

Numeerista virtauslaskentaa hila-Boltzmann-simulointimenetelmällä

Pro gradu -tutkielma

Tuomas Airaksinen



Jyväskylän yliopisto

Fysiikan laitos

2006

*Älköön viisas kerskuko viisaudellaan, älköön väkevä voimillaan, älköön rikas rikkaudellaan.
Joka haluaa kerskua, kerskukoon sillä, että tuntee minut ja tietää, mitä minä tahdon. (Jer. 9:22)*

Alkusanat

Kulunut vuosi tutkimusavustajana professori Jussi Timosen tutkimusryhmässä on ollut minulle monella tapaa erityisen tehokasta oppimisen aikaa. Työ on ollut mielekästä ja olen kokenut, että osaamiseni on päässyt ensimmäistä kertaa oikeuksiinsa. Suuret kiitokset Jussille erinomaisen työympäristön sekä parhaan mahdollisen ohjauksen tarjoamisesta pro gradu -tutkielmalleni.

Kiitokset monenlaisesta ystävällisestä opastuksesta ja neuvomisesta *hila-Boltzmann-laboratorion* (FL125) sekä nykyiselle että jo väistyneelle miehistölle: Jari Hyväluomalle ja Keijo Mattilalle, dosentti Antti Kuposelle sekä tohtori Pasi Raiskinmäelle. Kiitokset FL348:n väelle useista maukkaista leivonnaistarjoiluista. Erityiskiitokset Ari Jäsbergille avusta luvun 3 paikallisen permeabiliteetin lausekkeen johtamisessa. Kiitokset myös ystäville, opiskelukavereille, perheelle ja muille elämäni vaikuttaneille henkilöille!

Suurimman kiitoksen ja ylistyksen tahdon antaa HERRALLENI, minun Jumalalleni. Hän on rakastanut minua antamalla itsensä Jeesuksessa Kristuksessa täydelliseksi uhriksi sovittaakseen minun syntini. Hän on lisäksi antanut minulle kaikkea hyvää paljon enemmän kuin olisin tarvinnut. Olen saanut häneltä pitkäjänteisyyttä ja viisautta, jonka takia olen saanut tutkintoni suoritettua huomattavasti suunniteltua nopeammalla aikataululla. Olkoon kaikkivaltias Jumala kiitetty ja ylistetty ikuisesti! Hän on minulle ainoa todellinen ylpeyden aihe - hänessä minä omistan enemmän kuin kukaan tässä maailmassa voi koskaan omistaa.

Jyväskylässä huhtikuussa 2006

Tuomas Airaksinen

Tiivistelmä

Tutkielmassa tarkastellaan virtausominaisuuksien numeerista ratkaisua ja esitellään hila-Boltzmann-virtaussimulointimenetelmä. Sille esitetään parannettu reunaehto neste-kiintoaine-rajapinnalle. Monen relaxointiajan menetelmän (MRT) ominaisuuksia tarkastellaan, erityisesti permeabiliteetin viskositeetti-riippuvuutta. Hila-Boltzmann-simulaattorin avulla tutkitaan paperin pinnoitemateriaalille kehitetyn matemaattisen mallin sekä pinnoitemateriaalien röntgenmikrotomografiakuvien virtausominaisuuksia, erityisesti paikallista permeabiliteettia. Paperinäytteistä tehtyjen tomografiakuvien avulla määrätään numeerisesti niiden permeabiliteetit ja verrataan tuloksia kokeellisesti määritettyihin arvoihin.

Sisältö

1 Johdanto numeeriseen virtausmekaniikkaan	5
2 Virtausdynamiikkaa: permeabiliteetti ja muut fysikaaliset suureet	6
2.1 Darcyn laki ja permeabiliteetti	6
2.2 Permeabiliteettiin vaikuttavia suureita	7
2.3 Permeabiliteettimallit	8
3 Permeabiliteetti paikallisena suureena	10
3.1 Nesteen paikallinen liikeyhtälö eli Navier-Stokes-yhtälö	10
3.2 Paikallinen permeabiliteetti	12
3.3 Paikallisen permeabiliteetin yhteys koko näytteen permeabiliteettiin	16
4 Virtausmekaniikan numeerinen mallinnus hila-Boltzmann-menetelmällä	18
4.1 Relaksointimallit	19
4.1.1 Yhden relaksointiajan malli (hila-BGK)	20
4.1.2 Monen relaksointiajan malli (MRT)	20
4.2 Tasapainojakauma	21
4.3 Faasirajapinnat ja niiden reunaehdot	22
4.3.1 Tomografiakuvan käsittely	23
4.3.2 Reunaehdot	24
4.4 Painegradientti ja tilavuusvoima	24
5 Tarkan faasirajapinnan reunaehto	26
5.1 Pintojen muodostaminen Marching Cubes -algoritmilla	27
5.2 Mielivaltaisen muotoisen seinän bounce-back-reunaehto	29
5.3 Nestefaasipisteiden määrittäminen tunnettujen pintojen perusteella ja q-arvojen laskeminen	31
6 Tuloksia monen relaksointiajan menetelmällä	34
6.1 Leikkaus- ja tilavuusviskositeetti MRT-mallissa	34
6.2 Viskositeetin vaikutus simuloituun permeabiliteettiin	35
6.3 Leikkaus- ja tilavuusviskositeetin vaikutus suoritus aikaan	40
7 Permeabiliteettisimuloinnit	43
7.1 Tutkittavat näytteet	43
7.2 Huokoisen materiaalin permeabiliteettisimulaatioon liittyvät parametrit	44
7.2.1 Relaksaatioparametrit	46
7.3 Paperin pinnoitemateriaalia mallintavan näytteen permeabiliteetti	47
7.4 Virtaussimuloinnit pigmenttinäytteiden röntgenmikrotomografiakuville	52
7.5 Paperinäytteen permeabiliteettisimuloinnit	58
7.5.1 Kynnystämisen vaikutus paperinäytteen permeabiliteettiin	58

7.5.2	Kesän 2005 näytesarja	60
7.5.3	Kevään 2006 näytesarja	62
8	Johtopäätökset	67
8.1	Virheen arviointi	67
8.2	Kolmiointimenetelmä faasirajapinnalle	68
8.3	Monen relaksointiajan menetelmä	68
8.4	Simuloinnit	68
8.5	Paperinäytteet	69

1 Johdanto numeeriseen virtausmekaniikkaan

Nesteenvirtaukseen liittyvät ilmiöt ovat osa jokapäiväistä elämää kaikkialla ympäristössämme. Virtaukset ovat mukana luonnonilmiöissä, erilaisia nesteitä virtaa mm. vesistöissä ja maaperässä. Teollisissa prosesseissa, kuten esimerkiksi paperinvalmistuksessa, nesteiden virtaukset ovat usein keskeisessä asemassa. Paperiteollisuudessa ollaan kiinnostuneita tuntemaan mm. paperin nesteenläpäisevyyteen ja painomusteen imeytymiseen vaikuttavia tekijöitä.

Virtausdynamiikan tutkimuksen kautta syntyy myös uusia menetelmiä erilaisissa käytännön sovelluksissa. Esimerkiksi öljyteollisuudelle virtausdynamiikan alalla tapahtuva kehitys on hyvin tervetullutta, sillä perinteisillä menetelmillä vain noin puolet maaperän öljyvaroista voidaan kerätä taloudellisesti kannattavasti. Ydinvoimaloiden jätteen ja muiden haitallisten aineiden loppusijoitukseen vaikuttaa niiden kulkeutumisominaisuudet sijoituskohteen ympäristössä olevassa maa- tai kallioperässä.

Virtausmekaniikka on perinteisesti ollut vahvasti kokeellinen tiede. Virtausmekaniikan teoria tunnetaan nykyään varsin hyvin, mutta sen soveltaminen analyttisesti on mahdollista vain yksinkertaisissa tilanteissa. Virtausmekaniikan yhtälöiden epälineaarisuuden vuoksi ovat kokeet olleet pitkään lähes ainoa toimiva keino monimutkaisempien virtauskenttien virtaussuureiden määrittämiseen. Vasta nykyaikainen tehokas tietotekniikka tekee mahdolliseksi virtausmekaniikan yhtälöiden kattavan numeerisen ratkaisemisen monimutkaisemmissa virtaustilanteissa.

Virtausyhtälöiden ratkaisemiseen tunnetaan useita erilaisia menetelmiä. Suoraviivainen, paljon käytetty lähestymistapa virtausongelmien numeeriseen ratkaisemiseen on ratkaista diskretoituja virtausyhtälöitä suoraan. Tällainen menetelmä on esimerkiksi äärellisten elementtien menetelmä, jossa järjestelmä jaetaan osiin, määritetään järjestelmän reunaehdot ja ratkaistaan elementtittäisten virtausyhtälöiden muodostamaa yhtälöryhmää.

Tässä tutkielmassa esitellään hila-Boltzmann-menetelmä virtausongelmien ratkaisemiseksi. Hila-Boltzmann-menetelmä poikkeaa lähtökohdiltaan huomattavasti tavanomaisista virtausyhtälöiden ratkaisumenetelmistä - siinä ei varsinaisesti edes ratkaista virtausyhtälöitä, vaikka tuloksena saatava virtauskenttä onkin ratkaisu virtausyhtälöille. Hila-Boltzmann-menetelmä on kehitetty alunperin soluautomaatista, jossa neste koostuu hilakopista toiseen siirtyvistä ja törmäilevistä hiukkasista. Hila-Boltzmann-menetelmän idea esitellään yksityiskohtaisemmin seuraavissa luvuissa. On osoitettu, että tällainen, hyvin paljon nestehiukkasten dynamiikkaa yksinkertaistava malli antaa lopulta saman lopputuloksen kuin virtausyhtälötkin: hila-Boltzmann-yhtälön ratkaisu on samalla ratkaisu Navierin-Stokesin yhtälölle. [18]

2 Virtausdynamiikkaa: permeabiliteetti ja muut fyysikaaliset suureet

2.1 Darcyn laki ja permeabiliteetti

Permeabiliteetti on materiaalille tyypillinen suure, jonka määrittelee *Darcyn laki*

$$q_z = -\frac{k}{\mu} \frac{\Delta p}{\Delta z}, \quad (1)$$

missä q_z on nesteen tilavuusvirtatiheys materiaalin läpi z -suunnassa, k materiaalin permeabiliteetti, μ nesteen dynaaminen viskositeetti ja Δp on paineen muutos välillä Δz . Darcyn laki on kokeellinen tulos, joka pätee hyvin kokoonpuristumattomalle nesteelle makroskooppisissa järjestelmissä, ts. kun Δz on suuri. Sitä voidaan soveltaa myös paikallisesti ($\Delta z \rightarrow 0$), jolloin kaava (1) saa muodon

$$\mathbf{q} = -\frac{k}{\mu} \nabla p. \quad (2)$$

Darcyn laki on tärkein huokoisissa materiaaleissa esiintyviä virtauksia käsittelevä laki, koska se määrittelee *permeabiliteetin* käsitteen mitattavien suureiden avulla. Darcyn laki pätee hyvin erityisesti pienillä virtausnopeuksilla. [3, 4]

Yleensä käytännön sovelluksissa ollaan kiinnostuneita siitä, kuinka helposti neste tunkeutuu tutkittavan materiaalin läpi. Tällaista nesteenläpäisykykyä kuvaa materiaalin permeabiliteetti. Se on kullekin materiaalille tyypillinen suure, joka on vakio, mikäli materiaali on geometrisilta ominaisuuksiltaan homogeenista. Tutkimuksen yhtenä suurena tavoitteena on ollut kehittää permeabiliteetille yleispätevä lauseke materiaalin makroskooppisten ominaisuuksien funktiona, jolloin permeabiliteetin määrittäminen kullekin materiaalille olisi suoraviivaista. Tällaisia makroskooppisia ominaisuuksia ovat mm. huokoisuus ϕ , ominaispinta-ala S ja tortuositeetti τ , jotka määritellään myöhemmin. Kappaleessa 2.3 esitellään malleja, jotka pyrkivät antamaan arvion permeabiliteetista, kun edellä mainitut ominaisuudet tunnetaan.

Permeabiliteetin määrittämiseen on kehitetty useita erityyppisiä menetelmiä. *Analyttisissä* menetelmissä pyritään selvittämään permeabiliteetin riippuvuudet teoreettisesti. Kehitetyissä analyttisissä malleissa joudutaan tekemään yleensä huomattavia yksinkertaistuksia, jolloin ne eivät välttämättä enää kuvaa hyvin todellisuutta. Permeabiliteettia on myös määritetty kokeellisesti. *Kokeellisista* mittausjärjestelyistä on pyritty kehittämään mahdollisimman yksinkertaisia. Tällaisia tekniikoita ovat paineenmittaukseen perustuva nesteen

tai kaasun kontrolloitu läpivirtaus mitattavan materiaalin läpi, sähkönjohtavuus ja ydinmagneettinen resonanssi. [2]

Numeeriset menetelmät ovat suhteellisen uusi lähestymistapa permeabiliteetiongelman ratkaisemiseen. Huokoisessa materiaalissa tapahtuvan virtauksen tutkimiseen luvussa 4 esiteltävä hila-Boltzmann-menetelmä on erityisen käytökelpoinen. Menetelmä on vasta nykyaikaisen tehokkaan rinnakkaislaskennan myötä tullut käyttökelpoiseksi, koska riittävän hyvän tarkkuuden saavuttamiseksi se edellyttää huomattavan suurta muisti- ja laskentakapasiteettia.

2.2 Permeabiliteettiin vaikuttavia suureita

Permeabiliteetin määrittäminen Darcyn lain (kaava (1)) avulla on mahdollista vain siinä tapauksessa, että käsiteltävä virtauskenttä tunnetaan. Tämä käytännössä tarkoittaa joko virtauskokeiden tai -simulointien toteuttamista. Permeabiliteetti on kuitenkin yksinomaan materiaalille tyypillinen suure, joten materiaalin ominaisuuksien tunteminen pitäisi riittää permeabiliteetin määrittämiseksi. Sen vuoksi on kehitetty erilaisia malleja, jotka pyrkivät kuvaamaan permeabiliteettia erilaisten materiaalisuureiden funktiona.

Virtauksesta riippumattoman lausekkeen määrittäminen permeabiliteetille on pitkälle semi-empiristä tutkimusta. Teoreettisia analyttisiä lausekkeitä on kehitetty yksinkertaisille rakenteille ja niitä on pyritty yleistämään monimutkaisempiinkin tapauksiin. Lopulta tulokset perustuvat edelleen kuitenkin kokeisiin ja simulointeihin.

Esitellään nyt joukko suureita, joista permeabiliteetin on havaittu riippuvan. Permeabiliteetti riippuu materiaalin huokoisuudesta - siitä, kuinka suuressa osaa materiaalia neste pääsee liikkumaan. Huokoisuus ϕ määritellään huokosten tilavuutena (V_p) suhteessa koko näytteen tilavuuteen (V),

$$\phi = \frac{V_p}{V}. \quad (3)$$

Virtauksen vastus koostuu pääasiassa seinämien aiheuttamasta kitkasta. Jos materiaalilla on paljon seinäpinta-alaa, voidaan päätellä, että muodostuneen virtausvastuksen vuoksi se vaikuttaa permeabiliteettiin. Ominaispinta-ala S määritellään kiintoainefaasin rajapinnan pinta-alana suhteessa koko tilavuuteen,

$$S = \frac{\partial V_s}{V} = \frac{A_s}{V}. \quad (4)$$

Huokoisessa materiaalissa virtaavan nesteen virtaviivat voivat olla hyvin monimutkaisia. Materiaalin tortuositeetti τ on suure, jolla pyritään kuvaamaan tällaista nestehiukkasten kulkemien reittien monimutkaisuutta. Tortuositeetti

voidaan määritellä usealla eri tavalla. Usein tortuositeetti määritellään kullekin virtaviivalle virtaviivan pituuden (L_e) ja virtauksen suuntaisen etenemän (L) osamääränä,

$$\tau = \frac{L_e}{L}. \quad (5)$$

Näytteen tortuositeetti saadaan laskemalla siinä kulkevien virtaviivojen keskimääräinen tortuositeetti. Lähes sama arvo tortuositeetille saadaan myös laskennallisesti paljon suoraviivaisemmalla tavalla keskimääräisen nopeuden normin sekä ja keskimääräisen virtauksen suuntaisen komponentin osamääränä,

$$\tau = \frac{\langle |\mathbf{v}| \rangle}{\langle v_x \rangle}. \quad (6)$$

[10] On myös muita tapoja määritellä tortuositeetti, jopa ilman varsinaista tietoa virtauskentästä. Yksi tällainen tapa on etsiä lyhin reitti huokosia pitkin ja korvata kaavan (5) L_e kyseisen reitin pituudella. [8] Tällaiseen tortuositeetin määrittämiseen voidaan käyttää tietokonealgoritmia, joka ilman varsinaista virtaussimulointia ratkaisee tortuositeetin materiaalin rakenteen perusteella.

2.3 Permeabiliteettimallit

Permeabiliteetin materiaaliriippuvuuksien selvittämiseksi on kehitetty erilaisia semiempiirisiä malleja. Varsin hyväksi havaittu malli on Kozenyn laki

$$k = \frac{\phi^3}{c\tau^2 S^2}, \quad (7)$$

missä ϕ on näytteen huokoisuus, τ tortuositeetti, S ominaispinta-ala ja c määrittämätön muuttuja, joka on yleensä vakio kullekin näytteelle. [11] Laki pätee varsin hyvin useille huokoisille materiaaleille. Muuttuja c on lain heikkous. Vaikka kokeellisesti on havaittu, että se on lähestulkoon materiaalikohtainen vakioluku, niin silti se riippuu jonkin verran valitusta näytteestä. Jos näytteet ovat keskenään samankaltaiset (esimerkiksi eri osia samasta materiaalista), on c likimain vakio. Koska permeabiliteetti on materiaalikohtainen parametri, on ilmeistä, että myös c riippuu erilaisista materiaalin geometrisista ominaisuuksista. Tällaista geometrista luonnetta muuttujalle c ei kuitenkaan tiedetä, joten c :n arvo on määritettävä erikseen kullekin materiaalille sovituspäarametrina.

