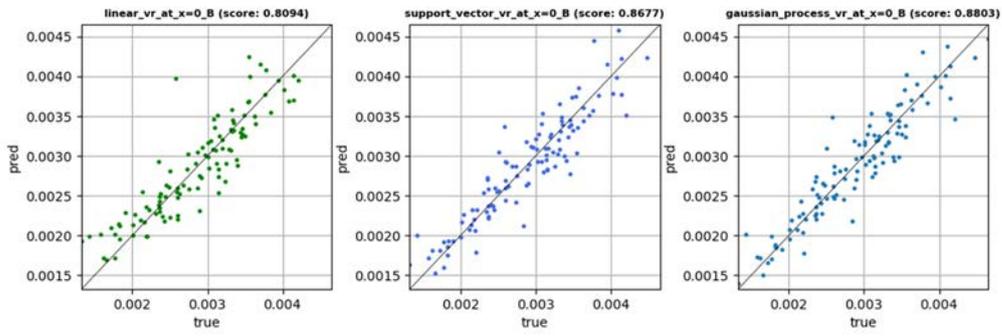


Fig. 4-4 気泡率(評価領域 B、X=0)

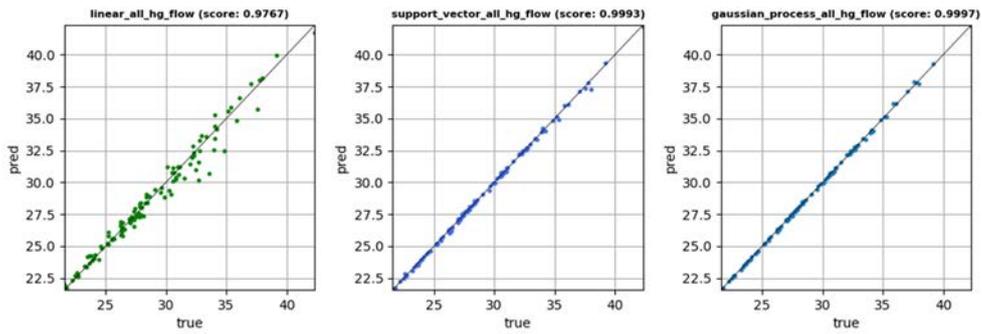


Fig. 4-5 総水銀流量

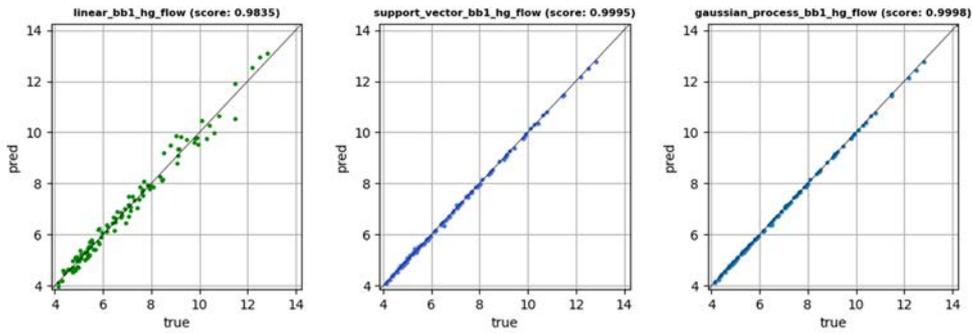


Fig. 4-6 バブラーB1 水銀流量

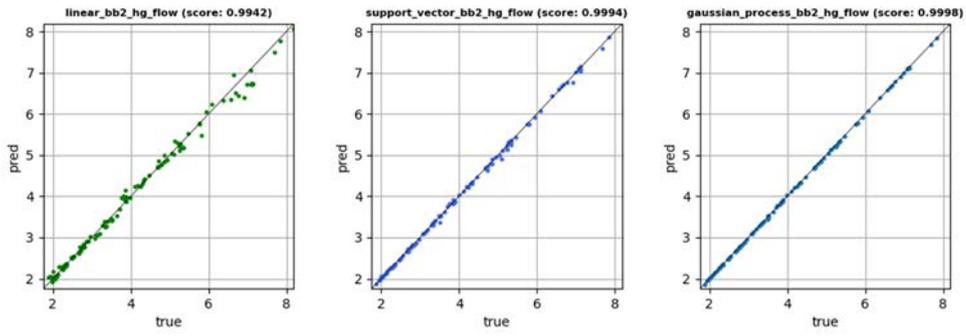


Fig. 4-7 バブラーB2 水銀流量

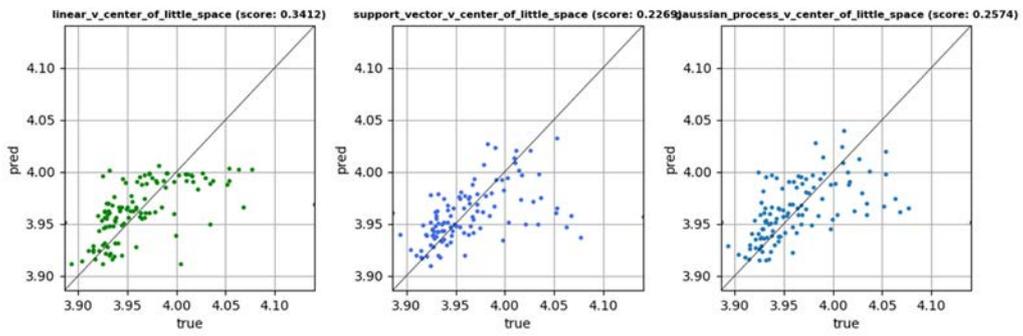


Fig. 4-8 狭隘流路部流速

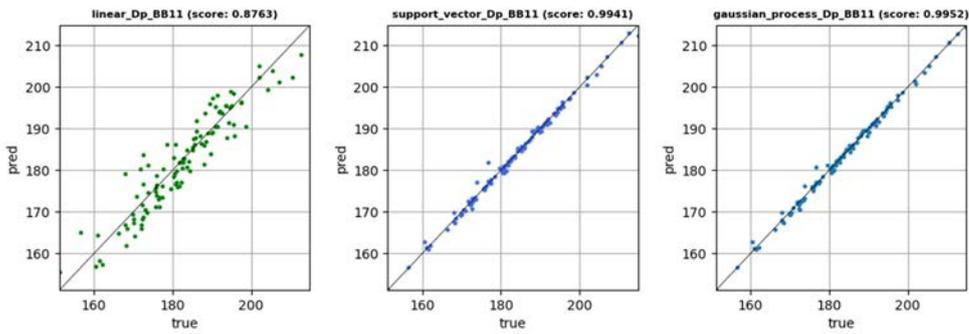


Fig. 4-9 最頻気泡直径 B1-1

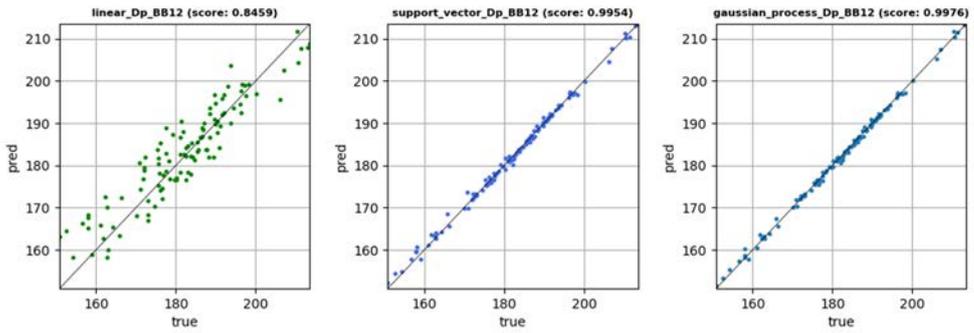


Fig. 4-10 最頻気泡直径 B1-2

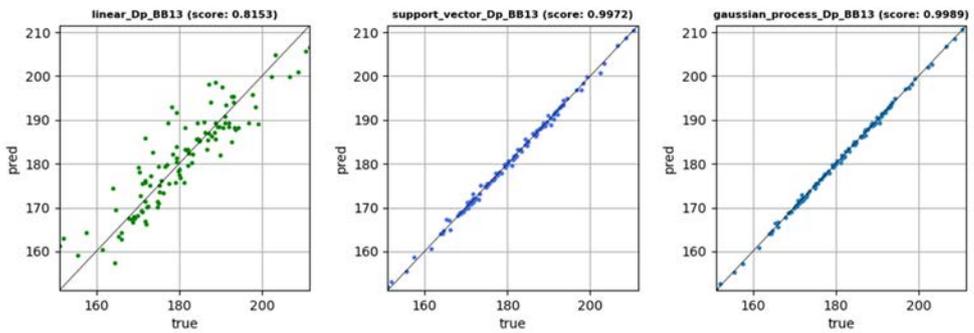


Fig. 4-11 最頻気泡直径 B1-3

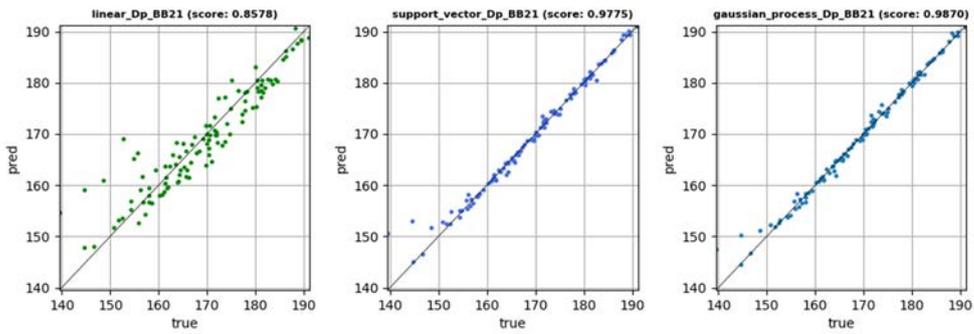


Fig. 4-12 最頻気泡直径 B2-1

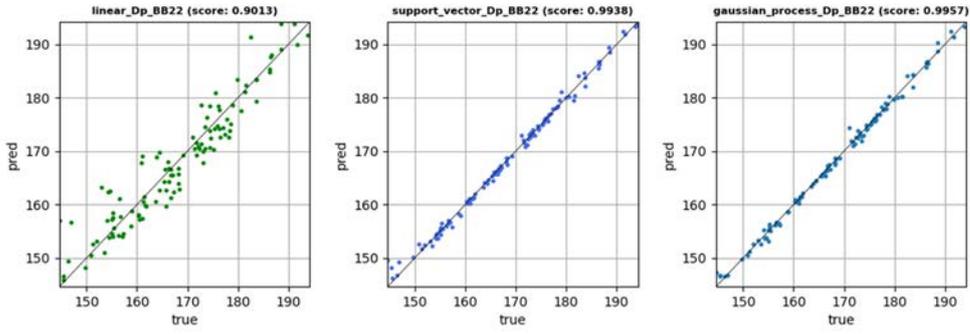


Fig. 4-13 最頻気泡直径 B2-2

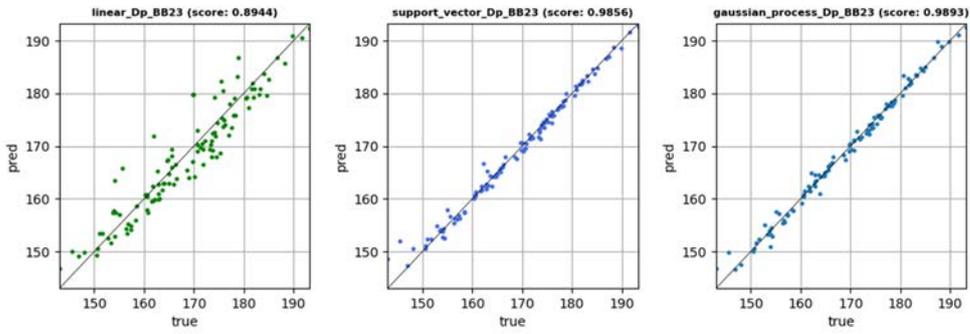


Fig. 4-14 最頻気泡直径 B2-3

4.2 最適化の実施

4.2.1 最適化に用いるサロゲートモデル

