

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：52605

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03885

研究課題名（和文）振動マランゴニ対流の高抑制制御を実現するための縮約モデル開発

研究課題名（英文）Development of a Reduced Model for Achieving High Suppression Control of Oscillatory Thermocapillary Convection

研究代表者

工藤 正樹 (Kudo, Masaki)

東京都立産業技術高等専門学校・ものづくり工学科・准教授

研究者番号：60634524

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：高品位バルク単結晶材の製造法であるゾーンメルト法において、振動状態の温度差マランゴニ対流によって単結晶材に欠陥が生じるために歩留まりを高くできず、低コスト化が難しいという課題が残っている。そこで本研究では、振動マランゴニ対流を大幅に抑制できる制御手法を確立することを目標として次元縮約モデル（ROM）を開発した。

その結果、Galerkin-ROMの開発に成功した。またROMに用いる高精度かつ高データ量の流速および温度データを取得できた。さらにROMのモデル化誤差を低減した。最後にROMの構築法の1つである動的モード分解および流れ場の予測法の1つである拡張カルマンフィルタの改良に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、実物の振動マランゴニ対流を対象として高精度なフィードフォワード制御を実装するという点から、マランゴニ対流のみとどまらず、流体力学分野の発展に学術的に大きく貢献するものである。またゾーンメルト法の高度化により、高品位の単結晶が高い歩留まり率でできることになれば、工業的にも大きく貢献するものである。

研究成果の概要（英文）：In the zone melting processing, which is a manufacturing technique for high-quality bulk single crystals, defects occur in the single crystal due to oscillatory thermocapillary convection, making it difficult to achieve high yield and reduce costs. Therefore, this study aims to establish a control method that can significantly suppress oscillatory thermocapillary convection by developing a reduced order model (ROM). As a result, we successfully developed a Galerkin-ROM. We also obtained high-accuracy and high-volume flow velocity and temperature data for use in the ROM. Furthermore, we reduced the modeling errors of the ROM. Finally, we succeeded in improving dynamic mode decomposition, one of the methods for constructing ROMs, and the extended Kalman filter, one of the methods for predicting flow fields."

研究分野：熱工学，流体力学

キーワード：表面張力差対流 次元縮約モデル 3次元粒子画像流速計測法 モデル化誤差の低減 動的モード分解 拡張カルマンフィルタ

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

近年 IoT(Internet of Things)や省エネ化が急速に進む中、通信、照明や二次電池などの研究開発が急ピッチで進められている。これらの基盤となる半導体、レーザ、LED、二次電池材等の原料となる単結晶材の高品位化と低コスト化が強く求められている。ゾーンメルト法という高品位単結晶育成技術があり、その中でもチョコラルスキー法は大口径結晶、フローティングゾーン法では超高純度結晶の製造に適している。しかし、結晶溶融部に生ずる振動状態のマランゴニ対流によって、単結晶材に欠陥が生じることで歩留まりを高くできず、低コスト化が困難という課題が残されている。振動マランゴニ対流のメカニズムは未解明であり、未だ有効な制御手法が確立されていない。

2. 研究の目的

本研究では高精度なフィードフォワード制御をリアルタイムで実現するための縮約モデル作りを目的とする。ここでゾーンメルト法を全て対象とすると膨大な時間がかかるため、ゾーンメルト法の基礎となる薄液膜モデル(図1)を対象とする。高精度なフィードフォワード制御をリアルタイムで実現するためには、熱流体の運動方程式等の縮約モデル(以下 ROM)を利用して制御出力の計算時間を大幅に削減する。これに加えて ROM のモデル化誤差が制御の成否に大きく係わるので、モデル化誤差の低減を試みる。さらに流れ場の予測精度を向上させるための手法を開発する。

3. 研究の方法

① 数値シミュレーションデータを用いた ROM の開発

熱流体の運動方程式等の ROM の構築には、数値シミュレーションにより得られる広範な流速・温度分布を用いるのが成功の鍵である。そこで、研究代表者らが開発してきた薄液膜の3次元非定常数値シミュレーション技術を利用する ROM には正規直交分解(以下 POD)と Galerkin Projection を用いる(以下 G-ROM)。正規直交分解は時系列変化の大きい変動に追従しづらいという知見があり、うまく適用できない場合を想定して動的モード分解法の計算コードも開発する。数値シミュレーションおよび ROM の開発は代表者らが担当し、動的モード分解法の開発は研究分担者らが担当した。

② ROM 調整用実験データの取得

数値シミュレーションと同一条件で振動流の流速・温度分布を計測する。流速分布の測定には3次元粒子画像流速計測法である Tomographic Stereo PIV(以下 TSPIV)を用いる。また、温度分布の測定には赤外線カメラを用いる。この研究項目は研究代表者らが担当した。