Joskus myös tortuositeetti τ sisällytetään vakioon c , jolloin Kozenyn laki saa muodon

$$k = \frac{\phi^3}{cS^2}. \quad (8)$$

Kaavassa (7) esiintyvä tortuositeettiriippuvuus on osoitautunut hyväksi, joten tässä tutkielmassa tortuositeetti määritetään aina erikseen kaavalla (6).

Ominaispinta-ala voidaan määrittellä myös huokosten pinta-alan suhteena kiintoainetilavuuteen, $S_0 = S / (1 - \phi)$, jolloin saadaan Kozenyn-Carmanin laki

$$k = \frac{1}{cS_0^2} \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2}. \quad (9)$$

Tämä on siis ekvivalentti kaavalle (8). Tässä tutkielmassa käytetään ominaispinta-alalle aiemmin esitettyä määritelmää.

Vaikka Kozenyn laki on selkeästi tärkein tähänastisista malleista, mainitaan seuraavaksi kaksi vaihtoehtoista mallia, jotka on kehitetty tietynlaisille materiaaleille. Happelin malli pätee erityisesti kuitumaisille materiaaleille. Jos virtaus voidaan ajatella tapahtuvan kuitujen muodostaman säännöllisen lankaverkon läpi, voidaan permeabiliteetille käyttää Happelin mallia,

$$k = \frac{a^2}{4\varphi} \left(-\ln \varphi + \frac{\varphi^2 - 1}{\varphi^2 + 1} \right), \quad (10)$$

missä $\varphi = 1 - \phi$ on kiintoainepitoisuus ja a keskimääräinen kuidun säde. [12] Toinen, kuituverkon permeabiliteetin simulointituloksiin perustuva muoto on viitteessä [13] esitelty Kopsen funktio

$$k = \frac{5.55a^2}{e^{10.1(1-\phi)} - 1}. \quad (11)$$

Kozenyn laki (kaava (7)) on tähänastisista permeabiliteetin semiempiiristä malleista selkeästi vartenotettavin. Siinä esiintyvälle vakioparametrille c pitäisi kuitenkin keksiä fysikaalista merkitystä, koska sovittamista varten tarvitaan kuitenkin mittaus- tai simulointiaineistoa. Tarvittavaa aineistoa ei ole välttämättä saatavilla, jos tutkimuksen tuloksia halutaan hyödyntää erilaisissa ulkopuolisissa tutkimusalueissa.

3 Permeabiliteetti paikallisena suureena

Permeabiliteetti materiaalia kuvaavana suureena on hyödyllinen virtaukseen liittyvä tunnusluku. Permeabiliteetti ei kuitenkaan suinkaan ole yksikäsitteinen vakiosuure materiaalille, vaan voi vaihdella paljon materiaalin sisällä. Matemaattisesti permeabiliteetti on toisen kertaluvun tensori, joten läpäisevyysominaisuuksien täydelliseen kuvaamiseen pitäisi yhden luvun sijaan oikeastaan määrittää permeabiliteettitensorikenttä koko materiaalin läpi. Permeabiliteettitensorin määrittämistä varten tarvittaisiin virtauskenttä kunkin pääakselin suuntaisille virtauksille.

Permeabiliteetista ollaan kuitenkin yleensä kiinnostuneita vain siinä suunnassa, missä virtaus kulkee materiaalin läpi. Esimerkiksi paperinäytteessä voidaan olla kiinnostuneita joko paperin tason suuntaisesta permeabiliteetista tai permeabiliteetista kohtisuoraan paperin läpi. Tällöin riittää, kun tarkastellaan kulloinkin permeabiliteettitensorin yhtä diagonaalilla olevaa komponenttia k_{ii} , missä $i \in \{x, y, z\}$.

Tässä luvussa johdetaan Navierin-Stokesin yhtälö lähtien liikkeelle Reynoldsin kuljetusteoreemasta, josta puolestaan johdetaan lauseke permeabiliteetin virtauksen suuntaisen komponentin paikallista määrittämistä varten. Kun permeabiliteetti tunnetaan paikallisesti virtauksen suunnassa, saadaan sen perusteella hyödyllistä lisätietoa materiaalin virtausominaisuuksista - esimerkiksi voidaan löytää materiaalista niitä ominaisuuksia, jotka edesauttavat virtauksen imeytymistä ja niitä ominaisuuksia jotka estävät sitä. Paikallisen tarkastelun avulla saadaan myös materiaaliparametri c määritettyä kullekin näytteelle tarkasti ja täsmällisesti sovituspärametrina.

3.1 Nesteiden paikallinen liikeyhtälö eli Navier-Stokes-yhtälö

Johdetaan aluksi paikallinen liikeyhtälö nesteelle lähtien Reynoldsin kuljetusteoreemasta [9] liikemäärälle. Valitaan nestevirtauksesta kiinteä tarkastelutilavuus V , jonka muoto ja koko ovat mielivaltaisia. Valitulla ajanhetkellä tilavuuden V sisältämä nestemäärä muodostaa järjestelmän S , joka virtauksen seurauksena voi virrata ulos tarkastelutilavuudesta V . Reynoldsin kuljetusteoreema liikemäärälle on

$$\frac{d\mathbf{p}_s}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_V}{dt} + \oint_A \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A}, \quad (12)$$

missä \mathbf{p}_s on järjestelmän liikemäärä, \mathbf{p}_V tarkastelutilavuuden sisältämän nesteen liikemäärä ja A on tarkastelutilavuuden V reuna, ts. $A = \partial V$. Yhtälön vasen puoli on Newtonin 2. lain $\frac{d\mathbf{p}}{dt} \equiv m\mathbf{a}$ mukaan järjestelmään kohdistuvien

voimien summa,

$$\frac{d\mathbf{p}_s}{dt} = \sum \mathbf{F}. \quad (13)$$

Muokataan yhtälön (12) oikean puolen termejä. Ensimmäisessä termissä merkitään uudelleen liikemäärä integraalina yli tarkastelutilavuuden V :

$$\frac{\partial \mathbf{p}_V}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{u} dV, \quad (14)$$

ja sovelletaan toiseen termiin Gaussin divergenssilauseetta:

$$\oint_A \rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dV. \quad (15)$$

Yhdistämällä tulokset (12)-(15) saadaan nyt

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{u} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dV = \Sigma \mathbf{F}. \quad (16)$$

Nopeus- ja tiheyskenttien tasaisuuden sekä ajallisesti muuttumattoman tarkastelutilavuuden vuoksi aikaderivointi voidaan siirtää integraalin sisälle, eli $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV$. Jos käsitellään differentiaalista kontrollitulavuutta, päästään integraaleista eroon ja saadaan

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \Sigma \mathbf{f}, \quad (17)$$

missä $\mathbf{f} = \frac{\mathbf{F}}{V}$ on voimatiheys. Nesteen tilavuusalkioon vaikuttavat voimat johduvat paineesta, leikkausjännitystensorista sekä erilaisista tilavuusvoimista kuten esimerkiksi gravitaatiosta. Näin ollen

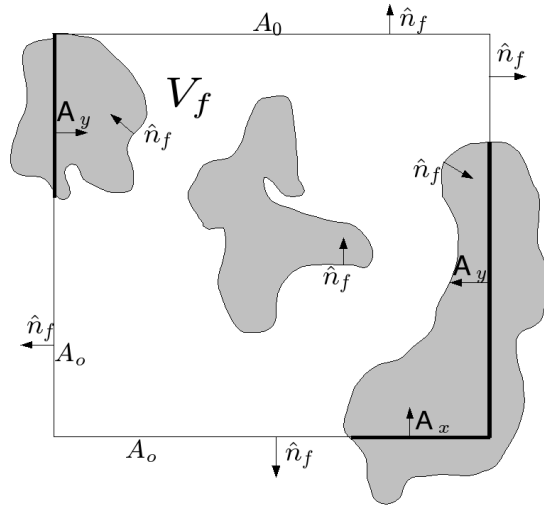
$$\sum \mathbf{f} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}, \quad (18)$$

missä painegradientti ∇p on paineen nesteeseen kohdistama voimatiheys, $\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{1} \right) + \zeta (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{1}$ on Newtonisen nesteen (dynaaminen viskositeetti $\mu = \text{vakio}$) leikkausjännitystensori, missä ζ on tilavuusviskositeetti ja \mathbf{g} on tilavuusvoima. Nesteissä $\nabla \cdot \mathbf{u} \approx 0$, joten

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right).$$

Nesteen paikallinen liikeyhtälö saadaan siis muotoon

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}. \quad (19)$$



Kuva 1: Kaaviossa on kuvattu harmaalla kiintoaine ja valkoisella neste. Kuva on 2-ulotteinen projektio 3-ulotteisesta tilanteesta, joten reunaviivat kuvaavat reunan pinta-aloja.

Tämä on Navierin-Stokesin yhtälö, joka on yksi tärkeimmistä virtausmekaniikan yhtälöistä.

3.2 Paikallinen permeabiliteetti

Tarkastellaan nyt näytteelle ominaista pientä kontrollitilavuutta V , joka sisältää kiintoainetta ja nestettä. Olkoon nesteen osuus tilavuudesta V_f , jolloin tarkasteltavassa tilavuudessa huokoisuus on $\phi = \frac{V_f}{V}$. Nesteen V_f rajapinnan pinta-ala on $\partial V_f = A_f = A_o \cup A_s$, missä A_s on rajapinta kiintoainefaasin kanssa ja A_o on nestealueen kattama osa tilavuuden V reunaa ∂V .

Integroidaan yhtälö (19) nestetilavuuden V_f yli, jolloin saadaan

$$\int_{V_f} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV + \int_{V_f} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) dV = \int_{V_f} (-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}) dV. \quad (20)$$

Huomataan, että $\nabla p = \nabla \cdot (p \mathbf{1})$ ja sovelletaan Gaussin divergenssilauseetta divergenssitermeihin:

$$\int_{V_f} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV + \oint_{A_f} \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = \oint_{A_f} (-p \mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} + \int_{V_f} \mathbf{g} dV. \quad (21)$$

Kun virtaustilanne on stationaarinen, on ensimmäisen termin aikaderivaatta $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) = 0$. Kiintoainepinnalla A_s on virtausnopeus $\mathbf{u} = 0$, joten yhtälö (21)

sievenee muotoon

$$\begin{aligned} \int_{A_o} \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} &= \int_{A_o} (-p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} \\ &+ \int_{A_s} (-p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} + \int_{V_f} \mathbf{g} dV, \end{aligned} \quad (22)$$

joka edelleen voidaan kirjoittaa muodossa

$$\int_{A_o} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p\mathbf{1} - \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} = \int_{A_s} (-p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} + \int_{V_f} \mathbf{g} dV. \quad (23)$$

Kirjoitetaan paine p keskimääräisen paineen $\tilde{p} = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} p dV$ ja poikkeaman $\delta p = p - \tilde{p}$ avulla. Nyt kaavan (23) pinta-alan A_s yli tapahtuva integrointi voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} \int_{A_s} (-p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} &= \int_{A_s} ((-\tilde{p} - \delta p)\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} \\ &= \int_{A_s} (-\tilde{p}\mathbf{1}) \cdot d\mathbf{A} + \int_{A_s} (-\delta p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A}. \end{aligned} \quad (24)$$

Kiintoaineen seinäpinnan nesteeseen kohdistaman voiman sisältämään termiin voidaan soveltaa Darcyn lakia. Määritellään Darcyn termi fluktuoivan painekomponentin δp avulla siten, että

$$\int_{A_s} (-\delta p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} = -V_f \frac{\mu}{k} \mathbf{q}. \quad (25)$$

Keskiarvopaineen \tilde{p} sisältämä termi voidaan kirjoittaa muodossa

$$\int_{A_s} (-\tilde{p}\mathbf{1}) \cdot d\mathbf{A} = -\tilde{p} \int_{A_s} d\mathbf{A}. \quad (26)$$

Olkoon A_x , A_y ja A_z kontrollitilavuuden ja siinä olevan kiintoaineen leikkauspintojen pinta-alat ja $A_{ulko} = A_x \cup A_y \cup A_z$. Jäljelle jäänyt pintaintegraali voidaan nyt laskea:

$$\begin{aligned} \int_{A_s} d\mathbf{A} &= \underbrace{\oint_{A_s \cup A_{ulko}} d\mathbf{A}}_0 - \int_{A_{ulko}} d\mathbf{A} \\ &= - \int_{A_{ulko}} d\mathbf{A} \\ &= A_x \hat{\mathbf{x}} + A_y \hat{\mathbf{y}} + A_z \hat{\mathbf{z}} \\ &= \frac{\partial V_s}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial V_s}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} + \frac{\partial V_s}{\partial z} \hat{\mathbf{z}} \\ &= \boldsymbol{\nabla} V_s. \end{aligned} \quad (27)$$

Kiintoainetilavuusgradientti ∇V_s määrittää kontrollitilavuuden keskipisteesä ja se ilmoittaa kiintoainetilavuuden muutoksen kontrollitilavuuden paikan muuttuessa. Kaava (26) voidaan nyt esittää muodossa

$$\begin{aligned}\int_{A_s} (-\tilde{p}\mathbf{1}) \cdot d\mathbf{A} &= -\tilde{p} \int_{A_s} d\mathbf{A} \\ &= -V\tilde{p} \frac{\nabla V_s}{V} \\ &= V\tilde{p}\nabla\phi.\end{aligned}\quad (28)$$

Sijoitetaan tulokset (25) ja (28) yhtälöön (24) ja merkitään $V_f = \phi V$, jolloin saadaan

$$\int_{A_s} (-p\mathbf{1} + \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{A} = V\tilde{p}\nabla\phi - \phi V \frac{\mu}{k} \mathbf{q}. \quad (29)$$

Merkitään nyt $d\mathbf{A} = \hat{\mathbf{n}}_f dA$, missä $\hat{\mathbf{n}}_f$ on pinnan A sisänormaalivektori, ja sijoitetaan tulos (29) vuorostaan takaisin yhtälöön (23), jolloin

$$\frac{1}{V} \int_{A_o} (\rho \mathbf{u}\mathbf{u} + p\mathbf{1} - \boldsymbol{\tau}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dA = \tilde{p}\nabla\phi - \phi \frac{\mu}{k} \mathbf{q} + \frac{1}{V} \int_{V_f} \mathbf{g} dV. \quad (30)$$

Tarkastellaan nyt ohutta z -suuntaista siivua $z_1 < z < z_2$, joka on jaksollinen x - ja y -suunnassa. Jaksollisuuden vuoksi pintaintegraalit siivun sivupinnoilla kumoavat toisensa ja A_0 :ssa $\hat{\mathbf{n}}_f = \pm \hat{\mathbf{n}}_z$. Sievennetään ensin jännitystensori muotoon

$$\tau_{zz} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right)_{zz} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (31)$$

jolloin sen sisältävän integraalin z -komponentti on

$$\left[\int_{A_o} \boldsymbol{\tau} \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dA \right]_z = - \int_{A_o(z_1)} 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} dA + \int_{A_o(z_2)} 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} dA. \quad (32)$$

Tarkastellaan yhtälön (30) z -komponenttia. Yhtälön vasen puoli on

$$\begin{aligned}\left[\int_{A_o} (\rho \mathbf{u}\mathbf{u} + p\mathbf{1} - \boldsymbol{\tau}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dA \right]_z &= \int_{A_o(z_2)} \left(\rho u_z^2 + p - 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) dA \\ &\quad - \int_{A_o(z_1)} \left(\rho u_z^2 + p - 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) dA.\end{aligned}\quad (33)$$

Kirjoitetaan $V = A(z_2 - z_1)$ ja käydään rajalle $z_2 - z_1 \rightarrow 0$, jolloin edellinen

tulos (33) saa muodon

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \left[\int_{A_o} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{1} - \boldsymbol{\tau}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dA \right]_z \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{A} \int_{A_o(z)} \left(p + \rho u_z^2 - 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) dA \right). \end{aligned} \quad (34)$$

Kun virtausnopeus on pieni, voidaan nopeuden suhteen neliöllinen termi ρu_z^2 jättää huomiotta. Simulaatiotuloksista havaitaan, että myös termi $-2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z}$ on tutkituissa virtaustilanteissa häviävän pieni. Nyt voidaan kirjoittaa edellisen yhtälön pinnan $A_0(z)$ integraali muodossa

$$\frac{1}{A} \int_{A_0(z)} p dA = \frac{A_0}{A} \cdot \frac{1}{A_0} \int p dA = \frac{A_0}{A} \cdot \tilde{p} = \phi \tilde{p}. \quad (35)$$

Nyt edellinen lauseke sievenee muotoon

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \left[\int_{A_o} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{1} - \boldsymbol{\tau}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dA \right]_z &= \frac{\partial}{\partial z} (\phi \tilde{p}) \\ &= \tilde{p} \frac{\partial \phi}{\partial z} + \phi \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z}. \end{aligned} \quad (36)$$

Sijoitetaan nyt edellinen tulos (36) yhtälöön (30). Integroimalla saadaan $\frac{1}{V} \int_{V_f} g_z dV = \frac{V_f}{V} g_z = \phi g_z$, joten yhtälö (30) saa muodon

$$-\frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} = \frac{\mu}{k} q_z - g_z, \quad (37)$$

josta taas saadaan lauseke paikalliselle permeabiliteetille

$$k = \frac{\mu q_z}{-\frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + g_z}. \quad (38)$$

Hila-Boltzmann-menetelmällä määritetyn nesteen nopeus- ja painekentän avulla voidaan tällä lausekkeella laskea permeabiliteetti paikallisesti eri kohdissa tarkasteltavaa näytettä. Erityisesti tuloksena saadaan näytteen z-suuntainen permeabiliteettiprofiili, jota tarkastelemalla voidaan päätellä näytteen neste-läpäisyominaisuuden homogeenisuus. Paikallista permeabiliteettiä voidaan myös helposti verrata Kozenyn lain avulla määritettyyn paikalliseen permeabiliteettiin ja ratkaista muuttujan c arvo sovitusparametrina.