狭隘流路部流速を除く全ての変数で最も予測精度が高かったガウス過程回帰による学習モデルを用いて最適化を行う。サロゲートモデル構築時は、性能評価のためデータ全体の20%をテストデータとして確保し学習には用いなかったが、最適化に用いるサロゲートモデルは全データを使って学習を実施した。

4.2.2 制約条件の追加

これまでの解析モデルの作成等を通して設計変数間に依存関係があることがわかったため、これらの依存関係を制約条件に追加することとした。以下に依存関係および追加された制約条件を Table 4-3 に示す。

Table 4-3 最適化を実施する設計変数と依存関係

番号	最適化箇所	最適化する項目	依存する設計変数	制約条件(依存関係)
1-1	バブラーB1	位置(P1)		
1-2		入口内径(D1)	バブラーB1 位置(P1)、案内羽根角度(Θ)	$D1 = f(P1, \Theta)$
1-3		絞り部内径(D_{e1})	バブラーB1 入口内径(D1)	$\frac{D1}{2} \leq D_{e1} \leq D1$
1-4		旋回羽根角度($\theta1$)		
2-1	バブラーB2	入口内径(D2)	案内羽根角度(Θ)	$D2 = g(\Theta)$
2-2		絞り部内径(D_{e2})	バブラーB2 入口内径(D2)	$\frac{D2}{2} \leq D_{e2} \leq D2$
2-3		旋回羽根角度($\theta2$)		
3	案内羽根	案内羽根角度(Θ)		
4	圧損要素	抵抗係数 (Cd)		

ここで、D1 および D2 を表す関数 f および g は実際のメッシュサイズから検討を行い以下とした。

$$f(P1, \theta) = (0.0074614 \times \theta - 0.09) \times (P1) + (-1.966125 \times \theta + 44.1997) \quad \text{Eq. 37}$$