③ ROM のモデル化誤差の低減

モデル化誤差については2通り想定した。1つめは ROM を構築する際に、速度場や温度場の大きな構造を形成するエネルギーの高い POD モードのみを用い、小さな構造を形成するエネルギーの低い POD モードを切り捨てることで計算負荷を低減するが、エネルギーの低い POD モードを切り捨てる事により入力データとの間に誤差が生じることである。他で2つめは数値シミュレーションにより得られた ROM の振る舞いは、少なからず実験データと誤差を生じることである。1つめについてはクロージャモデルを適用する。これにより、勘定に入れるモード数を最小限にして計算負荷を低く抑えた状態で推定精度を向上させる。2つめについては数値シミュレーションデータを実験データと融合させるデータ同化を適用する。この研究項目は研究代表者らが担当した。

流れ場の予測

流れ場の予測において拡張カルマンフィルタは有効な方法の1つである。拡張カルマンフィルタは対象とするシステムのモデルを利用して状態を予測するため、予測精度はモデル化の精度に依存する。本研究では対象とするシステムのモデル化に物理情報に基づくニューラルネットワークを用いる方法を提案する。この研究項目は研究分担者らが担当した。

4. 研究成果

① 数値シミュレーションデータを用いた ROM の開発

図2に G-ROM の入力データである、数値シミュレーションデータから抽出した主流(x方向)

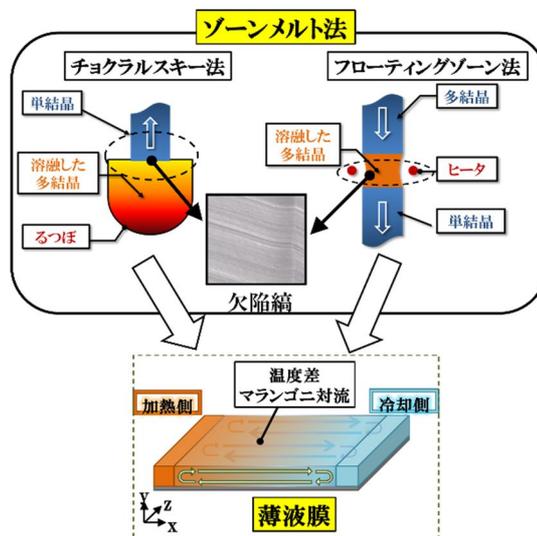
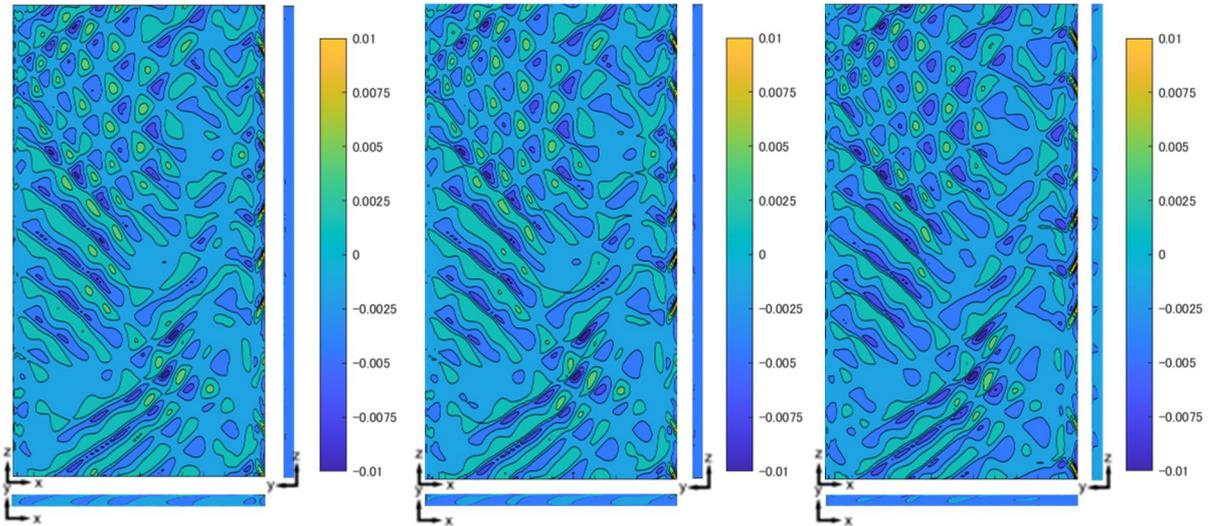


図1 薄液膜モデルとゾーンメルト法



(a) 数値シミュレーションで得た u' (G-ROM の入力データ) (b) 2つの POD モードで再構築した u' (c) G-ROM で推定した u'

図2 薄液膜の自由表面を含む3断面における振動流の瞬時速度 u' の等値線図 (時刻 1.0[s] 秒後, 自由表面 (x - z 断面) は $y=1.2$ [mm] ($y=0 \sim 1.2$ [mm]), x - y 断面は $z=0$ [mm] ($z=0 \sim 50$ [mm]), y - z 断面は $x=30$ [mm] ($x=0 \sim 30$ [mm]) のデータである.)