3.3 Paikallisen permeabiliteetin yhteys koko näytteen permeabiliteettiin

Tavallisesti permeabiliteetti lasketaan kokonaiselle näytteelle, jolloin se ilmoittaa materiaalin keskimääräisen nesteenläpäisevyyden. Aiemmin tässä luvussa esitellyllä menetelmällä voidaan laskea permeabiliteetti paikallisesti näytteen sisällä. Koko näytteen permeabiliteetti on eräänlainen keskiarvosuure koko materiaalin permeabiliteetille ja seuraavassa osoitetaan, että se voidaan laskea paikallisista permeabiliteeteistä.

Kirjoitetaan Darcyn laki (kaava 1) erikseen sekä paikalliselle permeabiliteetille k_i , että koko näytteen yli laskettavalle permeabiliteetille k_Σ ,

$$k_\Sigma = \frac{q\mu}{\frac{\Delta p}{\Delta z}} \quad (39)$$

$$k_i = \frac{q\mu}{\frac{(\Delta p)_i}{(\Delta z)_i}}. \quad (40)$$

Kun väli Δz jaetaan tasaisesti N osaan, saadaan

$$\begin{aligned} \Delta z &= N \cdot (\Delta z)_i \\ (\Delta z)_i &= \frac{\Delta z}{N}. \end{aligned} \quad (41)$$

Koko näytteen yli laskettava paine saadaan laskemalla yhteen osavälien paineet,

$$\Delta p = \sum_i (\Delta p)_i. \quad (42)$$

Sijoitetaan (42) nyt koko näytteen permeabiliteetin k_Σ lausekkeeseen (39) ja saadaan

$$k_\Sigma = \frac{\Delta z q \mu}{\sum_i (\Delta p)_i}. \quad (43)$$

Ratkaistaan osavälin paine-ero kaavasta (40)

$$(\Delta p)_i = \frac{\Delta z q \mu}{N k_i} \quad (44)$$

ja sijoitetaan se koko näytteen yli laskettavan permeabiliteetin lausekkeeseen, jolloin saadaan

$$k_\Sigma = \frac{\Delta z q \mu}{\sum_i \frac{\Delta z q \mu}{N k_i}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\Delta z q \mu}{\frac{\Delta z q \mu}{N} \sum_i \frac{1}{k_i}} \\
&= \left(\frac{1}{N} \sum_i k_i^{-1} \right)^{-1} \\
&= \langle k_i^{-1} \rangle^{-1}. \tag{45}
\end{aligned}$$

Tämän tuloksen avulla voidaan siis laskea koko näytteen permeabiliteetti, jos paikallinen permeabiliteetti tunnetaan. Tällä tavoin voitiin tarkistaa, että paikalliset permeabiliteetit antoivat yhtäpitäviä tuloksia koko näytteelle laskettujen permeabiliteettien kanssa.

4 Virtausmekaniikan numeerinen mallinnus hila-Boltzmann-menetelmällä

Hila-Boltzmann-menetelmä poikkeaa lähtökohdiltaan huomattavasti muista yleisesti käytetyistä nestevirtauksen mallinnukseen soveltuvista numeerisista menetelmistä. Yleisesti virtausnumeriikan peruslähtökohtana on Navier-Stokes-yhtälöiden numeerinen ratkaiseminen tietylle järjestelmälle. Hila-Boltzmann-menetelmä perustuu toisenlaiseen lähtökohtaan: nestettä mallinnetaan hiukkasilla, jotka liikkuvat diskreetissä hilassa diskreetillä nopeudella diskreetteihin suuntiin. Hiukkasten törmäyksiä simuloidaan Boltzmannin yhtälöllä. Hila-Boltzmann-menetelmää edeltäneessä hilakaasu-menetelmässä käsiteltiin suoraan hiukkasten lukumääriä kokonaislukuina, hila-Boltzmann-menetelmässä sen sijaan käsitellään hiukkastiheyksiä liukulukujen avulla.

Simulaattoriohjelmiston pääsilmukka toimii yksinkertaistetusti siten, että kullakin aika-askeleella siinä

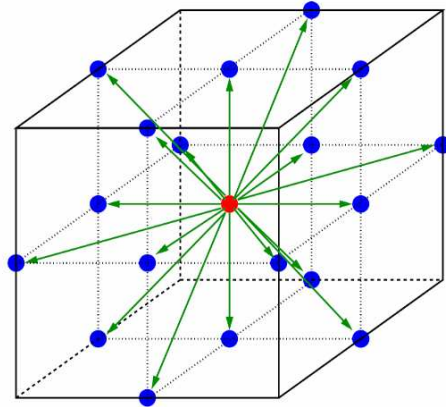
1. siirretään hiukkasia hilapisteiden välillä ja
2. mallinnetaan hiukkasten törmäyksiä törmäysoperaattorilla, jossa nesteen kokonaismassa ja -liikemäärä säilyvät.

Simulaatio alustetaan aluksi tietynlaiseen alkutilaan, jossa nesteellä on tietty alkunopeus, joka yleensä asetetaan nollassa. Simulaatiossa reunalle asetettu paine tai tilavuusvoima saa hiukkaset liikkeelle ja törmäysoperaattorin vaikutuksesta virtaus muuttuu aika-askelien kuluessa kohti todellista fysikaalista virtauskenttää.

Hila-Boltzmann-simulaatio on analoginen koejärjestelyn kanssa, simulaatiossa aika-askelet siis vastaavat fysikaalista aikaa. Kun virtausnopeus on pieni ja simulaatioon käytetään riittävästi aika-askelia, nesteen virtaustilanne saturoituu tietynlaiseen tilaan, josta se ei enää lopulta muutu. Samoin käy myös varsinaisessa kokeessa. Simulaatio keskeytetään, kun Darcyn lailla lasketun permeabiliteetin arvo täyttää konvergenssiehdon, eli sen aikaderivaatta on riittävän pieni.

Hila-Boltzmann-simulaatio voidaan toteuttaa monissa erilaisissa hiloissa. Hiloille käytetään yleisesti seuraavanlaista nimeämiskäytäntöä: kirjainta D seuraava luku merkitsee dimensioiden määrää (2 tai 3) ja kirjainta Q seuraava luku mahdollisten nopeuksien suuntien lukumäärää. Varhaisimmat simulaatiot suoritettiin vuonna 1986 hila-kaasumallilla D2Q6-hilassa, ts. 2-ulotteisessa hilassa, jossa hiukkaset saattoivat kulkea kuuteen eri suuntaan. [21]

Tähän tutkielmaan liittyvissä virtaussimuloinneissa käytetään kolmiulotteista D3Q19-hilaa. Kustakin hilakopista nestehiukkaset voivat liikkua lähim-



Kuva 2: D3Q19-hilan linkit lähimpiin ja toiseksi lähimpiin naapureihin. Hilapiste on merkitty kuvaan punaisella, linkit vektorin \mathbf{c}_i suuntiin vihreällä ja naapurihilapisteet sinisellä.

piin ja toiseksi lähimpiin naapureihin, joita on yhteensä 18 kpl. Jokaista naapurilinkkiä kohti tallennetaan kyseiseen suuntaan liikkuvien hiukkasten hiukkastiheys ja näiden lisäksi lepohiukkastiheys, yhteensä siis 19 tiheyttä. Merkitään linkin i suuntavektoria \mathbf{c}_i :llä ja siihen liittyvää hiukkastiheyttä f_i :llä ja näistä muodostuvaa 19-ulotteista tiheysvektoria \mathbf{f} :llä. Hilakopin hiukkastiheys f_i kulkee yhdessä aikayksikössä vektorin \mathbf{c}_i osoittamaan hilakoppiin.

4.1 Relaksointimallit

Hila-Boltzmann-menetelmässä simuloidaan Boltzmannin yhtälöä hiukkasjakauman aikakehitykselle,

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{\Omega}\mathbf{f}(\mathbf{r}, t), \quad (46)$$

missä $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ on 19-ulotteinen vektori, jonka komponentti f_i on suuntavektorin \mathbf{c}_i suuntaisen linkin hiukkastiheys paikassa \mathbf{r} ajanhetkellä t , ja $\mathbf{\Omega}$ on törmäysoperaattori. Törmäysoperaattoria voidaan mallintaa usealla erilaisella menetelmällä. Yleisimmissä hila-Boltzmann-menetelmissä törmäysoperaattori mallinetaan relaksoimalla tiheysjakaumaa sen tasapainotilaan, joka saadaan esimerkiksi Maxwellin-Boltzmannin tasapainojakaumasta. Törmäysoperaattorin tarkka muoto riippuu käytettävästä relaksointimallista. Seuraavaksi esitellään kaksi tärkeintä hila-Boltzmann-simulaatioissa käytettävää relaksointimallia: yleisesti käytetty ja relaksointimalleista kaikkein yksinkertaisin yhden relaksointiajan hila-BGK-malli sekä uudempi ja monipuolisempi monen relaksointiajan MRT-malli.

4.1.1 Yhden relaksointiajan malli (hila-BGK)

Hila-BGK-menetelmässä törmäysoperaattori Ω korvataan yhden aika-askelen relaksaatiolla tasapainojakaumaan f^{eq} , joten järjestelmän aikakehityksen antaa nyt yhtälö

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\xi} (\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t)), \quad (47)$$

missä ξ on relaksaatioaika. Relaksaatioaika on vapaasti valittava parametri, jolla voidaan vaikuttaa simulointiin. Häiriöteoriaan sekä Taylorin polynomikehitelmään perustuvalla Chapman-Enskog-kehityksellä [6] voidaan todeta, että relaksaatioparametrilla on fysikaalinen yhteys nesteen kinemaattiseen viskositeettiin,

$$\nu = \frac{2\xi - 1}{6}. \quad (48)$$

[1] Tämän fysikaalisen tulkinnan lisäksi relaksaatioparametri vaikuttaa myös muulla tavoin simulaatioon, joka näkyy mm. permeabiliteetin epäfysikaalisena viskositeetti-riippuvuutena. Tämä epäfysikaalinen ominaisuus johtuu siitä, että relaksaatioparametri vaikuttaa myös menetelmässä käytettävien reunaehtojen määräämään reunan paikkaan, joka puolestaan vaikuttaa virtaukseen ja sitä kautta permeabiliteettiin.

Tasapainojakauma f^{eq} vaikuttaa siihen, kuinka virtaus kehittyy ja se voidaan valita hila-Boltzmann-menetelmässä vapaasti. Tässä tutkielmassa käytetään myöhemmin esitettävää Maxwell-Boltzmann-tasapainojakaumaa (kaava (52) tai (53)).

4.1.2 Monen relaksointiajan malli (MRT)

Yhden relaksointiajan hila-BGK:sta poiketen MRT-mallissa relaksoidaan kukin tiheysfunktioita f_i erikseen. MRT-menetelmä perustuu siihen, että hiukastiheydet ilmoittavasta 19-ulotteisesta hila-avaruudesta siirrytään sopivasti valitulla kannanvaihto-operaatiolla toiseen 19-ulotteiseen avaruuteen, ns. momenttiavaruuteen, jossa hila-avaruuden tiheysvektoria \mathbf{f} vastaa momenttiavaruuden vektori \mathbf{m} . Seuraavaksi esitellään menetelmä pääpiirteittäin artikkelin [16] perusteella.

Tiheysjakauman \mathbf{f} muunnos momenttiavaruuteen tehdään kertomalla tiheysvektori \mathbf{f} sopivasti laaditulla muunnosmatriisilla \mathbf{M} , josta tuloksena saadaan momenttivektori \mathbf{m} , $\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{f}$. Muunnosmatriisi \mathbf{M} muodostetaan siten, että momenttiavaruuden kantavektorit muodostavat momentit, joilla on fysikaalinen merkitys. Kannanvaihtomuunnos ortonormitetaan Gram-Smidth-

ortonormitusmenetelmällä.

Momenttiavaruudessa relaksointi voidaan suorittaa kullekin fysikaaliselle momentille erikseen, jolloin simuloinnin ominaisuuksiin päästään vaikuttamaan huomattavasti enemmän kuin yhden relaksointiajan hila-BGK-menetelmässä. Relaksointi suoritetaan operoimalla relaksointimatriisilla \mathbf{S} , jonka diagonaalilla ovat halutut relaksointiparametrit. Relaksointimatriisi on

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \text{diag}(s_0, s_1, \dots, s_{18}) \\ &= \text{diag}(0, s_1, s_2, 0, s_4, 0, s_4, 0, s_4, s_9, s_{10}, s_9, s_{10}, s_{13}, s_{13}, s_{13}, s_{16}, s_{16}, s_{16}) \\ &= \text{diag}(0, s_e, s_\varepsilon, 0, s_q, 0, s_q, 0, s_q, s_\nu, s_\pi, s_\nu s_\pi, s_\nu, s_\nu, s_\nu, s_m, s_m, s_m), \end{aligned}$$

missä relaksointiparametri s_e ja s_ε relaksoivat energiaan liittyviä momenteja, s_q relaksoi lämpövuohon liittyviä momenteja, s_π ja s_m relaksoivat liikemäärään liittyviä momenteja ja s_ν relaksoi viskositeettiin liittyviä momenteja. Relaksointiparametreilla voidaan säätää simulaation ominaisuuksia, kuten leikkausviskositeettia ja tilavuusviskositeettia. Lisäksi viskositeettiparametrien vaikutus permeabiliteettiin voidaan eliminoida lähes kokonaan riittävän huokoisille näytteille, joten näitä parametreja voidaan nostaa huomattavasti korkeammiksi kuin hila-BGK:ssa. Korkeamman viskositeetin käyttö vakauttaa ja nopeuttaa simulointia.

Relaksoinnin jälkeen suoritetaan käänteismuunnos \mathbf{M}^{-1} , joka palauttaa tiheysjakaumavektorin takaisin hila-avaruuteen. Boltzmannin yhtälö voidaan siis kirjoittaa MRT-menetelmälle muodossa

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} (\mathbf{M} \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M} \mathbf{f}(\mathbf{r}, t)). \quad (49)$$

Kuten hila-BGK:ssakin, tasapainojakauma \mathbf{f}^{eq} voidaan valita vapaasti. Järkevä valinta myös MRT:lle on Maxwell-Boltzmann-tasapainojakaumaa (kaava (52) tai (53)). Käytännössä yleensä kukin momentti relaksoidaan erikseen momenttiavaruudessa, jolloin kullekin momentille käytetään sitä vastaavaa tasapainojakaumaa \mathbf{m}^{eq} :

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}^{-1} \hat{\mathbf{S}} (\mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}(\mathbf{r}, t)). \quad (50)$$

4.2 Tasapainojakauma

Kaasujen kineettisestä teoriasta voidaan johtaa nesteelle tasapainotilan tiheysjakauma. Merkittävä tämä tiheysjakauma on sen vuoksi, että virtauskenttä relaksoituu paikallisesti sitä kohti, mikäli virtauksen ympäristö pysyy muuttumattomana. Tämä tasapainotilan tiheysfunktio tunnetaan Maxwell-Boltzmann-

tasapainojakaumana [5]

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi \frac{k_B T}{m})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2\frac{k_B T}{m}}\right), \quad (51)$$

missä $\boldsymbol{\xi}$ on nesteen mikroskooppinen nopeus (nestemolekyylien nopeus) ja \mathbf{u} on nesteen virtausnopeus. Kun nopeusvektori \mathbf{u} diskretoidaan ja käytetään Taylorin polynomikehitelmää, voidaan tasapainojakaumasta johtaa diskreetissä simulointihilassa toimiva muoto

$$f_i^{eq} = \rho(\mathbf{r}, t) w_i \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2}\right), \quad (52)$$

missä f_i^{eq} on hilapisteen linkin i suunnan tasapainojakauma, w_i suunnan i painokerroin ja \mathbf{u} virtauksen nopeusvektori kyseisessä hilapisteessä. Painokerroin w_i riippuu linkin pituudesta, lepohiukkaselle se on $w_0 = \frac{1}{3}$, lähinaapurille $w_1 = \frac{1}{18}$ ja toiseksi lähimmälle naapurille $w_2 = \frac{1}{36}$. Huokoisen materiaalin simuloinneissa virtausnopeudet ovat hyvin pieniä, jonka vuoksi tasapainojakaumaa voidaan vielä yksinkertaistaa. Virtauksen ollessa Stokesin alueella voidaan epälineaariset termit jättää huomioimatta ja käyttää laskennallisesti yksinkertaisempaa muotoa

$$f_i^{eq} = \rho(\mathbf{r}, t) w_i \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2}\right). \quad (53)$$

Virtaus on Stokesin alueella, jos Reynoldsin luku on

$$R = \frac{\rho v D}{\mu} \ll 1,$$

missä ρ on nesteen tiheys, v nesteen nopeus, D huokosten keskimääräinen koko ja μ dynaaminen viskositeetti.

4.3 Faasirajapinnat ja niiden reunaehdot

Hila-Boltzmann-menetelmä soveltuu hyvin monentyypisiin virtaussimulointeihin. Menetelmällä voidaan simuloida tässä tutkielmassa käytetyn permeabiliteettisimuloinnin lisäksi esimerkiksi monifaasivirtauksia, kuten nestepisaran imeytymistä kiinteän materiaalin kaasun täyttämään huokostilavuuteen ja hiukkaspartikkelien suspensiota virtaustilanteessa. Eri tyyppisiin rajapintoihin tarvitaan erilaisia reunaehtoja. Permeabiliteettisimulaatiossa simuloidaan yleensä nesteen saturoitunutta virtausta huokoisessa materiaalissa, jolloin simulaatiossa on vain kahta faasia - nestettä sekä kiintoainetta.

4.3.1 Tomografiakuvan käsittely

Röntgenmikrotomografia on tekniikka, jolla tutkittavasta materiaalista saadaan tarkka tiheyskenttä. Röntgenmikrotomografiassa näytteestä otetaan läpivalaisukuvia useista eri suunnista, joiden perusteella näytteen sisäistä rakennetta kuvaava kolmiulotteinen tiheyskenttä voidaan rekonstruoida. Jyväskylän yliopiston fysiikan laitoksella on käytössä Skyscan 1172-röntgenmikrotomografialaite, jonka avulla tutkimusryhmässämme tutkitaan mm. paperin rakennetta. Tällä laitteella on tuotettu myös osa tässä tutkielmassa käytetyistä rakenteista.