$$g(\theta) = \frac{(15.0 - 21.0)}{(10 - 6)} \times (\theta - 6) + 21.0 \quad \text{Eq. 38}$$

f および g の導出方法について以下に示す。 f は以下の手順で求めた。

1. P1 を横軸に、D1 を縦軸にとったグラフに対して、案内羽根角度 6°の形状 1、2 をプロットし、直線で結ぶ(Fig. 4-15)。その直線の式を Eq. 39 に示す。
2. 同様に案内羽根角度 10°の形状 3、4 をプロットし、直線で結んだ(Fig. 4-15)。その直線の式を Eq. 40 に示した。
3. Eq. 39 と Eq. 40 の傾きと θ の関係を Eq. 41 に示す。同様に Eq. 39 と Eq. 40 の切片と θ の関係を Eq. 42 に示す。
4. Eq. 41 及び Eq. 42 から、 f を求めた。

g は θ を横軸に、D2 を縦軸にとり、案内羽根角度が 6°の形状 1 と案内羽根角度が 10°の形状 3 をプロットし、それを結んだ直線の式として求めた。

また、 f の確認のため、案内羽根角度を 6°として形状 1 と 2 の中間位置にバブラーB1 を置いた場合の D1 と f による予測の直線、及び案内羽根角度を 10°として形状 3 と 4 の中間位置にバブラーB1 を置いた場合の D1 と f による予測の直線を Fig. 4-15 に示す。形状 1,2 の中間位置での D1 は、及び形状 3,4 の中間位置での D1 は、それぞれ予測直線の近くにあり、 f での予測に問題ないことがわかる。

