

格子ボルツマン法に適用できる境界面再構築法の改良

Improvement of boundary surface reconstruction scheme for LBM

- 大堀 茜, 大阪府立大学, 大阪府堺市北区学園町 1-1, E-mail: ohori@htlab.me.osakafu-u.ac.jp
 金田 昌之, 大阪府立大学, 大阪府堺市北区学園町 1-1, E-mail: mkaneda@me.osakafu-u.ac.jp
 須賀 一彦, 大阪府立大学, 大阪府堺市北区学園町 1-1, E-mail: suga@me.osakafu-u.ac.jp
 Akane Ohori, Osaka Prefecture University, Sakai, Osaka 599-8531
 Masayuki Kaneda, Osaka Prefecture University, Sakai, Osaka 599-8531
 Kazuhiko Suga, Osaka Prefecture University, Sakai, Osaka 599-8531

The boundary reconstruction scheme is improved by applying an algorithm of reconstruction and reinitialization processes of the coupled level-set volume-of-fluid method. The reconstruction process ensures a possible profile of the physical boundary and the reinitialization process makes the boundary smooth. By combining with the coarse graining of the binary VOF function, this improved scheme contributes to represent the geometry with less grid numbers and keeping the initial volume and smooth surface. Thus, this scheme is preferable for the fluid flow simulation inside complex geometry by the lattice Boltzmann method. In this manuscript, to discuss the representation of the porous media, the porosity is investigated under the effect of coarse graining. It is found that the porosity is kept constant even at high graining level.

1. 緒論

近年の X 線 CT 技術等の進歩により, 生体内部だけでなく二酸化炭素地下貯留 (Carbon Capture and Storage: CCS) や燃料電池拡散層内部などの複雑な構造の把握が可能となってきており, このような構造内部の流動現象の把握に関する研究も進んでいる⁽¹⁾. その際, 複雑かつ大規模な流れ場の数値解析となることから, 並列化の容易な格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method : LBM) を用いた研究が報告されている. 一般的に, 格子ボルツマン法は空間を一様に分割して計算を行うため, 格子に沿った階段状に物理境界が近似される. しかしながら滑らかな曲面形状も階段状に近似されてしまうため, 実際の構造と異なったものとして認識される恐れがある. この解決策として LBM では, 物理境界を滑らかに捉えることのできる Interpolated Bounce-Back (IPBB) が考案されている. これは, 界面までの距離情報を用いて Bounce-Back の値を補間するものであり, 複雑界面の解析に適している. したがって, 実際の二値化の画像データから IPBB に用いることのできる距離情報を獲得できれば, 界面形状を正確に表現することが可能となる. 一方で, 現在の X 線 CT 技術では一断面につき数万~数千万画素の画像を得ることができる. データは二値化されたものであり, これをそのまま階段状格子もしくは上述の再構築に用いると, 膨大な格子数を必要とすることから, 結果として計算コストの増大を招く. そこで, 得られた構造データをなるべく少ない格子数で正確かつ滑らかに表現することができれば, 計算コストの削減や高速化につながると考えられる.

以上の背景より, VOF 関数とレベルセット関数を組み合わせた手法を考案した. 混相流解析に用いられる CLSVOF 法の境界面再構築法を物理境界に応用したものである. ここでは実際に作成した多孔体の二値化データを任意の格子数に粗視化した際の空隙率を比較することで, 手法の妥当性を評価した.

2. 境界面再構築法 (Boundary Surface Reconstruction : BSR)

レベルセット関数 ϕ は界面からの距離を表す関数であり, 二相間のそれぞれの相では正と負の値を持つ. 本研究では境界面再構築に用いるので, 固液相を識別する. 同様に VOF 関数 F は格子内に含まれる固体の体積率 (充填率) を示し, 空隙部 (液相) で 0,

障害物 (固相) で充填されている場合は 1, 界面を含む格子においては $0 < F < 1$ であり, 界面は $F = 0.5$ である. VOF 関数は界面までの正確な距離情報を持たないため, 式 (1) を用いてレベルセット関数の界面を VOF 関数の界面に一致させる.

$$\phi = (F - 0.5) \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (\text{if } |F - 0.5| \leq 0.1). \quad (1)$$

このプロセスを行うことで, 界面近傍ではレベルセット関数の本来の性質である $|\nabla\phi| = 1.0$ が失われる. そこで再初期化プロセスをレベルセット関数に適用する. 再初期化には以下の式を用いる.

$$\phi^t = \text{sgn}(\phi_0)(1.0 - |\nabla\phi|) \quad (2)$$

$$\text{sgn}(\phi_0) = \phi_0 / \sqrt{\phi^2 + \varepsilon^2}. \quad (3)$$

このとき, 内部イタレーションは Sussman et al.⁽²⁾ と同様の判別条件を用いて終了する. 本プロセスにより, 滑らかな界面を再現できる.