Kun tiheyskenttä jaetaan huokos- ja kiintoainealueisiin, voidaan materiaalin virtausominaisuuksia tutkia hila-Boltzmann-menetelmällä. Jotta simuloinnit antaisivat luotettavia tuloksia, on harmaasävykuvien segmentointi - ositus huokos- ja kiintoainepisteisiin - tehtävä mahdollisimman hyvin.

Kuvantamismenetelmän vuoksi kuviin jää kohinaa, joka on eliminotava mahdollisimman hyvin, koska ylimääräinen kohina segmentoidussa kuvassa lisää näytteen ominaispinta-alaa ja lisää siten virtausvastusta. Kohinan poistaminen tehdään ennen varsinaista segmentointia. Kohinan poistamiseen käytetään adaptiivista paikallisen kohinan suodatusta, jonka toiminta esitellään seuraavaksi. Kohinan poiston jälkeen vokselin tiheyden arvo $f(\mathbf{x})$ määräytyy käytetyssä algoritmista siten, että

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \frac{\sigma_\eta^2}{\sigma_L^2} [g(\mathbf{x}) - m_L(\mathbf{x})], \quad (54)$$

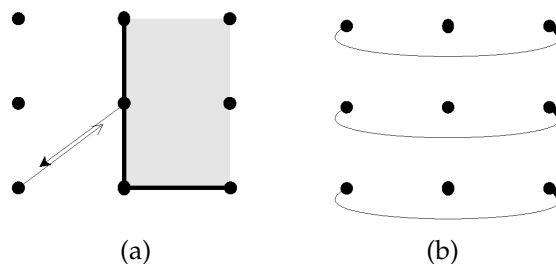
missä $g(\mathbf{x})$ on vokselin alkuperäinen tiheysarvo, m_L on keskimääräinen tiheys ja σ_L tiheyden varianssi \mathbf{x} :n ympäristössä, ja σ_η on haluttu kohinan varianssi, jota käytetään säätöparametrina. Paikallinen tiheyden varianssi σ_L on suuri faasirajapinnan läheisyydessä, jolloin vokselin tiheysarvo määräytyy alkuperäisen vokselin tiheysarvon lähelle ja rajapinta tulee kuvatuksi tarkasti. Sen sijaan siellä, missä tiheyden varianssi σ_L on pieni, määräytyy suodatetun vokselin arvo paikallisen tiheyskeskiarvon m_L perusteella. Paikalliset keskiarvosuureet σ_L ja m_L määritetään \mathbf{x} :n ympäristössä, jonka koko voidaan valita mielivaltaisesti sen mukaan, minkä mittakaavan yksityiskohtia halutaan suodatuksessa jättää näkyviin. Tässä tutkielmassa käsitellyissä näytteissä ympäristönä käytetään kuutiota, jonka koko on 3^3 vokselia. [22]

Rakennekuvan kynnystämisessä käytettävä arvo optimoidaan iteratiivisella algoritmilla. Algoritmiin annetaan ensin alkuarvaus kynnysarvolle T , jonka jälkeen algoritmi määrittää uuden kynnysarvon T_{i+1} kaavalla

$$T_{i+1} = \frac{\langle f_s \rangle + \langle f_p \rangle}{2},$$

missä $\langle f_s \rangle$ on kiintoainepisteiden ja $\langle f_p \rangle$ huokospisteiden tiheyksien keskiarvo, jotka on määritetty kynnyksisarvolla T_i . Iteraatiota jatketaan niin kauan, kunnes kynnyksisarvo ei enää muutu, ts. $T_{i+1} = T_i$. [23]

4.3.2 Reunaehdot



Kuva 3: Reunaehdot: (a) luistamaton reuna (no-slip) ja (b) jaksollinen reuna

Reunaehdot määräävät HB-simulaatiossa sen, mitä tapahtuu hiukkaselle, joka tulee faasirajapinnalle tai simulaatioavaruuden reunalle. Näytteen ulkorajoilla käytetään usein jaksollista reunaehto. Käytännössä tämä tarkoittaa sitä, että näytteen alareunassa liikkuva hiukkanen siirtyy simulaation siirtovaiheessa näytteen yläreunaan (ks. kuva 3b). Tämän lisäksi virtauksen suuntaisella jaksollisella reunalla käytetään yleensä liikemääräntasausta, joka saa aikaan kyseisellä rajapinnalla homogeenisen virtauskentän. Liikemääräntasauksen vaikutuksesta virtauskentästä häviää näytteen rakenteen vaikutus jaksollisella reunalla, ts. rakenne ei vaikuta virtauskentän muotoon jaksollisen reunan toisella puolella.

Paikallaan olevilla neste-kiintoaine-rajapinnoilla käytetään yleensä luistamattoman reunan reunaehto (no-slip), jolla seinämään törmäävän hiukkasen suunta käännetään vastakkaiseksi (kuva 3a). Eräissä virtaustilanteissa tarvitaan ns. luistoreunaa (slip). Luistoreuna tarkoittaa sitä, että nestevirtaus luistaa reunaa myöten, joka voidaan mallittaa peilaamalla rajapinnalle tulevat hiukkaset heijastussuuntaansa. Esimerkkinä tällaisen reunaehdon käyttötarkoitukselta voidaan mainita tavallinen putkivirtaus. Kun nestereunoille asetetaan slip-reunaehto, on riittävää simuloida nestevirtausta ainoastaan neljäsosassa putkea, jolloin säästyy paljon muistia.

4.4 Painegradientti ja tilavuusvoima

Kokeellisissa permeabiliteettitutkimuksissa nestevirtaus saadaan aikaan paineen avulla, jolloin nesteeseen kohdistuva voima on painegradientti ∇p . Myös

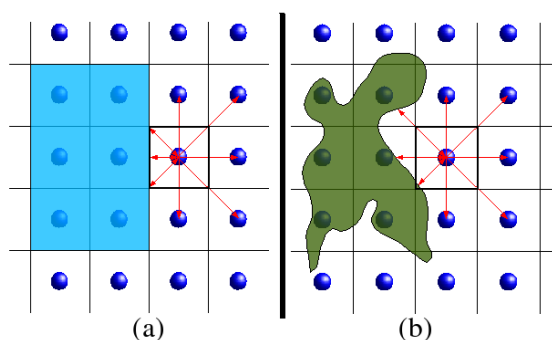
virtaussimulaatiossa nestevirtaus voidaan saada aikaan asettamalla simulaatioon muiden reunaehtojen lisäksi painereuna. Käytännössä tällaisessa järjestyksessä voima siirtyy kaikkialle nesteeseen hiukkasten törmäyksien kautta.

Hila-Boltzmann-simulaatiossa painereunan nesteeseen aiheuttama painegradientti ∇p voidaan korvata koko nesteelle vakiolla tilavuusvoimalla g . Tämä voidaan tehdä sen vuoksi, että painereunan aiheuttama painekenttä leviää tasaisesti kokoonpuristumattomassa nesteessä ja syntyvä painegradientti on lähes vakio kaikkialla nesteessä. Tämä on hyödyllistä sen vuoksi, että tilavuusvoima vaikuttaa välittömästi kaikkiin hiukkasiin, eikä voiman välittymiseen kulu aika-askelia samaan tapaan kuin käytettäessä painereunaa. Menetelmällä saadaan sama tulos kuin painegradientilläkin - kokeellisessa järjestyksessä se vastaa työntävän voiman korvaamista hiukkasia alaspäin vetävällä gravitaatiovoimalla. [7]

5 Tarkan faasirajapinnan reunaehto

Erityisesti huokoisen materiaalin hila-Boltzmann-virtaussimuloinneissa kiintoaineen ja nesteen rajapinta määräytyy tavallisesti suoraan kynnystetyn kolmiulotteisen bittikarttakuvan perusteella. Käytettävissä olevan rajallisen muistikapasiteetin vuoksi joko simulointihilan koko ja tiheys joudutaan pitämään heikompana kuin realististen simulointien kannalta olisi tarpeen. Tällaisista syistä simulaatiossa faasirajapinnan muodon esittämistarkkuuden lisääminen parantaa simulaation laatua.

Tavallinen reunaehto kiintoaineseinille on virtausdynamiikassa ns. no-slip-reunaehto, joka tarkoittaa sitä, että virtaus ei luista seinää pitkin vaan virtauksen nopeus seinän lähellä on sama kuin seinän nopeus. Kiintoaineseinät eivät liiku permeabiliteettisimulaatiossa, joten myös virtausnopeus $\mathbf{u} = 0$ faasireunalla. Hila-Boltzmann-virtaussimulaatiossa no-slip-reunaehto mallinnetaan siten, että seinään törmäävät nestehiukkaset kimmotetaan takaisin tulo-suuntaansa (ns. bounce-back-sääntö, ks. kuva 4). Sääntöä käytettäessä toteutuu massan säilyminen ja hiukkasten nopeus rajapinnalla on keskimäärin $\langle \mathbf{v} \rangle = 0$. Pinnan muoto on mallissa diskretoitu hilan tarkkuudella, joten virtauksen kannalta hilan alkeiskopit ovat kuution muotoisia. Tämän vuoksi materiaalin ominaispinta-ala on simuloitavan virtauksen kannalta suurempi kuin näytteen todellinen ominaispinta-ala.



Kuva 4: Faasirajapinnan reunaehdot: (a) perinteinen bounce-back-reunaehto ja (b) pinnan tarkan muodon huomioon ottava bounce-back.

Hila-Boltzmann-simulaation muistivaatimus riippuu simulaatiossa olevien nestepisteiden määrästä. Tavanomaista bounce-back-reunaehtoä käytettäessä virtaussimuloinnin hilan resoluutio on sidottu alkuperäisen kuvan resoluutioon. Jos materiaalin geometriassa on vain vähän virtaukseen vaikuttavia yksityiskohtia, hyvän virtaussimulointituloksen saamiseksi voi riittää melko harva hila. Jos taas geometriassa on paljon yksityiskohtia, tarvitaan huomattavasti

tiheämpää hilaa.

Se, kuinka tiheää simulointihilaa on käytännössä tarpeen käyttää, riippuu täysin simuloinnissa käytettävän näyttekuvan ominaisuuksista. Usein kuvan resoluutio on paljon suurempi kuin hilan koon kannalta olisi tarpeellista, mutta toisaalta pinnan geometrian yksityiskohdat voivat vaikuttaa paljonkin virtauksen kehittymiseen. Toisaalta, mikäli esimerkiksi halutaan simuloida virtauksia korkean Reynoldsin luvun alueella, tarvitaan virtauksen pyörteisyyden vuoksi huomattavan tiheää hilaa.

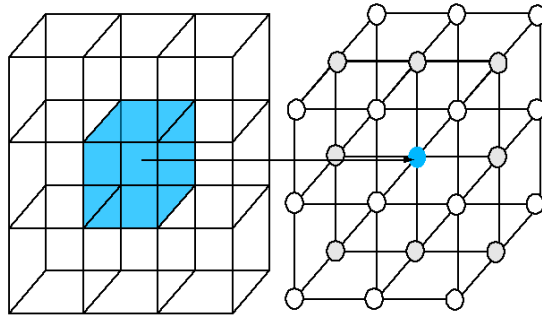
Jos virtaussimuloinnin faasirajapinta esitetään tavalliseen tapaan kuution muotoisten vokseleiden tarkkuudella, tulee materiaalin seinämästä hyvin kulmikas ja epätasainen, vaikka todellisuudessa kyseessä olisi täysin sileä pinta. Pinnan epätasaisuus lisää virtausvastusta simulaatiossa ja vaikuttaa siten virtauksen kehittymiseen ja permeabiliteettiin.

Yleisesti tunnetaan useita algoritmeja, jotka generoivat tavanomaista kynnystystä tarkempia esityksiä pinnoille bittikarttakuvan perusteella. Algoritmit antavat tuloksena joukon pintoja kuvaavia monikulmioita. Algoritmin laadusta riippuen pinnan generointi vähentää tai jopa kokonaan poistaa pinnan laattikomaisuudesta aiheutuvan epätasaisuuden ja tuottaa realistisemmän esityksen pinnan muodoista. On ilmeistä, että mikäli faasirajapinnat voidaan käsitellä realististen pintojen avulla, myös simulointitulokset tulevat tarkemmiksi. Toisaalta bounce-back-reunaehto ei tällöin sovellu sellaisenaan vaan siihen on tehtävä parannuksia.

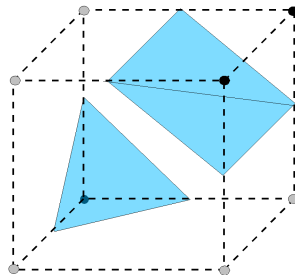
5.1 Pintojen muodostaminen Marching Cubes -algoritmilla

Röntgenmikrotomografialla voidaan tuottaa vain tietyn tarkkuusluokan arvio kuvattavan materiaalin geometriasta. Jokainen vokseli kuvaa kyseisen pisteen keskiarvoista tiheyttä ja kynnystetyssä kuvassa yksittäisen hilakopin faasi kuvaa kyseisen kuutiovokselin keskimääräistä faasia. Käytännössä faasirajapintojen lähellä on vaikeampi ilmoittaa täsmällistä faasia koska ei ole itsestään selvää, mihin kohtaan kuvan tiheysinformatiossa asetetaan faasien raja. Pinnanmuodostusalgoritmeissa tämä raja valitaan määrätyn tiheyden kynnystysarvon perusteella.

Realistisen virtaussimulaation kannalta tärkeänä tavoitteena on löytää faasirajapinta mahdollisimman tarkasti bittikarttakuvasta. Marching Cubes on eräs tunnetuimpia pintojen monikulmioesitysten generoimiseen kehitetyistä algoritmeista [15]. Se on yksinkertainen ja nopea algoritmi, joka muodostaa suljetuja pintoja annetun bittikarttakuvan perusteella.



Kuva 5: Marching Cubes -algoritmissa vokselien arvot ajatellaan yksittäisten pisteitten tiheyksinä. Oikeanpuoleisessa kuvassa sinisellä merkitty piste vastaa vasemmanpuolisen kuvan sinisellä merkittyä vokselia.

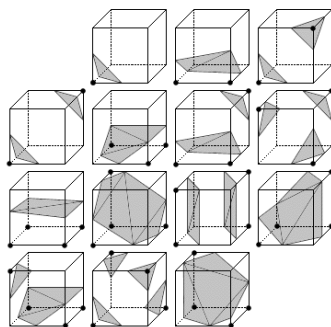


Kuva 6: Marching Cubes -algoritmissa käytettävä yksikkölaatikko. Laatikon kärkipisteet ovat varsinaisia kuvan pisteitä, jotka kynnystetään ns. iso-arvolla binäärikuvaksi - tummat pisteet ovat kiintoainepisteitä ja harmaat pisteet nestepisteitä. Marching Cubes -algoritmi pääättelee kärkipisteiden perusteella, millaiset pinnat kuvaavat parhaiten kyseistä paikkaa, esimerkkitapauksen tasot on piirretty kuvaan.

Edellä mainitun keskiarvotulkinnan sijaan tulkitaan nyt bittikarttakuvassa oleva informaatio siten, että tiheyden tarkka arvo tunnetaan vokselikuutioiden keskipisteissä. Yhden Marching Cubes -kuution keskipisteeksi tulee näin vokselikuution nurkkapisteet ja reunapisteiksi vokselikuutioiden keskipisteet (kuva 5). Marching Cubes -algoritmi toimii siten, että se muodostaa pintakolmioita sen mukaan, millainen faasi-informaatio kunkin kuvapisteen Marching Cubes -kuution nurkissa on. Erilaisia kolmiointimahdollisuuksia tavalliselle kahdeksan kärkipisteen kuutiolle on kaikkiaan $2^8 = 256$. Näiden määrä vähenee 15 erilliseen tapaukseen kun otetaan huomioon kierto- ja peilaussymmetria kaikkien kolmen akselin suhteen sekä käänteissymmetria - samat pinnat saadaan myös vaihtamalla kaikkien nurkkapisteiden faasia.

Tapaukset on taulukoitu algoritmin toteutuksissa ja taulukoiden perusteel-

la pintojen valitseminen on nopeaa. Tällä tavoin saadaan huomattavasti aikaisempaa parempi arvio faasirajapinnan todelliselle paikalle.



Kuva 7: Marching Cubes -algoritmin pintakolmiotapaukset. Algoritmi käy kuvan pinnat läpi kuutioittain ja valitsee pintakolmiot kuution nurkkapisteiden faasin perusteella. [15]

5.2 Mielivaltaisen muotoisen seinän bounce-back-reunaehto

Marching Cubes -algoritmin antaman monikulmioesityksen määräämä seinän paikka voi sijaita mielivaltaisella etäisyydellä hilapisteistä, jonka vuoksi seinämän yksinkertainen bounce-back-reunaehto ei enää sellaisenaan riitä. Tarvitaan siis reunaehto, joka ottaa huomioon reunan tarkan sijainnin. Esitellään seuraavaksi tällainen reunaehto viitteen [14] perusteella.