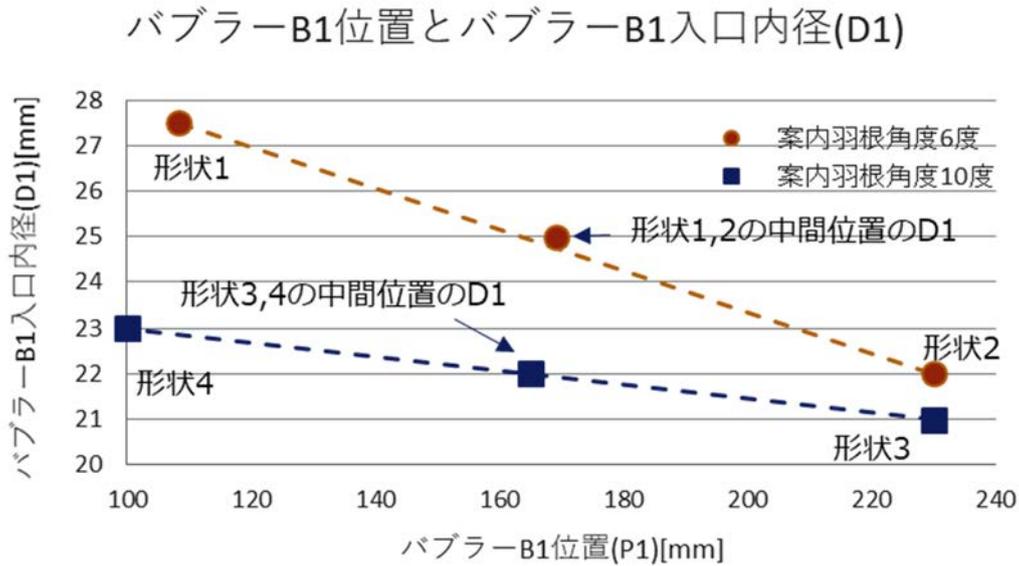


Fig. 4-15 形状 1~4 の P1 と D1 の関係

$$D1(B1) = -0.015389 \times B1 + 24.538462 \quad \text{Eq. 39}$$

$$D1(B1) = -0.04523 \times B1 + 32.402961 \quad \text{Eq. 40}$$

$$0.0074614 \times \theta - 0.09 \quad \text{Eq. 41}$$

$$-1.966125 \times \theta + 44.1997 \quad \text{Eq. 42}$$

・バブラーB1 位置と案内羽根角度間の制約

Table 3-26 から、学習データ作成時のバブラーB1の位置、P1 および案内羽根角度は 4 点のみのサンプリングとなるが、P1 については設計変数の最大最小値ではなく、若干内側の値を用いているケースがある。このため、設計変数の最大最小値の範囲で最適化を行うと、機械学習モデルの外挿領域の設計変数が選ばれる可能性がある。

これを避けるために、案内羽根角度およびバブラーB1位置の関係が内挿領域となるよう以下の制約条件を追加した。

$$P1 > -2.1 \times \theta + 121.0 \quad \text{Eq. 43}$$

この関係を Fig. 4-16 に示す。

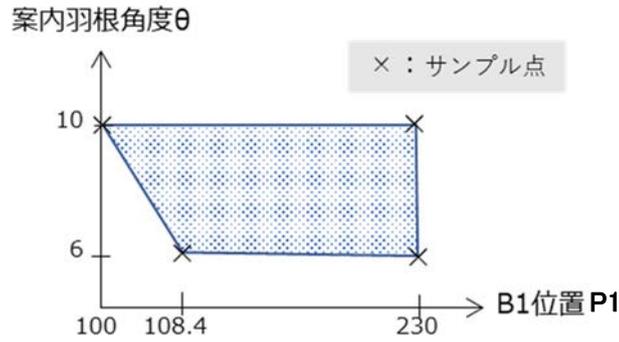


Fig. 4-16 P1 と案内羽根角度のサンプル点

・スワール比

生成気泡半径の推定式(Eq. 19)の適用範囲は、スワール比が下記の Eq. 44 の範囲である。このため Eq. 44 を制約条件に追加した。

$$\frac{V_{\phi e}}{V_{Le}} > 2 \quad \text{Eq. 44}$$

ここで

$$V_{\phi e} = V_{\phi} \times \left(\frac{D}{D_e}\right)$$

$$V_{\phi} = 1.1364 \times \tan\theta \times V_L \quad \text{Eq. 45}$$

$$V_{Le} = V_L \times \left(\frac{D}{D_e}\right)^2$$

であり、 V_L はバブラー内の軸方向平均速度である。

最終的な最適化の制約条件を Table 4-4 に示す。

Table 4-4 最適化条件

	機械学習データ	下限	上限
設計変数	B1 位置(P1)	100.0[mm]	230.0[mm]
	案内羽根角度(Θ)	6[度]	10[度]
	B1 絞り部内径(D_{e1})	10.5[mm]	27.5[mm]
	B1 旋回羽根角度(θ_1)	55[度]	75[度]
	B2 絞り部内径(D_{e2})	7.5[mm]	21.0[mm]
	B2 旋回羽根角度(θ_2)	55[度]	75[度]
	抵抗係数	5.0	30.0
制約条件	生成最頻気泡直径		200 [μm]
	総水銀流量	35 [m^3/h]	
	バブラー部水銀流量	(B1) 13 [m^3/h] (B2) 7 [m^3/h]	
	狭隘流路部流速	3 [m/s]	
	水銀流量	B1>B2	
	B1 絞り部内径(D_{e1})	$\frac{D_1}{2} \leq D_{e1}$	$D_{e1} \leq D_1$
	B2 絞り部内径(D_{e2})	$\frac{D_2}{2} \leq D_{e2}$	$D_{e2} \leq D_2$
	B1 位置	$-2.1 \times \theta + 121.0$	
	スワール比	$\frac{V_{\phi\varepsilon}}{V_{Le}} > 2$	
目的関数 (最大化)	気泡率 (評価領域 B、X=0)		

4.2.3 最適化実行

制約条件付きの最適化問題となるため、制約条件に対応した手法が必要となる。本件では逐次二次計画法を用いた最適化を行った。逐次二次計画法は局所最適化のため、初期値依存性がある。このため初期値をランダムに変えて 50 回の最適化を行い、最も良い結果を採用した。

・逐次二次計画法

逐次二次計画法¹⁰⁾は、連続関数の制約付き最適化問題に対する代表的な手法の一つであり、様々な最適化ツールに組み込まれている。

対象となる最小化問題を以下とする。

$$\begin{aligned} & \text{Minimize } f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to } g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m \\ & \quad h_l(\mathbf{x}) = 0, l = 1, \dots, r \end{aligned} \quad \text{Eq. 46}$$

ここで、目的関数 f および制約関数 g, h はいずれも微分可能であるとする。逐次二次計画法では、この問題を近似する二次計画問題を繰り返し解くことで、局所最適解を得る。基本的なアルゴリズムは繰り返し探索であり、初期パラメータベクトル \mathbf{x}_0 から開始し、 $(k+1)$ 回の繰り返し後の結果 \mathbf{x}_{k+1} は以下の漸化式で得られる。