本手法の計算手順を以下にまとめる. 簡単のため, 二次元系を例として用いる.

Step 1: 二値化された高解像度データから固体内部を 1, 外部を 0 とする. 次に粗視化を行う. 粗視化度を示す任意の変数 D を $D = (\text{元の画像データの解像度}) / (\text{粗視化された解像度})$ と定義する. 解像度は $1\text{pixel} = 1 \times 1$ 格子とする. Fig.1 に示す $D \times D$ の領域内部の総和をとり, VOF 関数 F の初期値 F_0 を $F_0 = (D \times D \text{ 領域内部の二値化データの総和}) / D^2$ と設定する. これにより, 実際の計算格子での固相の充填率を元画像から反映させることができる.

Step 2: レベルセット関数 ϕ の初期値を設定する. $F \geq 0.5$ の場合 $\phi_0 = 1.0$, $F < 0.5$ の場合 $\phi_0 = -1.0$ と設定する. ここでは階段状の分布を与える.

Step 3: 式(1)を用いて VOF 関数 $F = 0.5$ の界面とレベルセット関数 $\phi = 0.0$ の界面を一致させる.

Step 4: 式(2), (3)を用いてレベルセット関数の再初期化を行う. これにより, 界面をより滑らかに表現することができる. 得られた ϕ が IPBB に必要な距離情報となるため, これを LBM に用いることで構造体内の流れ場を計算できる.

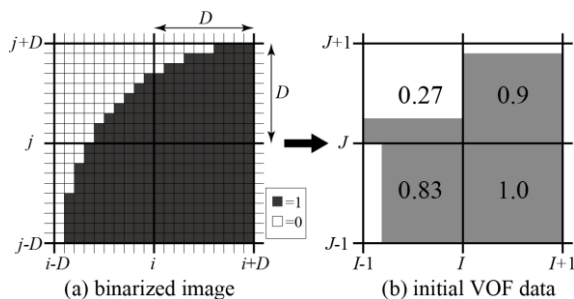


Fig. 1 Coarse graining from high resolution binary graphic data.

3. 結果と考察

円を初期形状とした場合の Step 2-4 における界面の構築の例を Fig. 2 に示す。ここでは円の初期半径が 755.5 pixels であり、粗視化度 $D = 100$ とした。したがって、図中の形状は初期格子数の $1/100^2$ で解像されている。粗視化された画像からの再構築法において、再初期化プロセスにより円の曲面を良好に表現できていることがわかる。一方で、粗視化の結果平坦部となった所での再現性が若干落ちていることがわかる。これは物理境界と格子の位置および粗視化の度合いに依存するものであるため、粗視化のレベルが曲面の表現にどの程度影響するのかを精査する必要がある。実際の多孔体においては均一な円形状の他に曲率半径の一定でない複雑な形状も多く存在することから、試作した多孔体を対象に考察した。

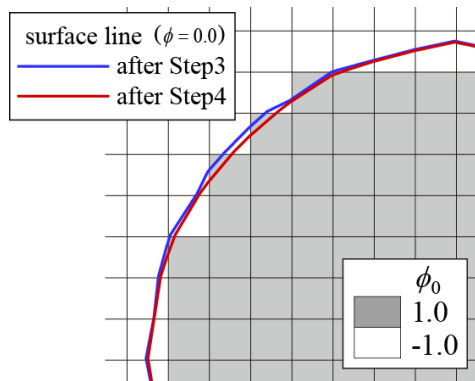


Fig. 2 Reconstructed and reinitialized curved boundaries. The initial radius resolution is 755.5, and the coarse grained level D is 100.