Yksinkertaisuuden vuoksi tarkastelemme kaksiulotteista D2Q4-hilaa (ks. kuva 8), jossa faasirajapinta on hilan pisteiden \mathbf{r}_j ja \mathbf{r}_s välissä mielivaltaisessa paikassa \mathbf{r}_w . Olkoon $\delta_x = |\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_j|$ hilapisteiden etäisyys toisistaan. Määritellään ns. q -arvo seinän etäisyytenä nestepisteestä \mathbf{r}_j suhteessa hilakopin kokoon,

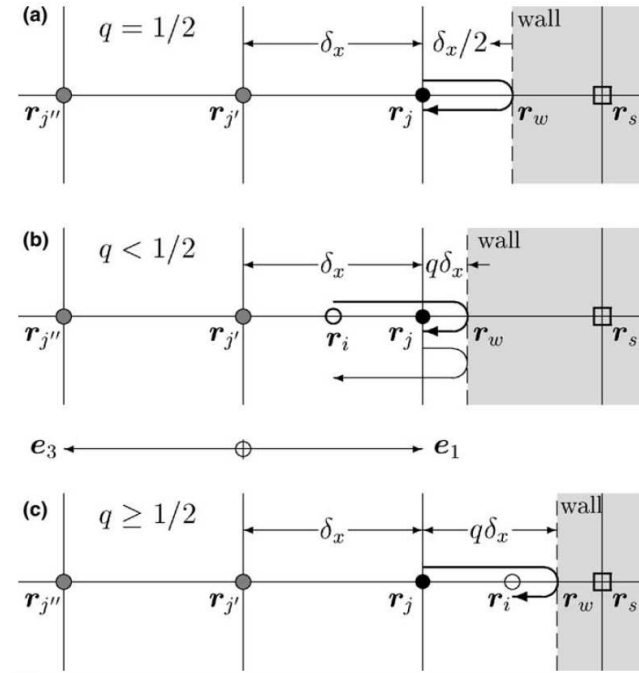
$$q = \frac{|\mathbf{r}_w - \mathbf{r}_j|}{\delta_x}. \quad (55)$$

Bounce-back-säännössä $q = \frac{1}{2}$, joka tarkoittaa sitä, että faasirajapinta on täsmälleen hilapisteiden puolivälissä. Todetaan tämä tarkastelemalla hilapisteestä \mathbf{r}_j ajanhetkellä t seinää kohti (\mathbf{e}_1) lähtevää nestehiukkasta. Nestehiukkasen nopeus on linkin pituus δ_x aika-askelta kohden, tässä siis $v = \frac{\delta_x}{T}$. Bounce-back-sääntöä käytettäessä nestehiukkasen liikemäärä käännetään siirtovaiheessa vastakkaiseksi, joten ajanhetkellä $t + 1$ hiukkanen on jälleen paikassa \mathbf{r}_j kulkiessaan vastakkaiseen suuntaan (\mathbf{e}_3). Voidaan ajatella, että hiukkanen on ensin kulkenut matkan $\delta_x/2$ ja kimmunut seinästä takaisin matkan $\delta_x/2$ saapuen takaisin

solmuun \mathbf{r}_j .

Tarkastellaan seuraavaksi tapausta $q < \frac{1}{2}$, jolloin seinä on lähempänä kuin hilapisteiden puoliväli (ks. kuva 8b). Havaitaan, että paikasta \mathbf{r}_j suuntaan \mathbf{e}_1 lähtevä hiukkanen päätyisi törmäyksen jälkeen pisteeseen \mathbf{r}_i , joka sijaitsee hilapisteiden \mathbf{r}_j :n ja $\mathbf{r}_{j'}$:n välissä. Koska hiukkasia voidaan kuitenkin tallettaa vain hilapisteisiin, tehdään hiukkasen liikkeen tarkastelu käänteisesti: hilapisteiden välissä kohdasta \mathbf{r}_i lähtevä hiukkanen saapuu törmäyksen jälkeen hilapisteeseen \mathbf{r}_j . Koska lähtöpiste \mathbf{r}_i ei ole hilapiste, tiheysfunktion arvoa siinä ei tunneta, mutta se voidaan interpoloida viereisten hilapisteiden arvoista. Interpoloitu tiheysfunktion arvo sijoitetaan edelleen tiheysfunktiksi f_3 kohdehilapisteessä \mathbf{r}_j .

Tarkastellaan vastaavalla tavalla tapausta, jossa seinämä on kauempana kuin hilapisteiden puoliväli, ts. $q > \frac{1}{2}$ (kuva 8c). Tällöin pisteestä \mathbf{r}_j liikkeelle lähtevä hiukkanen päätyy seinään törmättyään pisteeseen \mathbf{r}_i , joka on hilapisteen \mathbf{r}_j ja seinäpisteen \mathbf{r}_s välissä. Tässäkään tapauksessa kyseessä ei ole hilapiste, ja kuten aikaisemminkin, on tarkastelu tehtävä käänteisesti: pisteestä \mathbf{r}_i lähtevä hiukkanen törmättyään seinään saapuu hilapisteeseen \mathbf{r}_j . Tällöin tiheysfunktion f_3 pisteessä \mathbf{r}_j arvo saadaan sijoittamalla interpoloinnilla saatava arvo f_1 arvo pisteeseen \mathbf{r}_i . Tähän voidaan hyödyntää pisteissä $\mathbf{r}_{j'}$, \mathbf{r}_j ja \mathbf{r}_i olevia f_3 -hiukkastiheyksien arvoja, joista $f_3(\mathbf{r}_i, t) = f_1(\mathbf{r}_i, t - 1)$, ts. f_1 ennen törmäystä. Toisin kuin tapauksessa $q < \frac{1}{2}$, tämä on tehtävä bounce-back-törmäyksen jälkeen, jotta vältetään numeerisesti epävakaa ekstrapoloinnilta.



Kuva 8: Reunan täsmällisen sijainnin huomioon ottava bounce-back-reunaehto. Kohdassa (a) seinä sijaitsee hilapisteiden puolivälissä ($q = 1/2$), jolloin tilanne vastaa tavanomaista bounce-back-reunaehto. Kohdassa (b) seinä on lähempänä ($q < 1/2$) ja kohdassa (c) seinä on kauempana ($q \geq 1/2$) kuin puoliväli, jolloin reunaehdossa tarvitaan interpolointia. (kuvan lähde [14]).

5.3 Nestefaasipisteiden määrääminen tunnettujen pintojen perusteella ja q-arvojen laskeminen

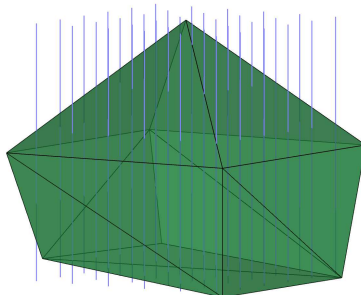
Hila-Boltzmann-simulaatiossa tarvitaan täsmällinen faasi-tieto, eli tieto siitä, onko kyseessä kiintoaine- vai nestepiste. Kun käytetään Marching Cubes -algoritmia pintojen generoimiseen, menetetään tieto hilapisteiden faasista. Pelkän pinnan perusteella ei hilapisteiden faasia voida suoraviivaisesti ilmoittaa. Tietoa hilapisteiden faasista ei voida myöskään enää lukea alkuperäisestä kuvasta, koska rajapinnan lähellä luetut faasit tulisivat väärin Marching Cubes -algoritmillä muodostettujen pintojen suhteen.

Jos pinta ilmoitetaan monikulmioina, on simulaatiohilan tiheyttä helppo skaalata mielivaltaisesti joko suuremmaksi tai pienemmäksi tarpeen mukaan, ilman että menetetään tietoa varsinaisesta pinnan muodosta. On myös mahdollista toteuttaa ns. hilantihennys, joka tarkoittaa sitä, että virtauksen kannalta monimutkaisissa paikoissa simulaatioon luodaan tiheämpi simulointihila. Hilantihennyksen avulla voidaan saavuttaa huomattavia parannuksia simu-

lointitarkkuudessa.

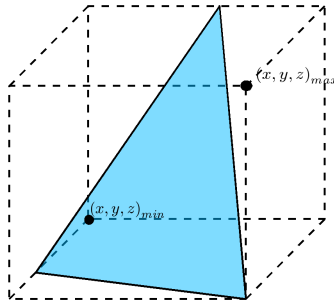
Faasitieto halutaan siis lukea monikulmiotiedosta. Ongelma voidaan ratkaista ns. liukuvan suoran menetelmällä, joka yleistetään kolmiulotteiseen, suljettuja, kolmioista muodostuvia pintoja sisältävään avaruuteen. Marching Cubes -algoritmin tuottamista pinnoista saadaan suljettuja, kun reuna-alueille lisätään yksi kerros lisää huokostilavuutta ennen algoritmin suoritusta.

Liukuvan suoran menetelmän ensimmäisessä vaiheessa valitaan yksi pääkoordinaattiakseli, jonka suuntaan menetelmää sovelletaan. Tätä suuntaa vastaan kohtisuoralta tasolta lähetetään suoria viivoja kolmioita sisältävään avaruuteen ja leikkauspisteitä tutkimalla saadaan selville kunkin avaruuden pisteen faasi. Tiedetään, että näytteen reuna-alueella on huokosfaasia, ja koska avaruudessa voi olla vain kahta faasia ja pinnat ovat suljettuja, faasi vaihtuu aina kun löydetään leikkauspiste kolmion kanssa.



Kuva 9: Faasi-informaation lukeminen kolmiotietorakenteesta liukuvan suoran menetelmällä. Menetelmässä tutkitaan joidenkin koordinaattiakselin suuntaisten suorien leikkauspisteitä pintakolmioiden kanssa ja päätellään sen perusteella, missä on nestettä ja missä kiintoainetta. Kuvassa liukuvat suorat on esitetty sinisellä.

Pintamonikulmointeja generoivat algoritmit, kuten Marching Cubes, tuottavat käytännössä hyvin suuren määrän kolmioita, joten olisi laskennallisesti hyvin raskasta tutkia jokaisen suoran leikkausta jokaisen kolmion kanssa. Leikkattavien kolmioiden määrää voidaan rajata tallentamalla jokaista leikkaavaa suoraa kohti lista niistä kolmioista, jotka voivat kuulua kyseisen suoran alueelle. Tämä toteutetaan tutkimalla kolmioon liittyvää rajaavaa suorakulmaista särmiötä, ts. pienintä mahdollista suorakulmaista särmiötä, jonka sisään kolmio mahtuu (ks. kuva 10). Rajaavan suorakulmaisen särmiön nurkkapisteet saadaan nopeasti valitsemalla kolmion kunkin kärkipisteen koordinaateista minimi- ja maksimiarvot.



Kuva 10: Kolmion rajaava suorakulmainen särmiö, eli pienin suorakulmainen särmiö, jonka sisään kolmio mahtuu.

Liukuvan suoran menetelmän yhteydessä voidaan laskea myös reunaehdossa tarvittavat q -arvot. Nämä arvot saadaan ratkaistua tutkimalla jokaisen rajapinnalla olevan nestepisteen etäisyyttä sen ympäristössä oleviin reunakolmioihin. Tämä tapahtuu määrittämällä hilapisteestä lähtevien linkkien suuntaisten suorien leikkauspisteet sen ympäristössä olevien pintakolmioiden kanssa ja laskemalla siitä leikkauspisteen ja hilapisteen väliset etäisyydet. Jos suora leikkaa usean kolmion kanssa, näistä valitaan se kolmio, joka on lähimpänä. q -arvo saadaan, kun jaetaan leikkauspisteen ja hilapisteen etäisyys kyseisen linkin pituudella (kaava (55)).

Kuten aiekaisemminkin, laskentatyötä voidaan vähentää huomattavasti rajaamalla mahdollisten reunakolmioiden määrää. Kolmio voi muodostaa seinämän hilapisteelle vain, jos se on lähempänä kyseistä hilapistettä kuin seuraava hilapiste. Rajaus toteutetaan jälleen rajoittavan suorakulmaisen särmiön avulla. Tällä kertaa suorakulmaisen särmiön kokoa lisätään jokaiseen suuntaan yhdellä hilayksiköllä, jotta edellämäinittu ehto täyttyisi. Käytännössä prosessorin käsittelemään alueeseen liittyvät kolmiot pitää käydä kerran läpi ja lisätä niiden osoittimet hilapisteissä oleviin osoitinlistatietueisiin. Tällaisen esikäsitelyn jälkeen riittää, kun jokaisessa nestepisteessä tutkitaan vain sen osoitinlistassa olevien kolmioiden leikkauksia.

Kuvatulla menettelyllä saadaan laskettua sekä faasi-informaatio annetun pintamonikulmioinnin perusteella sekä reunaehtoon tarvittavat q -arvot. Nämä voidaan hyödyntää simulaattorissa käyttäen tarkempaa faasirajapinnan reunaehto. Simulaattoriin liittyvää ohjelmointityötä ei voitu tämän tutkielman aikarajoissa toteuttaa, joten menetelmän testaaminen jätetään tämän tutkielman puitteissa tekemättä.

6 Tuloksia monen relaksointiajan menetelmällä

Yhden relaksointiajan hila-BGK-menetelmä on ollut yleisimmin käytetty relaksointimalli. Sen suurin etu on sen yksinkertaisuus: yhden relaksointiparametrin muuttaminen on helppoa ja simuloitava Boltzmannin yhtälö on yksinkertainen toteuttaa. Sitä, että permeabiliteetti riippuu hila-BGK:ssa relaksointiajasta, on pidetty samaan aikaan sekä hyvänä että huonona ominaisuutena. Hyvänä ominaisuutena voidaan pitää sitä, että säädettävän relaksointiparametrin avulla voidaan vähentää äärellisen hilakoon virheitä. [19] Huonoa taas on se, että viskositeettia ei itsessään voida säätää, vaan on tyydyttävä kalibroidun relaksointiparametrin tuottamaan viskositeettiin. Tämä rajoittaa simuloitavia esimerkiksi näytteissä, joissa virtausnopeudet jäävät simuloinnin kannalta liian pieniksi suuren viskositeetin vuoksi. Hila-BGK:n yksinkertaisuus tuo mukanaan rajoitteita, joista pyritään eroon käyttämällä luvussa 4.1.2 esiteltyä monipuolisempaa monen relaksointiajan menetelmää.

Monen relaksointiajan menetelmän, MRT:n käyttökelpoisuus riippuu välittävistä relaksointiparametreista. Jos relaksointiparametrit s_i , $i \in [1, 14]$ valitaan väärin, simulaatio muuttuu epävakaa tai toimii muuten huonosti. Valinnalla $\mathbf{S} = \frac{1}{\zeta} \mathbf{1}$ MRT on identtinen hila-BGK:n kanssa. Oikein valituilla relaksointiparametreilla voidaan parantaa simulaation nopeutta ja vakautta.

MRT:ssä on perusajatuksena se, että erillisillä relaksointiparametreilla relaksoidaan suoraan erilaisia fysikaalisia suureita. Tällaisia suureita ovat mm. massatiheys, liike-energia, liikemäärä, energiavuo ja viskositeettitensori. [16] Sopivilla valinnoilla voidaan vaikuttaa erityisiin simulaation ominaisuuksiin, kuten nesteen leikkaus- ja tilavuusviskositeettiin.

6.1 Leikkaus- ja tilavuusviskositeetti MRT-mallissa

Leikkausviskositeetti kuvaa nesteen ominaisuutta siirtää liikemäärää kohtisuoraan nopeuden suuntaan nähden ja tilavuusviskositeetti puolestaan kuvaa materiaalin kykyä vastustaa kokoonpuristuvuutta. MRT-mallin relaksointiparametreilla päästään helposti muuttamaan hila-Boltzmann-simulaation nesteen sekä leikkaus- että tilavuusviskositeettia. Kinemaattinen leikkausviskositeetti ν ja tilavuusviskositeetti ζ ovat MRT-mallissa

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{s_\nu} - \frac{1}{2} \right) \quad (56)$$

$$\zeta = \frac{(5 - 9c_s^2)}{9} \left(\frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right) = \frac{2}{9} \left(\frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right), \quad (57)$$

missä muuttujat s_ν ja s_e ovat mallin relaxointiparametreja ja c_s on järjestelmän äänen nopeus. [20] Usein simulointien kannalta viskositeettiparametrien kasvattaminen on hyödyllistä sen vuoksi, että viskositeetti saa virtauksen kehittymään nopeammin lopulliseen muotoonsa. Tämä johtuu siitä, että vahvasti viskoottisessa nesteessä paineimpulssit siirtyvät tehokkaammin kuin vähemmän viskoottisessa nesteessä. MRT:ssä sekä leikkaus- että tilavuusviskositeettia päästään varioimaan relaxointiparametrien kautta. Yllä olevista kaavoista ratkaisemalla s_e ja s_ν saadaan leikkaus- ja tilavuusviskositeettia sääteleville relaxointiparametreille lausekkeet

$$s_\nu = \left(3\nu + \frac{1}{2}\right)^{-1} \quad (58)$$

$$s_e = \left(\frac{9}{2}\zeta + \frac{1}{2}\right)^{-1}. \quad (59)$$

6.2 Viskositeetin vaikutus simuloituun permeabiliteettiin

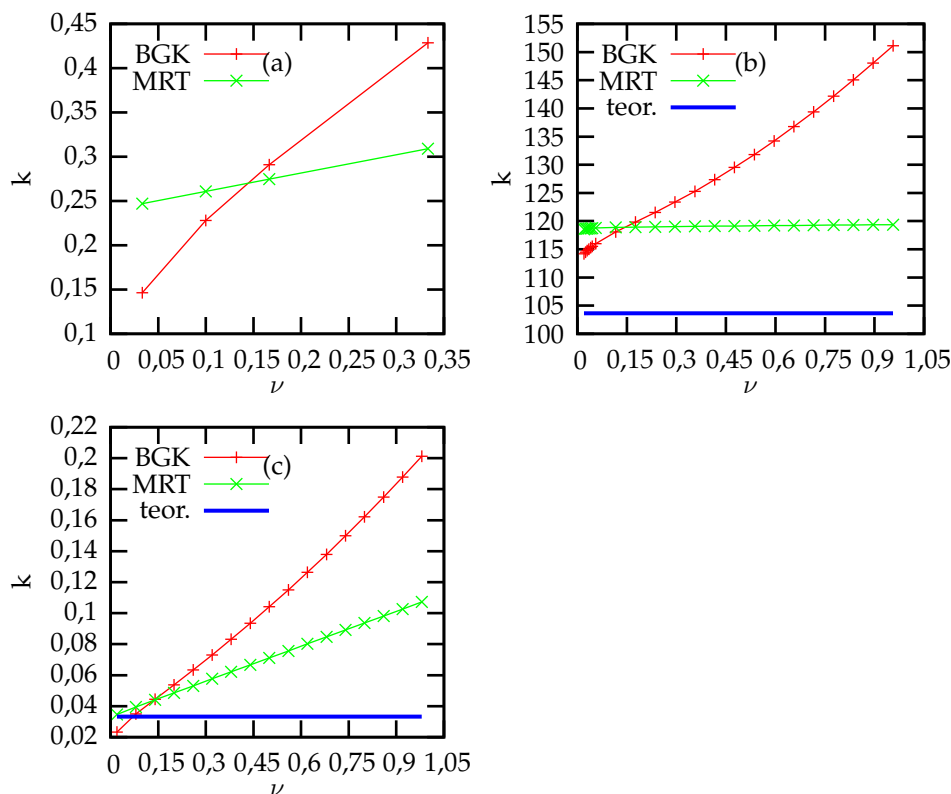
Leikkausviskositeetti välittää kitkan vaikutuksen nesteessä. Jos virtaus pääsee kulkemaan esteettömästi, ei leikkausviskositeetin muuttaminen vaikuta virtaukseen. Jos taas materiaalin aiheuttama virtausvastus on suuri, on myös leikkausviskositeetin vaikutus virtauksen kehittymiseen suurempi. Leikkausviskositeetin ei kuitenkaan pitäisi vaikuttaa lainkaan permeabiliteettiin, joten kyseinen riippuvuus hila-Boltzmann-menetelmässä on epäfysikaalinen ominaisuus, josta halutaan päästä eroon. Hila-BGK-mallissa on tunnettuna heikkoutena ollut suuri permeabiliteetin riippuvuus relaxointiparametrilla, siten siis myös viskositeetilla. Käytännössä tämä johtuu siitä, että viskositeetin lisäksi relaxointiparametri vaikuttaa menetelmässä kiintoainereunan paikkaan, joka puolestaan vaikuttaa permeabiliteettiin. MRT-menetelmässä permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus sen sijaan voidaan eliminoida lähes kokonaan, kun valitaan relaxointiparametrit viitteessä [17] esitellyllä tavalla:

$$\begin{aligned} s_e &= s_\varepsilon = s_\pi = s_\nu, \\ s_m &= s_q = \frac{8(2 - s_\nu)}{8 - s_\nu}, \end{aligned} \quad (60)$$

missä s_ν saadaan lausekkeesta (58). Jos tilavuusviskositeettia halutaan muuttaa erikseen, voidaan s_e valita lausekkeen (59) mukaisesti.