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{a}_k \mathbf{d}_k \quad \text{Eq. 47}$$

ここで \mathbf{d}_k は k ステップでの探索方向であり、 \mathbf{a}_k はステップ幅である。各反復で \mathbf{d}_k を以下の二次計画問題として求める。

$$\begin{aligned} & \text{Minimize } \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \mathbf{B}_k \mathbf{d} + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \\ & \text{subject to } g_i(\mathbf{x}_k) + \nabla g_i(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \leq 0, i = 1, \dots, m \\ & \quad h_l(\mathbf{x}_k) + \nabla h_l(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} = 0, l = 1, \dots, r \end{aligned} \quad \text{Eq. 48}$$

行列 \mathbf{B} の更新は、元の問題のラグランジュ関数のヘッセ行列を近似するように生成される。

・実装

最適化機能の実装には、オープンソース最適化ライブラリである OpenMDAO¹¹⁾を利用した。OpenMDAO 内部の逐次二次計画法の実装は¹¹⁾にもとづいている。

・最適化結果

Table 4-5 に、上位 2 件の最適化結果を示す。なお、目的関数の欄にはフィッティングの誤差としてガウス過程回帰で求めた標準偏差も記載している。Table 4-5 に示すように、参考(ベースモデル)列と比べて、制約条件を全て満たした上でより高い気泡率の設計変数の組合せを得ることができた(ベースモデル 0.002126→最適化後 0.002592)。

Table 4-5 最適化結果 (1/2)

	機械学習 データ	下限	上限	最適化結果 1	最適化結果 2	参考 ベースモデル
設計 変数	B1 位置 (P1)	100.0[mm]	230.0[mm]	108.4	108.4	108.4
	案内羽根角 度(θ)	6[度]	10[度]	6	6	6
	B1 絞り部 内径(D_{e1})	10.5[mm]	27.5[mm]	27.49984	27.49984	26.4
	B1 旋回羽 根角度(θ_1)	55[度]	75[度]	64.76074	64.75917	62
	B2 絞り部 内径(D_{e2})	7.5[mm]	21.0[mm]	19.47052	19.60491	20.0
	B2 旋回羽 根角度(θ_2)	55[度]	75[度]	62.21900	62.05616	63
	抵抗係数	5.0	30.0	24.65600	25.15675	25.0
制約 条件	生成最頻 気泡直径		200[μm]	(B11)179.668 (B12)179.920 (B13)176.634 (B21)175.743 (B22)176.393 (B23)178.415	(B11)179.702 (B12)179.942 (B13)176.644 (B21)175.810 (B22)176.456 (B23)178.440	(B11)191.569 (B12)191.700 (B13)187.916 (B21)172.294 (B22)173.004 (B23)174.867
	総水銀流量	35[m ³ /h]		35	35	35.1
	バブラー部 水銀流量	(B1) 13[m ³ /h]		(B1)13	(B1)13	(B1) 13.2
		(B2) 7[m ³ /h]		(B2)7	(B2)7.113	(B2) 7.1

Table 4-5 最適化結果 (2/2)

	機械学習 データ	下限	上限	最適化結果 1	最適化結果 2	参考 ベースモデル
制約 条件	狭隘流路部 流速	3[m/s]		3.99974	3.99862	3.884
	水銀流量	B1>B2		○	○	○
	B1 絞り部 内径(D_{e1})	$\frac{D1}{2} \leq D_{e1}$	$D_{e1} \leq D1$	D1=27.49984	D1=27.49984	D1=27.5
	B2 絞り部 内径(D_{e2})	$\frac{D2}{2} \leq D_{e2}$	$D_{e2} \leq D2$	D2=21	D2=21	D2=21
	B1 位置	$-2.1 \times \theta + 121.0$		B1min=108.4	B1min=108.4	B1min=108.4
	スワール比	$\frac{V_{\phi e}}{V_{Le}} > 2$		(B1) 2.4017 (B2)2	(B1) 2.4105 (B2)2	(B1)2.0517 (B2)2.1241
目的 関数 (最大 化)	気泡率 (評価領域 B、X=0)			0.002592 標準偏差=0.000270	0.002584 標準偏差=0.000272	0.002126

4.2.4 検証解析

最適化結果の妥当性を検証するために、最適化した設計変数を用いて気泡流動解析を実施した。また、その結果の気泡率を最適化前のモデル(Table 4-5 のベースモデル)での気泡流動解析で得られる気泡率と比較した。さらに、製作時における図面指示等を考慮し、最適化された設計変数を切りのよい変数としたモデルでの気泡率(最適化結果 1')も評価した。

基本的な解析条件は 3.1.3 項と同様とし、設計変数のモデル化方法は 3.2.3 項と同様の方法を用いた。水銀流入出の境界条件は入口及び出口をそれぞれ 0.23 MPa、0 MPa とした。注入する気泡は、3.2.4 項に示したように水銀の速度に応じて気泡径分布を変更した。

気泡流動解析に用いた設計変数を Table 4-6 に示す。

Table 4-6 検証解析での設計変数

	Θ	P1	D1	θ_1	D _{e1}	D2	θ_2	D _{e2}	抵抗係数
参考(ベースモデル)	6	108.4	27.5	62	26.4	21.0	63	20	25.0
最適化結果 1	6	108.4	27.5	64.76	27.5	21.0	62.22	19.47	24.66
最適化結果 1'	6	108.4	27.5	64.5	27.5	21.0	62	19.5	24