の瞬時速度 u' , 最もエネルギーの高い POD モードとその次に高い POD モードの2つで再構築した u' , および本研究で開発した G-ROM による u' の推定値を示す. ここでは最もエネルギーの高い POD モードとその次に高い POD モードの2つを用いて G-ROM を構築した. 図2(a)と(b)を比較すると, 2つの POD モードにより振動流の構造がうまく捉えられていることがわかる. 例えば渦構造の位置, 長さや波長がおよびその振幅がほぼ一致している. 次に図2(a)と(c)を比較すると, 本研究で開発した G-ROM にて, 入力データである数値シミュレーションデータを再現できていることがわかる.

動的モード分解は時系列データを解析する手法であり流体现象のモデル化に用いられる. しかしながらセンサからデータを取得する際にノイズや外れ値が含まれることがあるため, ノイズと外れ値の影響を抑えた推定を行う必要がある. 本研究では全最小二乗法と M 推定を用いたノイズと外れ値に対してロバストな動的モード分解を提案した. そして線形システムと非線形システムに対して提案手法を適用し有効性を確認した.

② ROM 調整用実験データの取得

振動流に対して, ROM 調整に活用できる高精度かつデータ量が豊富な3次元3成分流速データおよび薄液膜自由表面の温度データを取得できた. さらに数値シミュレーションでしかわからなかった温度場と速度場の関係について, 実験データを用いて検証した. 具体的には, 薄液膜自由表面の温度分布に自由表面近傍の流速分布を重ね合わせることで温度場と速度場を同時に可視化し, 数値シミュレーション結果と同一の関係があることを明らかにした(図3).