MRT-menetelmän viskositeettiriippuvuutta tarkasteltiin kolmelle erilaiselle näytteelle suoritettujen simulointisarjojen avulla. Simulointien tuloksena saatiin kuvassa 11 esitellyt permeabiliteetin käyttäytymiset leikkausviskositeetin funktiona. Kuvaajista nähdään, että permeabiliteetin leikkausviskositeettiriip-

puvuus MRT:ssä riippuu varsin paljon käytettävästä näytteestä. Jokaisella näytteellä MRT:n tulokset olivat kuitenkin huomattavasti BGK:ta paremmat. HydroCarb90-näyte valittiin simuloitavaksi sen vuoksi, että se edustaa kohtuullisen hyvin eräitä huokoisia näytteitä, joihin simulaattoria tässä tutkielmassa käytetään. HydroCarb90-näytteellä MRT:llä saadut tulokset olivat varsin hyvät.



Kuva 11: BGK- ja MRT-relaksointimallien permeabiliteetin viskositeettiriippuvuuden vertailu erilaisilla näytteillä: kohdassa (a) tulokset huokoiselle materiaalille (HydroCarb90-näyte), sekä kahdelle jaksolliselle pallonäytteelle: (b) säde $r = 10$, simulointialueen sivun koko $d = 40$ ja (c) $r = 12,5$, $d = 20$, ts. pallo ei mahdu kokonaan koppiin ja virtauskanavat ovat kapeat. Kuvaajista nähdään, että MRT:ssä permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus on huomattavasti BGK:ta pienempi. MRT:n viskositeettiriippuvuus vaihtelee kuitenkin suuresti näytteiden välillä.

HydroCarb90-näytteen lisäksi simulointikokeet suoritettiin kahdelle pallo-näytteelle. Molemmat näytteet olivat jaksollisia, ensimmäisessä näytteessä oli pallo keskellä suurehkoa yksikkökoppia ja toisessa näytteessä oli yksi suuri pallo, joka ei mahtunut kokonaan yksikkökoppiin. Ensimmäisen pallon tulokset olivat varsin hyvät MRT:lle. Toiselle näytteelle sen sijaan tulokset olivat huomattavasti huonommat, jonka arveltiin johtuvan siitä, että kyseisessä näytteessä nestevirtaus pääsee kulkemaan vain kapeita, melko huonosti diskretoituja virtauskanavia pitkin.

Diskretoinnin vaikutusta permeabiliteetin viskositeettiin riippuvuuteen tutkittiin erityisellä simulointisarjalla. Sarjan yksikkökopit olivat neliön muotoisia, kunkin kopin särmän pituus $d = 40$ hilapistettä, ja niiden keskelle asetettiin eri kokoisia palloja. Pallojen säde sai arvoja väliltä $[5, 25]$, ts. suurimmilla säteillä pallo ei mahtunut kokonaan yksikkökopin sisään, vaan virtaus pääsi kulkemaan ainoastaan sen nurkka-alueilla, näin ollen virtauskentän kuvaamiseen käytettiin vain pieni määrä hilapisteitä virtauskanavan kapeissa kohdissa. Simulointi toteutettiin täysin jaksollisena ilman liikemäärän tasausta. Näytteiden virtauskanavan levein kohta laskettiin yksinkertaisesti näytteen geometriasta kaavalla

$$\Delta = 2 \cdot \left(\sqrt{2} \cdot \frac{d}{2} - r \right),$$

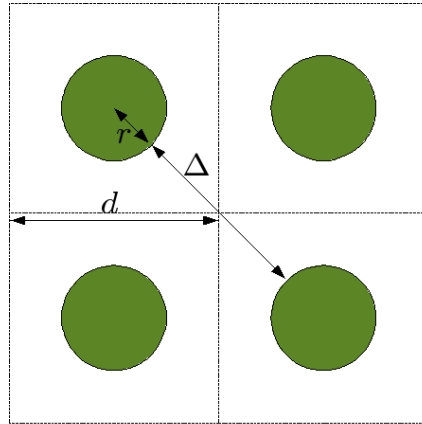
missä d on neliön muotoisen yksikkökopin sivun pituus ja r on pallon säde. Kullekin pallolle mitattiin permeabiliteetti viskositeeteilla

$$\nu \in \{0,05; 0,3; 0,6; 0,9\}.$$

Palloista koostuvien jaksollisten näytteiden permeabiliteettia verrattiin teoreettiseen tulokseen, joka on

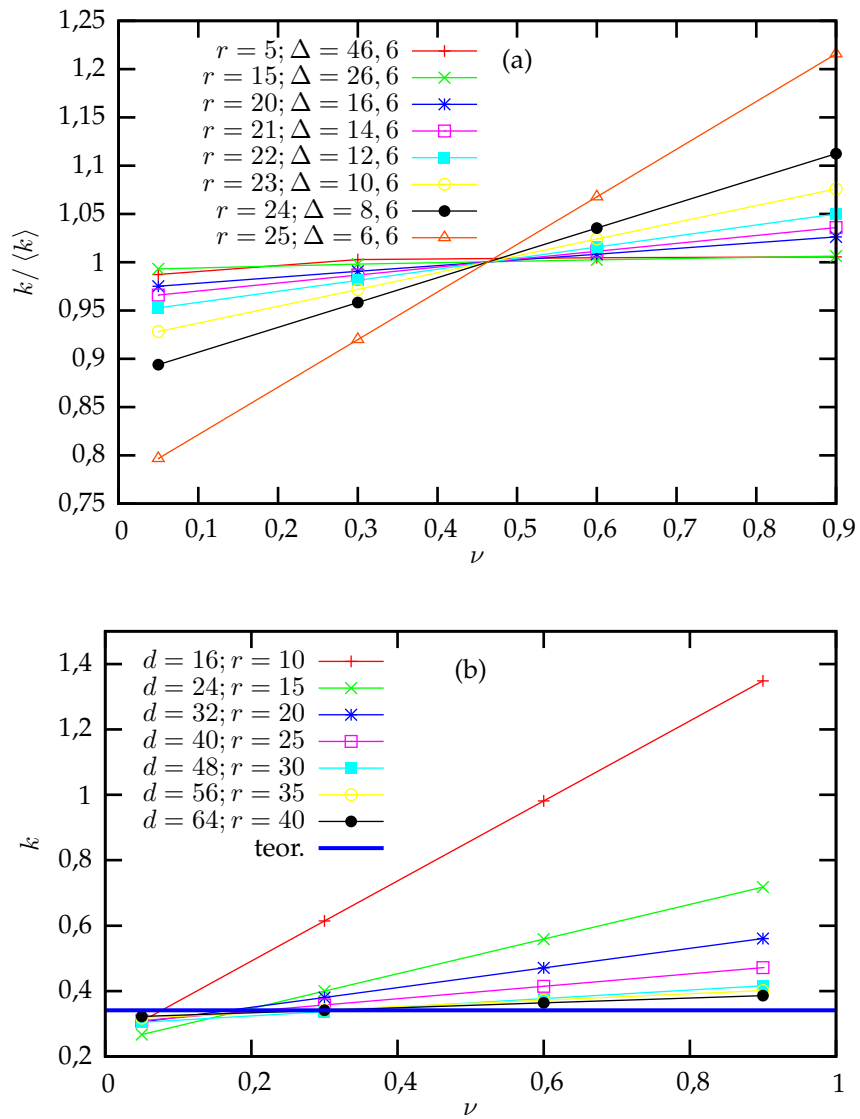
$$k_{teor} = \frac{d^3}{6 \pi r C_D}, \quad (61)$$

missä $C_D = 1,02 \cdot 10^3$ on virtausvastusvakio, r pallojen säde ja L yksikkökopin särmän pituus [24].

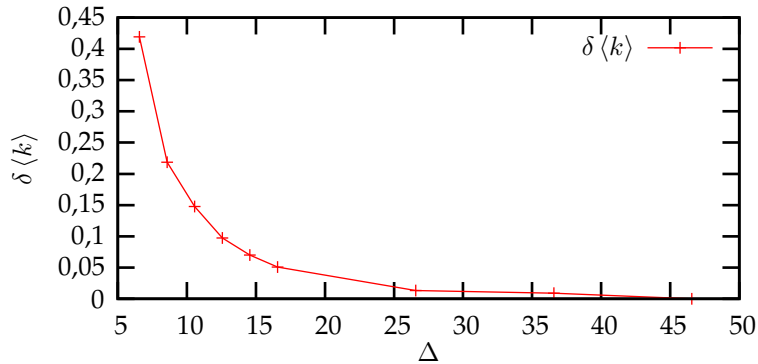


Kuva 12: Jaksollisessa pallonäytteessä suoritetun virtauskanavan levein kohta on Δ . Pallon säde on r .

Saadut tulokset on esitetty kuvissa 13 ja 14. Simulaatiossa olevien virtauksen kannalta merkittävien virtauskanavien diskretoinnin tiheys vaikuttaa huomattavasti näytteen permeabiliteetin viskositeettiriippuvuuteen. Kun virtauskanavan levein kohta on noin $\Delta = 20$ hilayksikön levyinen, voidaan MRT-relaksointimenetelmällä saatua permeabiliteettia pitää lähestulkoon viskositeetista riippumattomana. Käytännössä tämä tarkoittaa sitä, että mikäli halutaan päästä permeabiliteettiriippuvuudesta kokonaan eroon, on simulointitiheää tihennettävä niin paljon, että merkittävät virtauskanavat ovat tässä kokoluokassa.



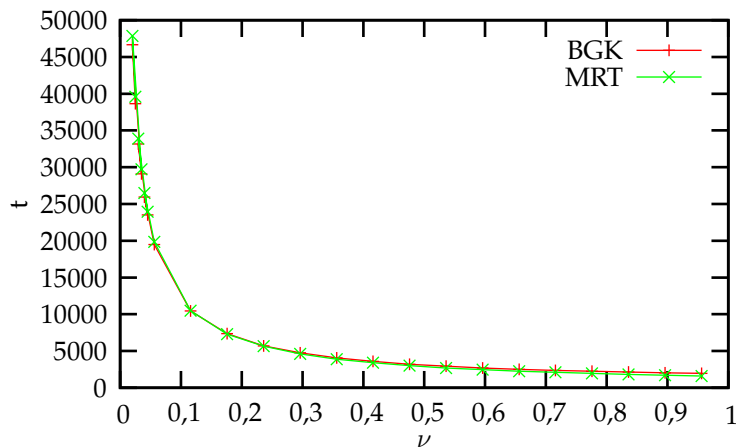
Kuva 13: Virtauskanavavien diskretoinnin vaikutus permeabiliteetin viskositeettiin riippuvuuteen. Kuvaajassa (a) on piirretty permeabiliteetin viskositeettiin riippuvuuskaivat kullekin pallon sateelle. Kuvaajassa (b) on diskretoinnin vaikutus yhdelle pallonaytteelle monella eri tiheyksisella diskretoinnilla sekä analyttisesti lausekkeen (61) avulla laskettu permeabiliteetti kyseiselle naytteelle.



Kuva 14: Kuvassa on piirretty permeabiliteetin virhe $\delta \langle k \rangle = \delta k / \langle k \rangle$ virtauskanavan leveimmän kohdan leveyden Δ funktiona.

6.3 Leikkaus- ja tilavuusviskositeetin vaikutus suoritus aikaan

Suuren leikkausviskositeetin fysikaalinen vaikutus virtaussimulaatiossa on se, että seinämien aiheuttaman virtausvastuksen vaikutus välittyy nesteeseen nopeammin. Virtaussimulointi nopeutuu huomattavasti, kun viskositeettia kasvatetaan. Tämä tapahtuu samaan tapaan sekä MRT- että BGK-malleilla, joka nähdään kuvasta 15.

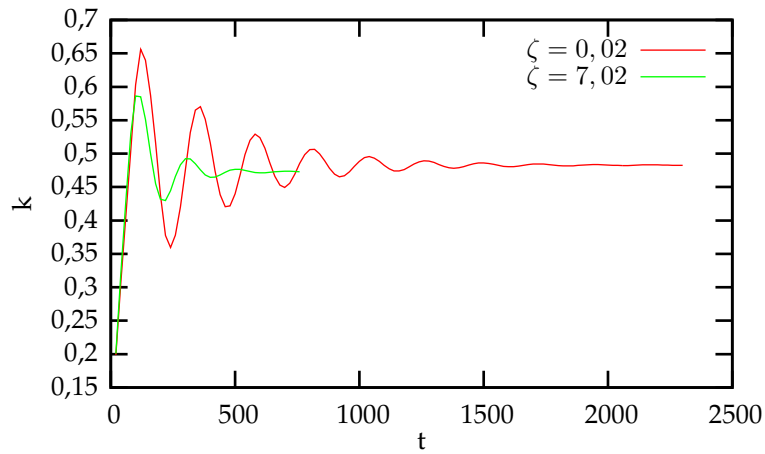


Kuva 15: Saturoitumisajan riippuvuus viskositeetista on lähes sama sekä MRT-että BGK-mallilla. Kuvan tulokset on saatu samalla näytteellä kuin kuvaajan 11 (b) tulokset.

Leikkausviskositeetin kasvattaminen vaikuttaa myös siten, että virtausnopeudet pienenevät suuren kitkan vuoksi. Kun leikkausviskositeettia kasvatetaan, tulee tietyssä vaiheessa vastaan raja, jolloin simulointiaika alkaa jälleen kasvaa. Syy tällaiseen käyttäytymiseen löytyy tilavuusvoimasta, joka on toteutettu siten, että kaikkialle nesteeseen lisätään jokaisella aika-askeleella vakio-liikemäärä. Liikemäärän lisäyksen pitäisi olla paljon nesteen liikemäärää pienempi, muutoin simulaatioon tulee epävakautta, joka näkyy saturoitumiseen kuluvan ajan kasvamisena.

Virtaussimulaatiossa syntyy usein paine-aaltoja. Niitä muodostuu, kun nestemassa tilavuusvoiman vaikutuksesta lähtee simulaation alussa liikkeelle, jolloin kiintoaineen ja nesteen rajapinnoilla syntyy toisistaan poikkeavia paineita. Paine-erot alkavat fluktuoida, jotka ilmenevät simulaatiossa etenevinä paineaaltoina. Usein suuri osa simulointiajasta kuluu syntyneiden paineaaltojen vaimenemiseen. Tilavuusviskositeetti vaikuttaa nesteen kokoonpuristuvuuteen ja suurella tilavuusviskositeetilla paineaallot saadaan hävitettyä pois nopeammin.

Tilavuusviskositeetin vaikutukset näkyvät erityisen hyvin huokoisen materiaalin simuloinneissa, joissa paine-aaltoja syntyy jaksollisella reunalla olevassa nestekerroksessa. Toisin kuin hila-BGK:ssa, MRT:tä käytettäessä tilavuusviskositeetin muuttaminen on helppoa. Kokeita suoritettiin huokoisella ($\phi = 0,5$) joka puolelta jaksollisella näytteellä, joka yksikkökoppiin satunnaisesti sijoitettuja palloista, joiden säde $r = 4$. Kuvassa 16 on piirretty permeabiliteetin saturoitumiskäyrä kahdella tilavuusviskositeetin arvolla. Havaitaan, että suurella tilavuusviskositeetilla saturoituminen tapahtuu huomattavasti nopeammin. Permeabiliteettiin tilavuusviskositeetin muuttaminen ei vaikuta oleellisesti.