Fig. 3-67～Fig. 3-69 に示す領域での気泡率を Table 4-7～Table 4-10 に示す。最適化結果 1 の領域 B の $x=0$ での気泡流動解析における気泡率は、機械学習における気泡率よりも若干高いが標準偏差内に収まっている。また、機械学習結果と同様に、気泡流動解析結果においても最適化結果 1 はベースモデル結果の気泡率より 20%程度増加している。これらから、機械学習の妥当性を検証するとともに、最適化した設計変数により、標的容器先端近傍での気泡率増加の効果を確認した。さらに、設計時の図面指示を考慮した最適化結果 1'では、最適化結果 1 との比較では評価領域及び場所によって大小の差異はあるがほぼ同じ値となり、ベースモデルよりも気泡率が増加している。

Table 4-7 評価領域 A の気泡率(気泡流動解析結果)

	$x=-70\text{mm}$	$x=-35\text{mm}$	$x=0\text{mm}$	$x=35\text{mm}$	$x=70\text{mm}$
ベースモデル	0.001455	0.001561	0.001605	0.001661	0.001464
最適化結果 1	0.001638	0.001863	0.001967	0.002010	0.001992
最適化結果 1'	0.001653	0.001851	0.001915	0.001959	0.002012

Table 4-8 評価領域 B の気泡率(気泡流動解析結果)

	$x=-70\text{mm}$	$x=-35\text{mm}$	$x=0\text{mm}$	$x=35\text{mm}$	$x=70\text{mm}$
ベースモデル	0.002263	0.002315	0.00221	0.002076	0.001734
最適化結果 1	0.002434	0.002716	0.002618	0.002395	0.002177
最適化結果 1'	0.002587	0.002693	0.002555	0.002324	0.00214

Table 4-9 評価領域 C の気泡率(気泡流動解析結果)

	$x=-70\text{mm}$	$x=-35\text{mm}$	$x=0\text{mm}$	$x=35\text{mm}$	$x=70\text{mm}$
ベースモデル	0.000689	0.00074	0.000834	0.000862	0.000749
最適化結果 1	0.000874	0.000878	0.001017	0.001031	0.000829
最適化結果 1'	0.000926	0.001044	0.001216	0.001190	0.001044

Table 4-10 評価領域 D の気泡率(気泡流動解析結果)

	x=-70mm	x=-35mm	x=0mm	x=35mm	x=70mm
ベースモデル	0.001479	0.001617	0.001407	0.001266	0.001259
最適化結果 1	0.001714	0.001684	0.001581	0.001404	0.001383
最適化結果 1'	0.001586	0.001644	0.001586	0.001444	0.001393

4.3 考察

どのように最適形状が決まっているかを相関係数から考察した。Table 4-5 の最適化結果より、制約条件の中で制約条件の下限もしくは上限に近い値をとり、最適化結果に大きな影響を与えているのはバブラーB1 及び B2 を通る水銀流量及び総水銀流量と考えられる。Fig. 4-2 に示した各設計変数、制約条件、目的関数の相関係数について、設計変数と B1 及び B2 の水銀流量及び総水銀流量、目的関数のみを表示したのが、Fig. 4-17 である。Fig. 4-17 より、B1 位置、P1 と目的関数は強い正の相関があるため、P1 を大きくする(バブラーB1 を前に出す)ことで目的関数を大きくすることができるが、同時に制約条件の B1 水銀流量及び総水銀流量と強い負の相関があり、バブラー前に出すことで、水銀流量が減り、制約条件を満たせなくなる。Fig.4-18 に B1 の旋回羽根角度を 64.7° とした場合の P1 と目的関数及び水銀流量、 Q_{Hg} 、 $Q_{Hg,B1}$ の関係を示す。前述したように、目的関数(気泡率)は P1 とともに上昇するが、水銀総流量、 Q_{Hg} 及び B1 の水銀流量、 $Q_{Hg,B1}$ は P1 とともに減少し、水銀流量の制約条件を満たすためには P1 は 108.4 mm よりも後方に配置しなければならない。そのため、最適形状では、B1 位置、P1 は制約条件の縛りにより下限値をとっている。

案内羽根角度、 Θ の最適形状は今回の条件の下限値となっている。案内羽根角度は目的関数と相関はほとんどないが、B1 及び B2 の水銀流量及び総水銀流量と負の相関を持っているため、最適形状では下限値をとっていると考えられる。同様に B1 絞り部内径も、目的関数と相関はほとんどないが、B1 及び B2 の水銀流量及び総水銀流量と強い正の相関を持っているため、最適形状では上限値をとっていると考えられる。

B1 の旋回羽根角度、 θ_1 は、目的関数と正の相関を持ち、B1 水銀流量と強くはないが負の相関を持っている。Fig.4-19 に P1 を 108.4 mm とした場合の B1 の旋回羽根角度、 θ_1 と目的関数及び水銀流量、 Q_{Hg} 、 $Q_{Hg,B1}$ の関係を示す。 θ_1 の増加とともに、目的関数は増加するが、水銀流量は減少する。水銀流量の制約条件を満足するためには、 θ_1 を 64.7° 以下にしなければならないため、最適形状は 64.7° となっている。

B2 絞り部内径は B2 水銀流量と強い正の相関を、総水銀流量と弱い正の相関を持っているため、上限値をとりたいところだが、目的関数とも弱い負の相関を持っているため、上限値をとっていないと考えられる。

B2 旋回羽根角度は、B2 水銀流量と弱い負の相関があり、スワール比の制約条件を満たす下限値をとっている。

圧損要素の抵抗係数は総水銀流量と強い負の相関を持っているが、他とはほとんど相関していない。そのため、総水銀流量がボトルネックとならない範囲で値が変動できると考えられる。そのため、最適形状1と2で大きく値が異なっている。