試作した多孔体を Fig. 3 に示す。構造体は、樹脂製のメッシュシート (Fig. 3(a))⁹⁾ を表裏に貼り合わせ、それを積層したもの (Fig. 3(b)) である。ここでは、 2×2 穴のメッシュシートを 1 ユニットとし、界面再構築を施した画像データを Fig. 3(c)(d) に示す。ここでの初期解像度は 1 ユニット $2010 \times 410 \times 2010$ pixels とし、粗視化度 D は 5, 10, 20, 40 とした。例として $D = 20$ を Fig. 3(c) に示す。元画像と比較して、粗視化度が大きいにもかかわらず形状をよく再現できていることがわかる。

次に粗視化度に応じた空隙率について算出した。結果を Fig. 4 に示す。横軸は粗視化度を表す。横軸が大きくなるほど、元画像の解像度に対し粗くなることを示す。縦軸は元画像と同じ解像度でモデル化した HWBB の空隙率からのずれを示す。いずれの場合も、粗視化度が大きくなるほど解像度が悪くなるため、ずれが大きくなるものの、 $D = 20$ の粗視化度においても 1% 程度しか空隙率が変化しないことがわかる。したがって少ない格子数でも多孔体性状を比較的良好に再現できると考えられる。参考までに、この多孔質体の空隙率の実測値は 0.699 である。 $D = 20$ の粗視化で空隙率 = 0.732 となり 5% 以内の差であることから実物の多孔体を良好に再現できたといえる。

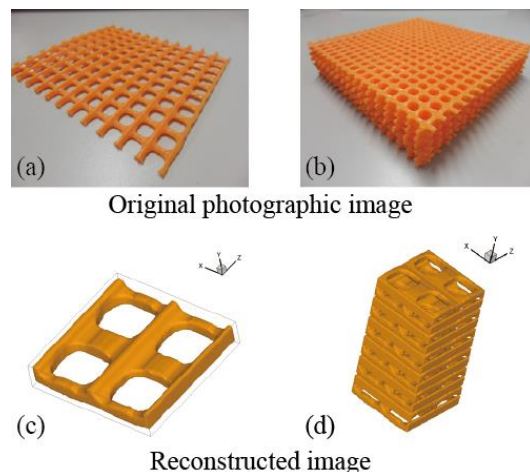


Fig. 3 3D porous media employed in this study.

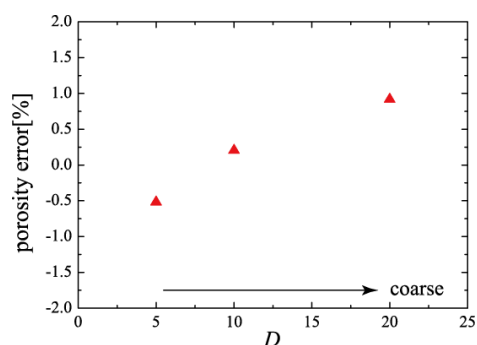


Fig. 4 Graining level dependency for the porosity of the porous medium. Initial resolution of the mesh sheet is $2010 \times 410 \times 2010$.

今後は IPBB-LBM により流動解析を行い、透過率などの他の性状パラメータを検討することで、本再構築手法の適用性を検討する。

4. 結言

CLSVOF 法における界面再構築アルゴリズムを、二値化された物理データに適用することで、初期形状を維持しながら滑らかな物理界面を再現する手法を開発した。これは二値化データが VOF 関数に関連付けられているためであり、再初期化プロセスにより界面が滑らかになる。その際、VOF 関数をあらかじめ粗視化することで、最終形状を少ない格子数でも滑らかに再現することができた。形状再現性は粗視化度に依存するため三次元多孔体の空隙率と比較したところ、 $1/20^3$ 格子を粗視化しても空隙率への影響は小さいものであることが分かった。本手法により IPBB-LBM に利用可能な距離情報を得ることができるため、正確に再現された複雑流路内の流動現象を比較的高速に解析することが可能となる。

参考文献

- (1) Uemura, S., Kataoka, R., Fukadori, D., Tsushima, S. and Hirai, S., 'Experiment on liquid and supercritical CO₂ distribution using micro-focus X-ray CT for estimation of geological storage', *Energy Procedia*, 4, (2011), pp.5102-5107.
- (2) Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., "A level set approach for computing solution to incompressible two-phase flow", *J. Comput. Phys.*, 114, (1994), pp. 146-159.
- (3) 中村, 許, 金田, 須賀, 'ヘテロ特性を持つ多孔体界面乱流の PIV 計測による乱流統計量の議論', 第 52 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (2015).