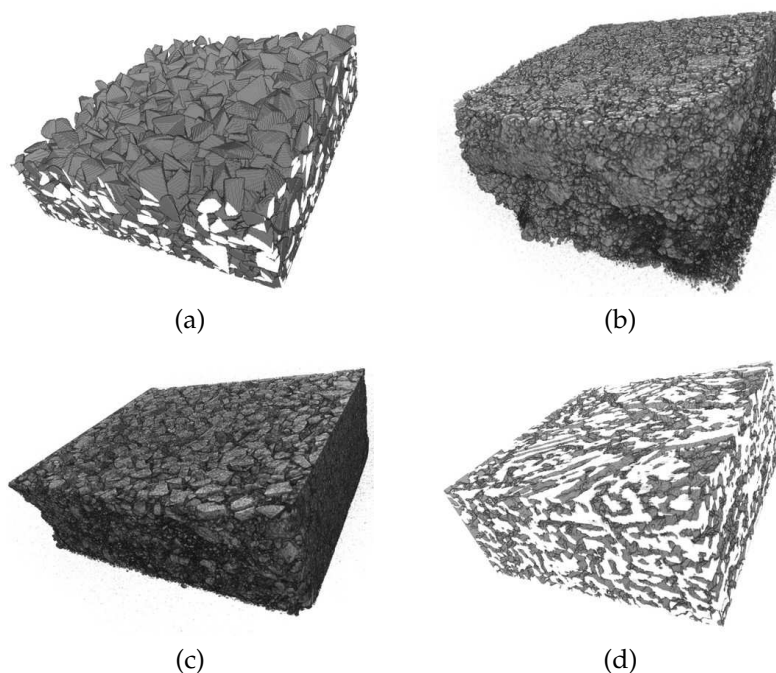
Kuva 16: Kuvaan piirretty permeabiliteetin saturoitumiskuvaajat tilavuusviskositeeteilla $\zeta = 0,02$ ja $\zeta = 7,02$. Paineaaltojen nopeasta eliminoitumisesta suuremmalla ζ :n arvolla seuraa permeabiliteetin nopea saturoituminen. Simulointiin tarvittavien aika-askeleiden määrä vähenee jopa kolmannekseen verrattuna pienen viskositeetin simulointeihin.

Kuten leikkausviskositeetilla, myös tilavuusviskositeetilla on tietty raja-arvo, jonka jälkeen viskositeetin lisääminen hidastaa simulaatiota.

Jatkossa tilavuus- ja leikkausviskositeetit kytketään yhteen valinnalla $s_e = s_v$ lausekkeen (60) tapaan. Tällöin sekä tilavuus- että leikkausviskositeetti kasvavat samanaikaisesti, jolla saavutetaan yleensä halutut tulokset parantuvan simulointinopeuden ja paineaaltojen vähenemisen kautta.

7 Permeabiliteettisimuloinnit

7.1 Tutkittavat näytteet



Kuva 17: Kolmiulotteiset visualisoinnit tutkittavien näytteiden materiaaleista: (a) paperin pinnoitenäytemalli HydroCarb90 sekä röntgenmikrotomografialla tuotetut näytteet (b) *Durcal*, (c) *OmyaCarb* ja (d) paperi.

Tutkielman päätavoitteena oli tutkia erilaisten huokoisten materiaalien neste-läpäisevyysominaisuuksia hila-Boltzmann-menetelmällä. Erityisesti valittiin tutkittaviksi erilaisia paperi- ja pinnoitenäytteitä.

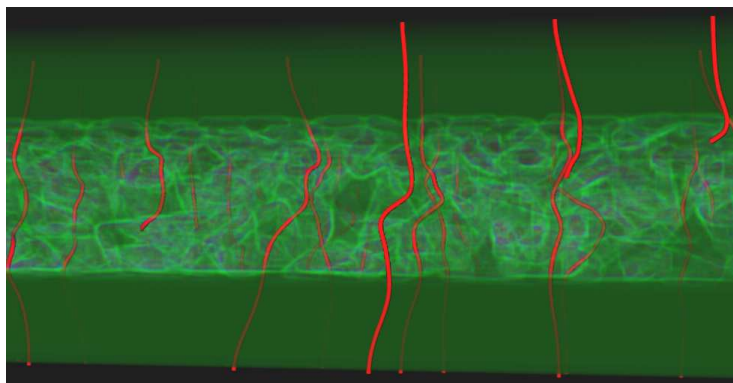
HydroCarb90. Tietokonealgoritmilla muodostettu malli, joka muodostuu pigmenttejä kuvaavista monisärmiöistä, joilla on tietty kokojakauma. Pigmenttien kokojakauma on sama kuin läpäisyelektronimikroskooppikuvauksella mitattu HydroCarb90-pigmenttien todellinen kokojakauma. Mallin erityispiirteenä epähomogeenisuus, pohjalla on tiheästi pakkautuneita pieniä hiukkasia ja pinnalla suurempia ja väljemmin pakattuja hiukkasia (kuva 17 (a)).

Durcal ja OmyaCarb. Paperin täytepigmenteistä valmistetuista näytteistä fyysikan laitoksen SkyScan- röntgenmikrotomografialaitteella otettuja kuvia. Näytteet ovat märkäpuristettuja CaCO_3 -tabletteja. Durcal-näytteessä

keskimääräinen partikkelikoko on $65 \mu\text{m}$ ja OmyaCarb-näytteessä $130 \mu\text{m}$ (kuvat 17 (b) ja 17 (c)).

Paperi. Paperinäytteistä Euroopan synkrotronisäteilylaboratoriossa (ESRF) Grenoblessa otettuja mikrotomografiakuvia. Ensimmäinen mittaussarja suoritettiin kesällä 2005 ja toinen keväällä 2006 (kuva 17 (d)).

7.2 Huokoisen materiaalin permeabiliteettisimulaatioon liittyvät parametrit



Kuva 18: Kuvassa on paperin pinnoitenäyttemallin (HydroCarb90) kuvasta otettu leike, jossa on suoritettu virtaussimulaatio. Materiaalit on kuvattu läpinäkyvinä. Kuvaan on piirretty myös yksittäisiä virtaviivoja.

Permeabiliteettisimulaatiossa on useita säädettäviä parametreja, jotka vaikuttavat simulaation antamiin tuloksiin. Tällaisia parametreja ovat mm.

- simulaation alkuarvot, kuten nesteen nopeus ja tiheys simulaation alussa,
- käytettävät reunaehdot,
- nestevirtausta ajavan tilavuusvoiman suuruus,
- permeabiliteetin konvergenssiehto (simulaation lopetuskriteeri),
- relaksointiparametrit, jotka vaikuttavat mm. viskositeettiin ja
- näytteen periodisten reunojen väliin (näytteen ylä- ja alapäähän) asetettava ylimääräinen nestekerros.

On tärkeää, että simulaatioparametrit asetetaan oikeiksi ennen kuin simulaattoria käytetään permeabiliteetin määrittämiseen tai muuhun virtaustutkimukseen. Sopivat parametrien arvot riippuvat simuloitavasta näytteestä, joten kullekin erityyppiselle näytteelle on selvitettävä kyseiseen simulaatioon sopivat arvot.

Eräs kriteeri toimivalle simulaatiolle on se, että saturoituneen virtauksen nopeus on oikealla alueella. Virtauksen nopeuteen vaikuttaa nesteen viskositeetti sekä käytettävä tilavuusvoima. Myös ylimääräisen nestekerroksen paksuus vaikuttaa virtauksen nopeuteen, erityisesti näytteillä, joissa huokoisuus on pieni. Tällöin tilavuusvoima saa aikaan ylimääräisen kerroksen nestemas-
san alle ylimääräisen paineen, joka vaikuttaa suoraan virtausnopeuteen.

Virtausnopeuden tulee olla huomattavasti suurempi kuin tilavuusvoiman hiukkaselle antama kiihtyvyy-
s. Tämän vuoksi tilavuusvoimaa suurentamalla ei voida nopeuttaa virtausta tukkoisissa näytteissä. Jos hiukkasten liikemäärä on samaa luokkaa kuin tilavuusvoima, muuttuu simulaatio epävakammaksi lisääntyvien fluktuaatioiden vaikutuksesta. Tämä näkyy saturoitumisajan kasvamisena sekä vääristyneenä permeabiliteetin arvona. Nopeuden yläraja on 0,1. HB-simulaatio ei enää toimi sitä nopeammilla virtauksilla.

Käytettäessä MRT-relaksointia voidaan nopeutta säädellä parhaiten muuttamalla nesteen viskositeettia relaksointiparametrien avulla, ks luku 6.2. Viskositeetti kannattaa edellämainittujen rajoitusten puitteissa asettaa mahdollisimman suureksi, koska suurella viskositeetilla saturoitumisaika on pienin (ks. luku 6.3).

Ylimääräisen nestekerroksen tarkoituksena on saada simulointi vastaamaan kokeellista mittaustilannetta, jossa näytteen läpi ajetaan paineen avulla nestevirtausta. Yleensä tällainen ylimääräinen nestekerros on välttämätön, jotta neste pääsee vapaasti virtaamaan näytteen jaksollisella reunalla. Täysin jaksolliselle näytteelle nestekerrosta ei välttämättä tarvita. Kokeilemalla havaittiin, että tutkituille näytteille riittävä nestekerros on noin 10 hilayksikön paksuinen.

Taulukko 1: Simulaatiossa käytetyt asetukset. Simulaation yhteydessä mainitaan erikseen, mikäli käytössä on ollut tässä mainituista poikkeavat asetukset.

- Reunaehdot
 - Neste-kiintoaine-rajapinnalla: no-slip.
 - Reunoilla vaakasuunnassa (x,y): slip.
 - Reunoilla pystysuunnassa (z): jaksollinen reunaehto ja liikemäärän taseus.
- Konvergenssiehto: permeabiliteetin suhteellinen muutos $< 10^{-4}$.
- Tilavuusvoima $g_z = 10^{-5}$.
- Relaksointimalli: BGK ja MRT.
- Relaksointiparametrit
 - BGK-menetelmällä: $\xi = 0,668$.
 - MRT-menetelmällä viskositeetti $\nu = 0,0025$, jota vastaava relaksaatioaika $\tau = 0,508$.
- Nestekerroksen paksuus 5 hilayksikköä/puoli.
- Nesteen nopeus alussa: 0.
- Nesteen tiheys alussa: 1.

7.2.1 Relaksaatioparametrit

Yhden relaksointiajan BGK-menetelmällä viskositeettia säätelevä relaksointiparametri ξ vaikuttaa huomattavasti simulaation antamaan permeabiliteettiin. Tämän vuoksi kyseisessä menetelmässä viskositeettia ei voi paljoa muuttaa. Hila-BGK:ta käytettäessä relaksaatioparametriksi valitaan jatkossa $\xi = 0,668$ aikaisempien tutkimustulosten perusteella.

Monen relaksointiajan MRT-menetelmällä sen sijaan permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus on vähäistä. Tämän vuoksi MRT soveltuu sellaisillekin näytteille, joissa virtausnopeudet BGK-menetelmällä jäisivät liian pieniksi suuren viskositeetin vuoksi. MRT-menetelmässä relaksointiparametrit valitaan luvuissa 4.1.2 ja 6.2 kerrotulla tavalla siten, että leikkausviskositeetti ν asetetaan halutuksi. Tilavuusviskositeettia ζ säätelevä relaksointiparametri s_e asetetaan viittauksen [17] mukaisesti samaksi kuin leikkausviskositeettia säätelevä s_ν .

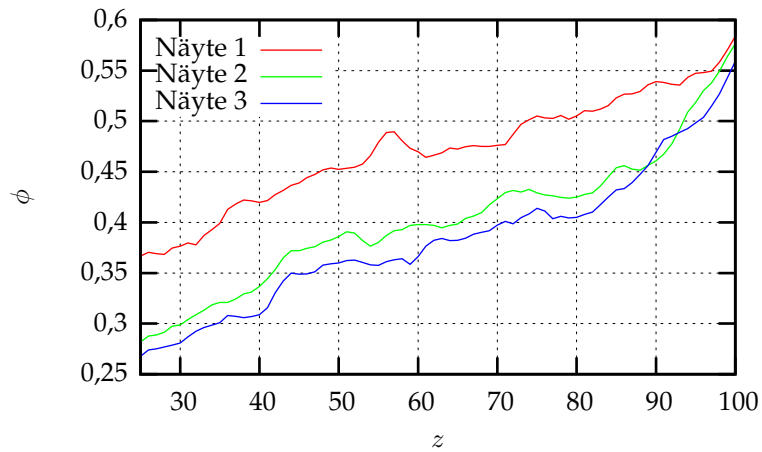
7.3 Paperin pinnoitemateriaalia mallintavan näytteen permeabiliteetti

Paperin pinnoitemateriaali on rakenteeltaan niin hienojakoista, ettei siitä saada hyviä kuvia röntgenmikrotomografialla. Tällaisessa tapauksessa voidaan käyttää materiaalia kuvaavaa mallia, joka voidaan muodostaa sopivalla tietokonealgoritmeilla. Tällainen malli on Helsingin yliopiston tutkijoiden kehittämä pakkausmenetelmä paperin pinnoitemateriaalille. Näytteissä on pakattu eri kokoisia ja muotoisia pigmenttejä siten, että ne muodostavat huokoisen materiaalin, jonka permeabiliteettia voidaan tutkia virtaussimulointien avulla. Mallin avulla kuvattujen HydroCarb90-pigmenttien kokojakauma ja keskimääräinen muoto määritettiin läpäisyelektronimikroskooppikuvauksen avulla. Virtaussimuloinnit suoritettiin hila-BGK-menetelmällä kolmelle erilaiselle HydroCarb90-näytteelle.

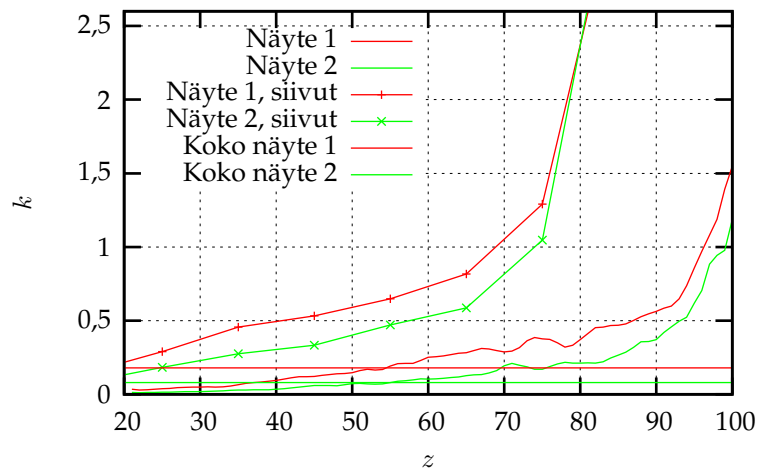
Taulukko 2: Pinnoitemateriaalimallin näytteiden ominaisuuksia: huokoisuus ϕ , hilayksiköissä lausuttu ominaispinta-ala S , tortuositeetti τ sekä koko näytteelle laskettu dimensioton permeabiliteetti k .

Näyte	ϕ	S	τ	k
1	0,53	0,29	1,28	0,18
2	0,48	0,28	1,32	0,08
3	0,46	0,27	1,33	0,07

Virtausta läpäisevän materiaalin permeabiliteetti riippuu erityisesti sen huokosrakenteesta. Pinnoitemallin rakenne on epähomogeeninen virtauksen suunnassa - yläpinnalla näyte on huomattavasti harvempaa kuin pohjalla, jonne on kasaantunut paljon pieniä hiukkasia. Tämä nähdään myös huokoisuusprofiilista, joka on esitetty kuvassa 19 seuraavalla sivulla. Myös kuvassa 17 (a) olevasta kolmiulotteisesta rakenteen visualisoinnista nähdään, että rakenteessa on pysty akselin suuntainen muutos - näytteen yläpinnalla pigmenttejä on harvemmassa ja niiden koko on suurempi kuin pohjalla.



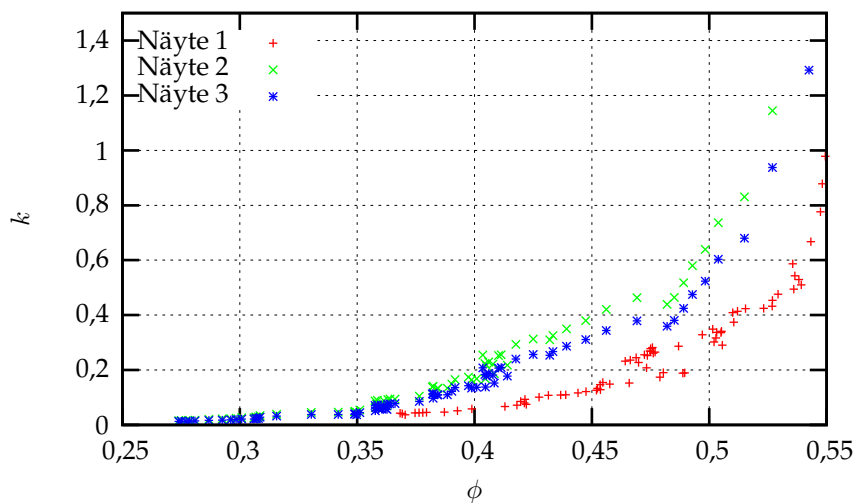
Kuva 19: HydroCarb90-näytteiden huokoisuudet z :n funktiona



Kuva 20: Kahden HydroCarb90-näytteen permeabiliteetti z :n funktiona. Vertailun vuoksi samassa kuvassa 10 hilayksikön paksuisten, vastaavilta kohdilta otettujen näytesiivujen permeabiliteetit.

Näytteen epähomogeenisuuden vuoksi on mielenkiintoista tutkia näytteen ominaisuuksia paikallisesti näytteen sisällä ja kuvata tuloksia virtauksen suunnaisen z -koordinaatin funktiona. Paikallisessa tarkastelussa käytetään luvussa 3 esiteltyä paikallisen permeabiliteetin lauseketta, jossa tarvittavat muuttujat voidaan lukea simulaattorin tuottamasta nesteen nopeus- ja tiheyskentästä.