以上をまとめると、設計変数と(制約条件の)B1及びB2の水銀流量及び総水銀流量、目的関数の関係は、制約条件の縛りによって最適形状は決まっており、B1及びB2の水銀流量及び総水銀流量の制約により、最適形状が大きな影響を受ける。このため、これらの制約条件を変更することで、最適形状が大きく異なる可能性があり、さらなる最適化が期待できる。すなわち、本件の最適化では作業コストを低減するため、水銀流量を確保することで標的容器の温度が設計基準よりも高くないことを保証したが、熱流動解析を実施して標的容器の温度を制約条件にすることで、さらなる最適化が期待できる。

また、B1位置と目的関数の相関が強く出ているが、B1位置のサンプリング数は少ないため、サンプリング数を増やすことにより、より精度の高い予測と最適化が見込まれる。

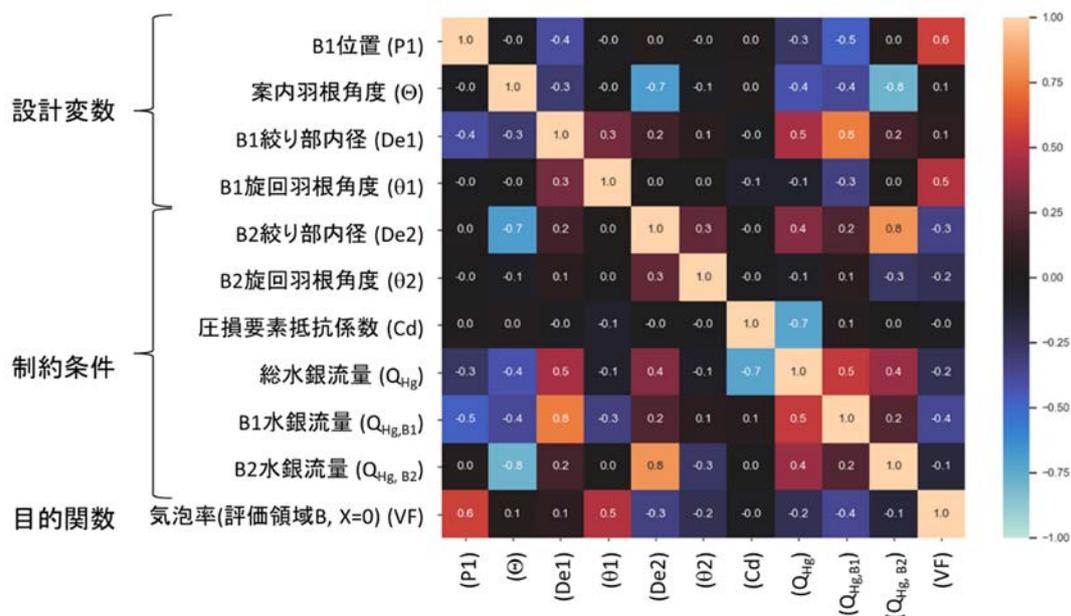


Fig. 4-17 相関係数(抜粋)

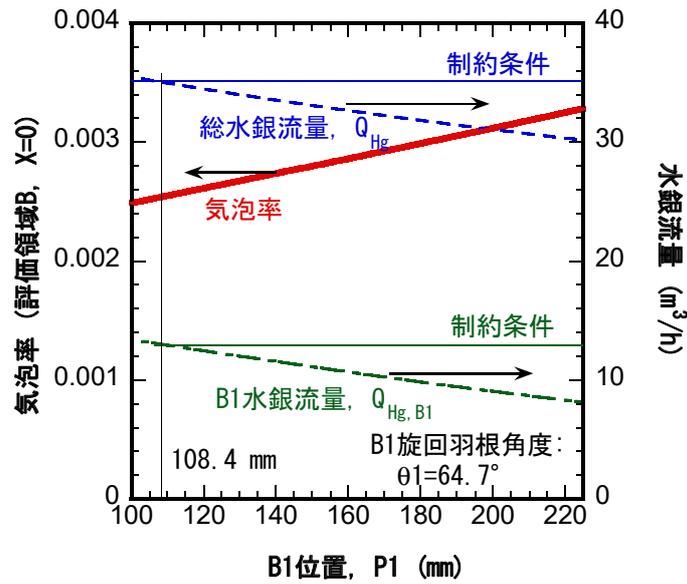


Fig.4-18 B1 位置、P1 と目的関数及び水銀流量、 Q_{Hg} 、 $Q_{Hg,B1}$ の関係

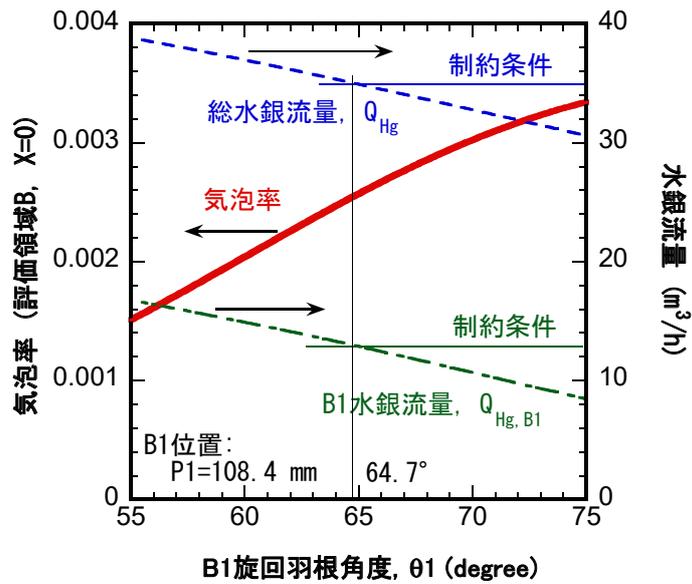


Fig.4-19 B1 の旋回羽根角度、 θ_1 と目的関数及び水銀流量、 Q_{Hg} 、 $Q_{Hg,B1}$ の関係

5. まとめ

水銀標的容器内の水銀中の気泡分布を最大化することを目的として、以下の作業を実施した。

- ✓ 事前解析により機械学習データの生成で解析するモデルのバブラーB2 位置とバブラー回転方向を決定した。
- ✓ 機械学習データの生成のため、1000 ケースの解析を実施した。このうち、収束した547 ケースを機械学習用の学習データとして用いた。
- ✓ 機械学習の一つであるガウス過程回帰によるサロゲートモデルを構築し、最適化の準備をした。
- ✓ 最適化を実施し、制約条件のなかで最適形状を得ることができた。