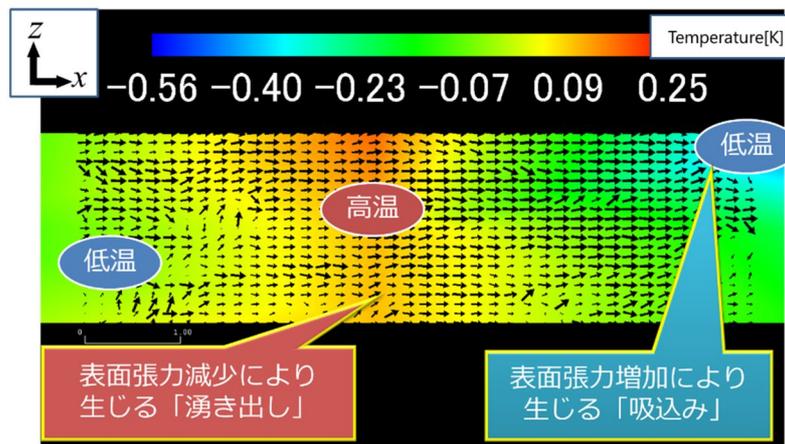


図3 液膜自由表面における温度-速度場の構造

③ ROM のモデル化誤差の低減

1つめのモデル化誤差について, 薄液膜内温度差マランゴニ対流の基礎モデルである2次元の

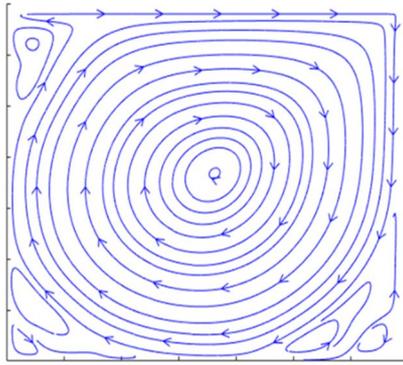


図4 2次元の天井駆動
キャビティ流れ

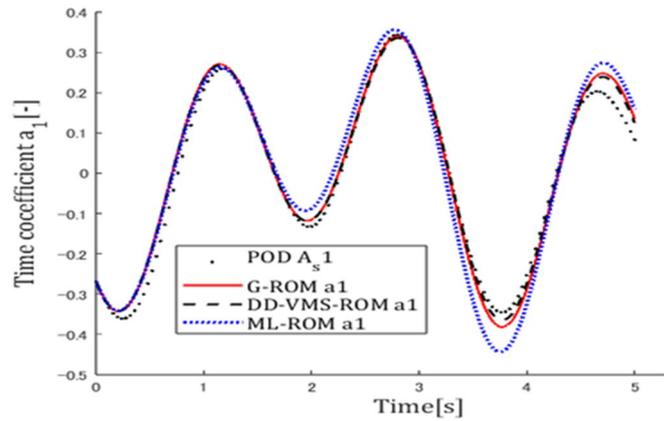


図5 最も大きなエネルギーを有する
POD モードの時間係数 a_1 の時系列

天井駆動キャビティ流れ（図4）を利用してクロージャモデルの効果を確認した。G-ROM，古典的なクロージャモデルである Mixing Length ROM（以下 ML-ROM），最新のクロージャモデルである Data-Driven Variational MultiScale ROM（以下 DD-VMS-ROM）の3通りで調査した結果，DD-VMS-ROM によりモード切り捨てによるモデル化誤差を低減できることが分かった。図5に最も大きなエネルギーを有する POD モードの時間係数 a_1 の時系列を示す。POD で求めた a_1 を基準して各手法を比較すると，3.5[s]付近までは G-ROM と DD-VMS-ROM の推定値は一致し，3.7[s]付近で両者ともに POD から外れるものの，DD-VMS-ROM の方が POD 解に近い値を示すことが分かる。一方で，ML-ROM は G-ROM，DD-VMS-ROM と近い値をとるものの，所々で値が外れることが見て取れる。

2つめのモデル化誤差について，文献調査の結果，逐次データ同化手法であるアンサンブルカルマンフィルタが適していると判断できたため，計算用コードの実装に向けた調査およびコーディングを行った。TSPIV で取得した3次元流速データを用いてデータ同化が適切に行われる条件を探索した。

④流れ場の予測

対象のシステムをモデル化する物理情報に基づくニューラルネットワークとして本研究ではハミルトニアンニューラルネットワークを採用した。ハミルトニアンニューラルネットワークはシステムのエネルギーを表すハミルトニアンを推定することにより，システムの物理情報を考慮した推定を行うことができる。対象とするシステムをハミルトニアンニューラルネットワークにより近似し，ハミルトニアンニューラルネットワークに対して拡張カルマンフィルタを構成するアルゴリズムを提案した。そしてハミルトン系の1つである Henon-Heiles 系に対して提案手法を適用し，従来手法よりも予測精度が高いことを確認した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 K. Tanaka, M. Kudo and S. Obayashi
2. 発表標題 Development of reduced order models for controlling unsteady thermocapillary convection
3. 学会等名 Proceedings of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022) IFS Collaborative Research Forum in the 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 伊藤 興希, 工藤 正樹, 西野 耕一
2. 発表標題 薄液膜内温度差マランゴニ対流における非定常速度場の三次元計測
3. 学会等名 日本機械学会関東支部 第28期総会・講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 工藤 正樹
2. 発表標題 非定常薄液内温度差マランゴニ対流の局所加熱に対する応答について
3. 学会等名 第59回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 若山 裕輝, 福永 修一
2. 発表標題 M推定と全最小二乗法を用いたロバスト動的モード分解
3. 学会等名 電子情報通信学会総合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Kudo, K. Tanaka, K. Aoki and S. Obayashi
2. 発表標題 Improved reduced order model for controlling 3-D unsteady thermocapillary convection
3. 学会等名 Proceedings of the 23rd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2023) IFS Collaborative Research Forum in the 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 工藤 正樹, 金井 拓真, 国井 一真, 上野 一郎
2. 発表標題 FZ液柱内温度差マランゴニ対流の振動流に対する能動的制御
3. 学会等名 日本流体力学会年会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 福永 修一, 久下 京一郎
2. 発表標題 物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた拡張カルマンフィルタ
3. 学会等名 第68回 システム制御情報学会 研究発表講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤 興希, 工藤 正樹, 西野 耕一
2. 発表標題 薄液膜内温度差マランゴニ対流における非定常速度場の3次元計測
3. 学会等名 第61回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

M. Kudo, K. IGARASHI, "Response of Unsteady Thermocapillary Convection to Local Heating at Specific Depths in a Thin Liquid Film," SSRN preprint services, 2024
DOI:https://doi.org/10.2139/ssrn.4713342

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	福永 修一 (Fukunaga Shuichi) (70402518)	東京都立産業技術高等専門学校・ものづくり工学科・准教授 (52605)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	西野 耕一 (Nishino Koichi)		
研究協力者	大林 茂 (Obayashi Shigeru)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------