以上の作業により、得られた最適化された設計変数の組合せを Table 5-1 に、その模式図を Fig.5-1 に示す。

なお、今回の評価では、標的容器の温度が設計条件を超えないように、これまでの評価実績から水銀の流量を規定し、それを制約条件とした。このため、温度に関しては安全裕度をかなり大きくとっている可能性がある。今後、機械学習データの生成において、容器温度も評価対象とし、それを制約条件としてさらなる最適化を目指す予定である。

また、バブラーに関して設計変数と圧力損失や生成気泡径の関係について、さらに精度の良い評価手法を確立して、機械学習データを生成する。

Table 5-1 最適化された設計変数

	最適化箇所	最適化する項目	最適化
1-1	バブラーB1	位置(P1)	108.4~108.7
1-2		入口内径(D1)	27.5
1-3		絞り部内径(D _{e1})	27.5
1-4		旋回羽根角度(θ1)	64.7
2-1	バブラーB2	入口内径(D2)	21.0
2-2		絞り部内径(D _{e2})	19.5
2-3		旋回羽根角度(θ2)	62.2
3	案内羽根	案内羽根角度(Θ)	6
4	圧損要素	抵抗係数(Cd)	23.2~23.9

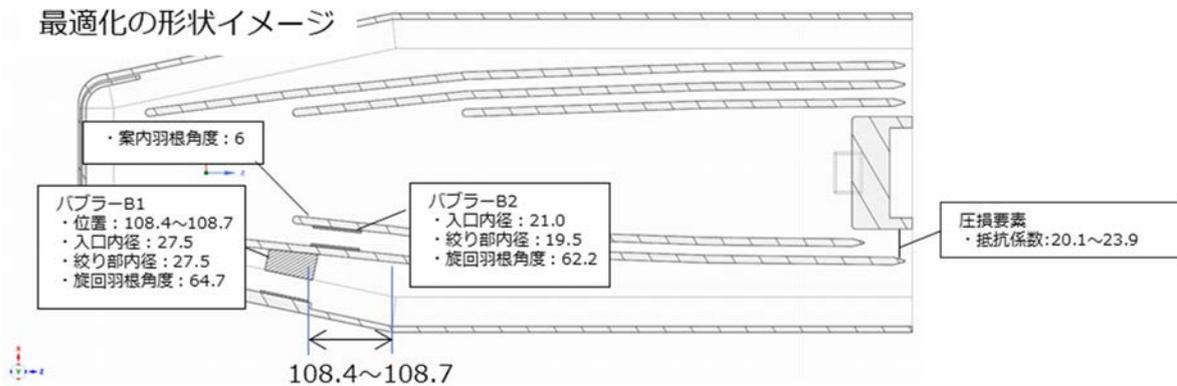


Fig. 5-1 最適化形状のイメージ

謝 辞

茨城大学工学部機械工学科西泰行教授には、流動解析及び機械学習を進める上で貴重な助言と協力を賜りました。また、本報告書の執筆にあたっては、J-PARC センター 野村昌弘氏に貴重な助言を頂きました。ここに深く感謝いたします。

参考文献

- 1) H. Kogawa, T. Naoe, H. Kyoto, et al., “Development of microbubble generator for suppression of pressure waves in mercury target of spallation source,” J. Nucl. Sci. Technol., vol.52, no.12, pp.1461- 469 (2015).
- 2) H. Kogawa, T. Naoe, M. Futakawa, et al., “Mitigation technologies for damage induced by pressure waves in high-power mercury spallation neutron sources (IV) -Measurement of pressure wave response and microbubble effect on mitigation in mercury target at J-PARC-,” J. Nucl. Sci. Technol., vol.54, no.7, pp.733-741 (2017).
- 3) ANSYS Inc., ANSYS Fluent Theory Guide, Release 19.2 (2018).
- 4) A. Özcan, S. Kollmannsberger, J. Jomo, E. Rank, “Residual stresses in metal deposition modeling: discretizations of higher order”, Comput. Math. with Appl., vol.78, no.1, pp.2247-2266 (2019).
- 5) 日本機械学会, 「伝熱工学資料」改訂第4版 (1986).
- 6) M. A. Bouhlel, J. T. Hwang, N. Bartoli, R. Lafage, J. Morlier and J. R. R. A. Martins, A Python surrogate modeling framework with derivatives, Advances in Engineering Software, vol.135, 102662 (2019).
- 7) C.-C. Chang and C.-J. Lin, LIBSVM: A Library for Support Vector Machines (2011).
- 8) C.E. Rasmussen and C.K.I. Williams, “Gaussian Processes for Machine Learning,” the MIT Press (2005).

- 9) F. Pedregosa et al., Scikit-learn: Machine Learning in Python, JMLR, Vol.12, pp. 2825-2830 (2011).
- 10) D. Kraft, "A software package for sequential quadratic programming," Tech. Rep. DFVLR-FB 88-28, (1988).
- 11) J. S. Gray, J. T. Hwang, J. R. R. A. Martins, K. T. Moore, and B. A. Naylor, "OpenMDAO: An Open-Source Framework for Multidisciplinary Design, Analysis, and Optimization," Structural and Multidisciplinary Optimization (2019).