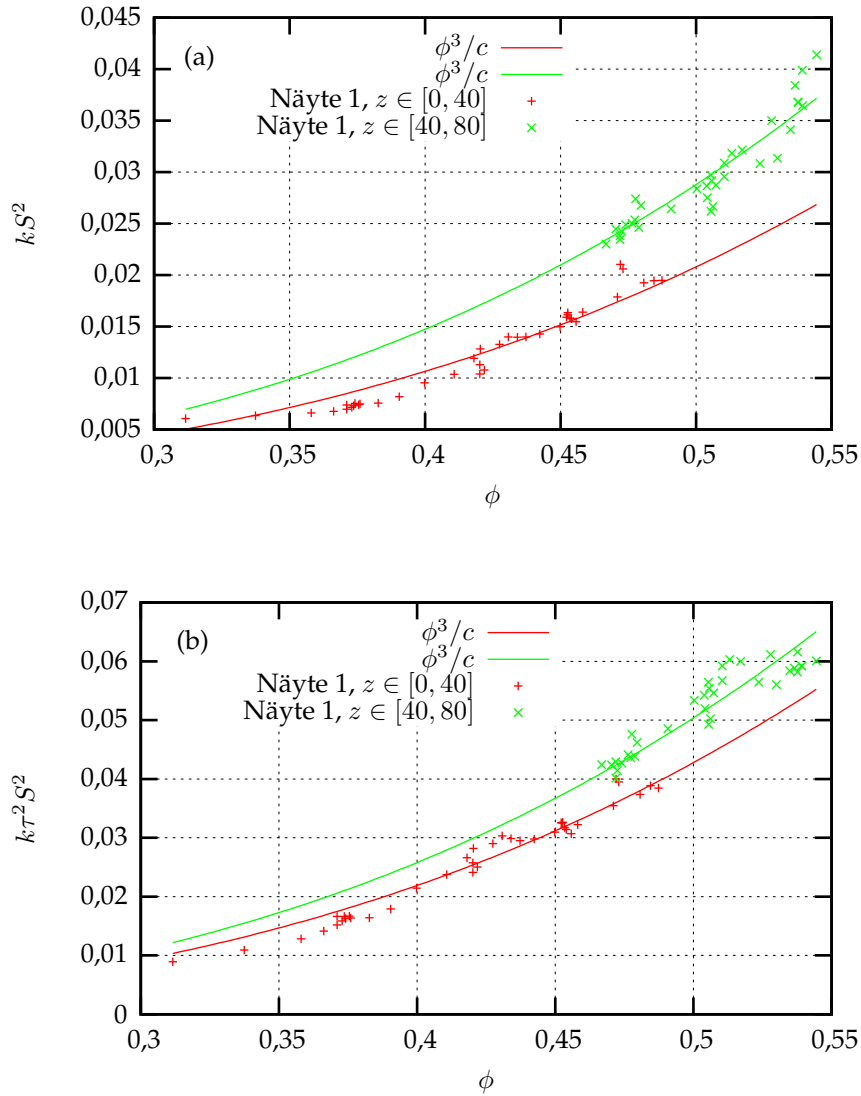
Pinnoitenäytteiden paikalliset permeabiliteetit on esitelty kuvassa 20. Koko näytteen permeabiliteetti on eräänlainen pieniä arvoja painottava keskiarvo-suure (ks. kaava (45) sivulla 17), joka voidaan havaita kuvasta. Paikallisen permeabiliteetin lausekkeella saatuja tuloksia verrattiin samasta näytteestä otettujen osanäytteiden permeabiliteettisimulointien tuloksiin. Vertailunäytteet saatiin leikkaamalla kokonainen näyte 10 hilayksikön paksuisiin osiin. Kuvassa 20 on näille osanäytteille suoritettujen permeabiliteettisimulointien tulokset, joista nähdään, että vertailunäytteiden permeabiliteetit käyttäytyivät samaan tapaan kuin kokonaisesta näytteestä paikallisesti lasketut permeabiliteetit. Osanäytteiden permeabiliteetit ovat huomattavasti paikallisen permeabiliteetin arvoja suuremmat, koska käsiteltävät näytteet olivat hyvin ohuita ja tämän vuoksi virtauksen reunaehdot poikkesivat huomattavasti kokonaisen näytteen vastaavista alueista.



Kuva 21: Pinnoitemallinäytteiden paikalliset permeabiliteetit huokoisuuden funktiona.

Kun tarkastellaan materiaalin ominaisuuksia (huokoisuutta, ominaispinta-alaa, tortuositeettia sekä permeabiliteettia) paikallisesti, saadaan suuri joukko mittauspisteitä, joiden avulla voidaan tarkastella permeabiliteettimallien toimivuutta. Kuvassa 21 edellisellä sivulla on kaikkien kolmen HydroCarb90-näytteen paikallisten permeabiliteettien arvoja paikallisen huokoisuuden funktiona. Kuvaa tarkastelemalla huomataan, että tarpeeksi suurella huokoisuusalueella permeabiliteetin käyttäytyminen on potenssikäyttäytymistä ($k \sim \phi^3$), kuten Kozenyn laki ennustaa.

Varsinaista Kozenyn lain käyttäytymistä on tarkasteltu kuvassa 22. Kohdassa (a) on sovitettu ensimmäiseen HydroCarb90-näytteeseen Kozenyn lain mukainen käyttäytyminen $k \sim \frac{\phi^3}{S^2}$ (ks. luku 2.3) ja kohdassa (b) tortuositeetin huomioon ottava Kozenyn laki $k \sim \frac{\phi^3}{\tau^3 S^2}$ käyttäen sovitusparametrina Kozenyn laissa olevaa *Kozenyn vakiota* c . Kuten kuvista nähdään, Kozenyn laki pätee paikallisesti tarkasteltuna kyseiselle näytteelle varsin hyvin. Selvästi nähdään, että tortuositeetin huomioonottaminen lisää sovituksen tarkkuutta.



Kuva 22: Kozenyn lain tekijän c määrittäminen. Kuvassa (a), jossa tarkastellaan Kozenyn lakia $kS^2 = \frac{\phi^3}{c}$, pistejoukko hajaantuu kahteen osaan - näytteen alaosan ($z \in [0, 40]$) ja näytteen yläosan ($z \in [40, 80]$) pistejoukkoon. Kuvassa (b) Kozenyn laissa on mukana tortuositeetti τ , $k\tau^2S^2 = \frac{\phi^3}{c}$, jolloin sovitussuorien ero pienenee selvästi. Sovituskäyrät Kozenyn laille: kuvassa (a) $c = 6,01 \pm 0,09$, kun $z \in [0, 40]$ ja $c = 4,34 \pm 0,04$, kun $z \in [40, 80]$ ja kuvassa (b) $c = 2,92 \pm 0,03$, kun $z \in [0, 40]$ ja $c = 2,48 \pm 0,02$, kun $z \in [40, 80]$.

7.4 Virtaussimuloinnit pigmenttinäytteiden röntgenmikrotomografiakuville

Paperin pinnoitemateriaalin näytteiden tutkimisen perusongelma on se, että tutkittava materiaalin rakenne on liian pientä, jotta siitä voi saada virtaussimulointeihin soveltuvia röntgenmikrotomografiakuvia. Tämän vuoksi käytimme tutkimuksessa HydroCarb90-pinnoitemallia. Paperin pinnoitemateriaalista voidaan kuitenkin puristamalla valmistaa myös röntgenmikrotomografissa käytettäviä näytteitä. Tällaisia näytteitä ovat Durcal- ja OmyaCarb-näytteet. Simulointituloksien avulla tutkittiin erityisesti Kozenyn lain pätevyyttä tutkimalla näytteiden ominaisuuksia paikallisesti, kuten aiemmissakin luvuissa.

Taulukko 3: Durcal- ja OmyaCarb-näytteiden keskiarvoinen huokoisuus ϕ , ominaispinta-ala S , tortuositeetti τ ja simuloitu permeabiliteetti k . Ilmoitetut virheet ovat keskihajontoja.

Näyte	ϕ	$S [10^{-7} \text{ m}]$	τ	$k [10^{-12} \text{ m}^2]$
Durcal 65 μm	$0,35 \pm 0,03$	$3,6 \pm 0,2$	$1,40 \pm 0,03$	$1,5 \pm 0,2$
Omya 130 μm	$0,46 \pm 0,02$	$2,6 \pm 0,2$	$1,31 \pm 0,02$	10 ± 2

Tutkimusta suoritettaessa käytettävissä oli 4 gigatavun muistilla varustettu laskentakone. Durcal- ja OmyaCarb-näytteiden mikrotomografiakuvat olivat käytettävissä olevalle tietokoneelle liian suuria, joten ne pilkottiin ensin sopivan kokoisiksi palasiksi. Palasten huokoisuutta ja ominaispinta-alaa tarkasteltiin ja tarkastelun tuloksena valittiin simuloitavaksi

1. sellaisia palasia, jotka edustivat huokoisuuden ja/tai ominaispinta-alan ääriarvoja, ja poikkesivat toisistaan paljon, sekä
2. sellaisia paloja, joissa sekä ominaispinta-alat että huokoisuudet olivat likimain samoja.

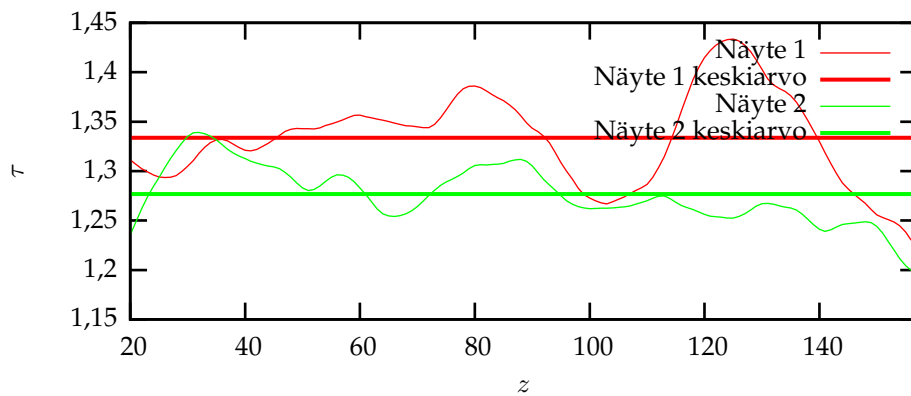
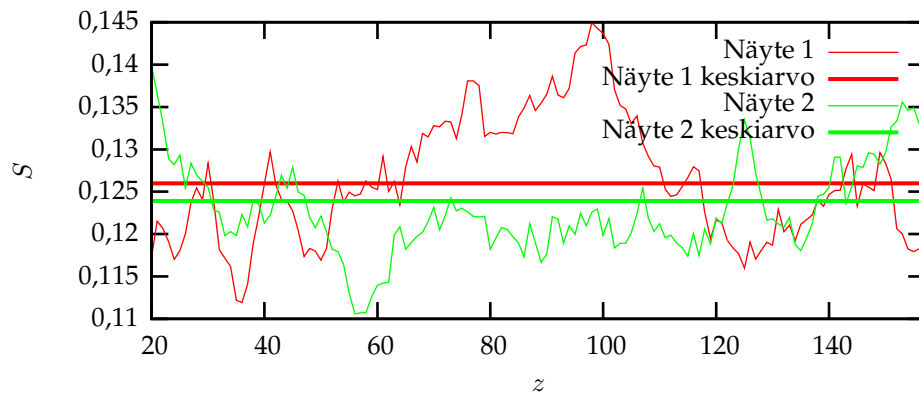
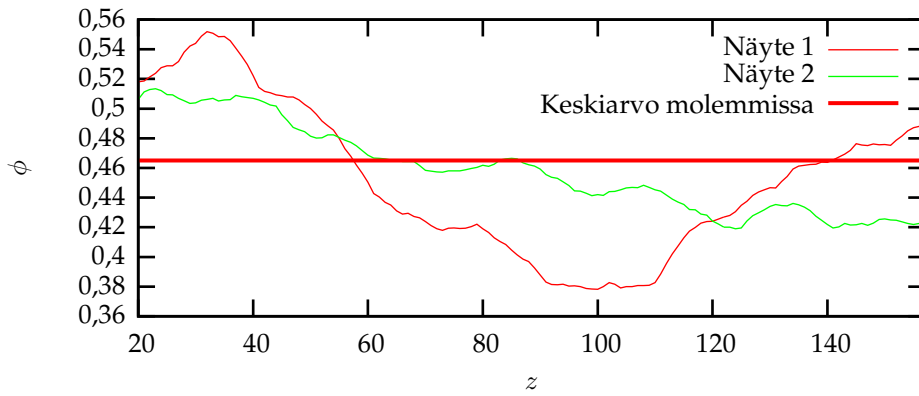
Ensimmäisessä vaiheessa tutkittiin Kozenyn lain antamien permeabiliteettien arvojen korrelaatiota suhteessa simuloituihin permeabiliteetteihin. Tutkituille näytteille määritettiin huokoisuus, ominaispinta-ala, tortuositeetti tavanomaisesti koko näytteen keskiarvona sekä Kozenyn vakio c sovittamalla samaan tapaan kuin edellisen luvun kuvassa 22. Näin saaduista arvoista määritettiin Kozenyn lain antama permeabiliteetti, jota verrattiin kullekin näytteelle suoritettujen hila-Boltzmann-simulaatioiden antamiin permeabiliteetin tuloksiin. Tulokset on esitetty taulukossa 4, josta nähdään, että Kozenyn laki antaa hyvän ennusteen näytteen permeabiliteetille.

Taulukko 4: Taulukossa on tutkittujen näytepalojen huokoisuus ϕ , dimensioiton ominaispinta-ala S , tortuositeetti $\tau = \langle |v| \rangle / \langle v_z \rangle$, Kozenyn lain vapaa parametri c , dimensioiton permeabiliteetti k sekä Kozenyn lain antama permeabiliteetti. Kozenyn parametri c määritettiin samaan tapaan kuin kuvassa 22 sovittamalla Kozenyn laki kunkin näytteen paikallisten parametrien pistejoukkoon $(\phi, k\tau^2 S^2)$. Keskiarvoinen Kozenyn parametri c Durcal-näytteelle on $c = 2,3 \pm 0,2$ ja OmyaCarb-näytteelle $c = 1,5 \pm 0,2$. Taulukossa on merkitty jatkossa käsitellyt näytteet tähdellä (*).

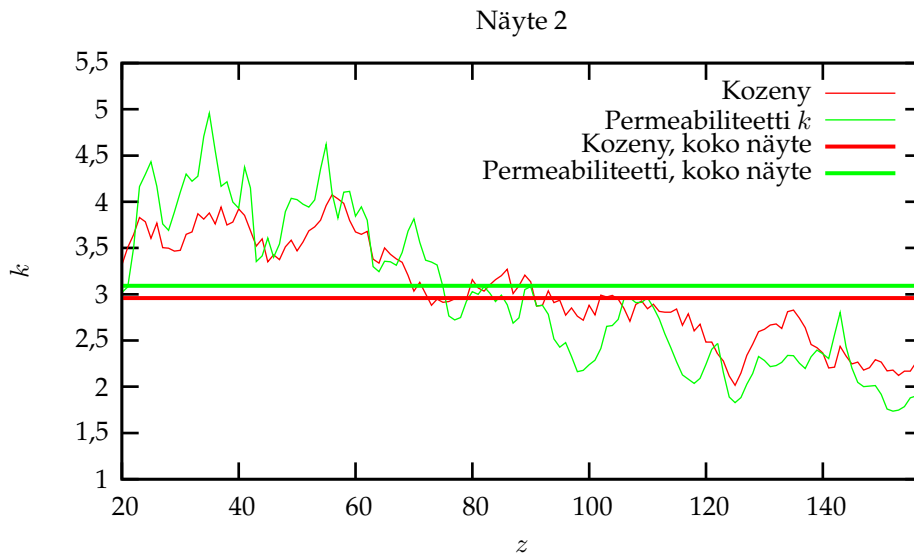
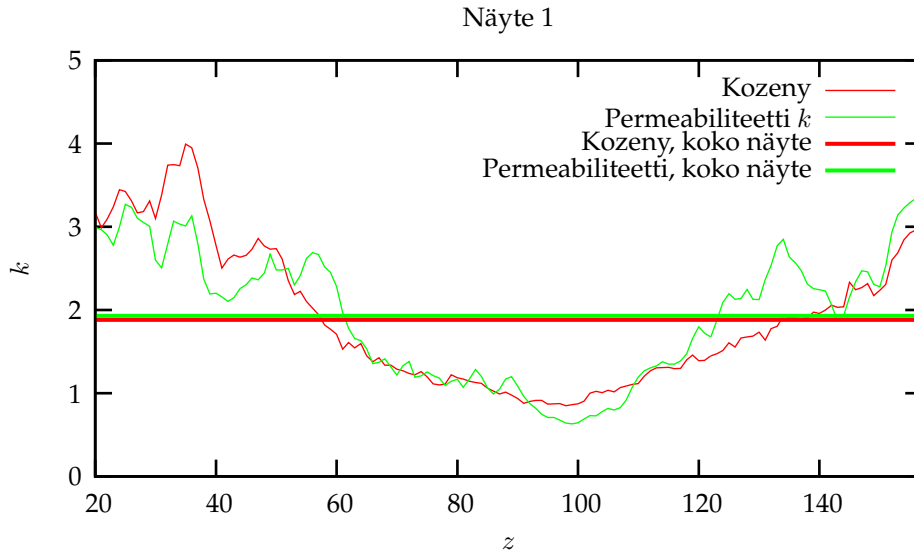
Näyte	ϕ	S	τ	c	k	$\frac{\phi^3}{c\tau^2 S^2}$
Durcal 1*	0,33	0,16	1,41	2,17	0,35	0,32
2*	0,34	0,16	1,48	2,53	0,27	0,26
3	0,36	0,17	1,41	2,16	0,42	0,38
4	0,32	0,16	1,44	2,22	0,32	0,28
5	0,34	0,18	1,42	2,44	0,27	0,25
6	0,34	0,19	1,39	2,12	0,29	0,27
7	0,34	0,16	1,48	2,51	0,27	0,26
8	0,36	0,18	1,42	2,16	0,38	0,34
Omya 1*	0,46	0,13	1,32	1,85	1,93	1,88
2*	0,46	0,12	1,27	1,31	3,10	2,95
3	0,46	0,11	1,31	1,45	3,35	3,27
4	0,44	0,13	1,31	1,55	2,25	1,88
5	0,48	0,12	1,31	1,39	2,98	2,97

Toisessa vaiheessa valittiin sellaisia näytepareja, joissa sekä ominaispinta-alat että huokoisuudet olivat lähes samat. Kozenyn lain mukaan permeabiliteetti riippuu näistä kahdesta parametrasta, joten myös näytteiden permeabiliteettien kuului olla tällöin lähes samat. Useimmille valituille pareille Kozenyn lain ennuste pitikin paikkansa ja permeabiliteetit täsmäsivät, mutta joukosta löytyi myös huomattavia poikkeuksia. Näiden näytteiden ominaisuuksia tutkittiin ja pyrittiin ymmärtämään, mistä erot johtuivat.

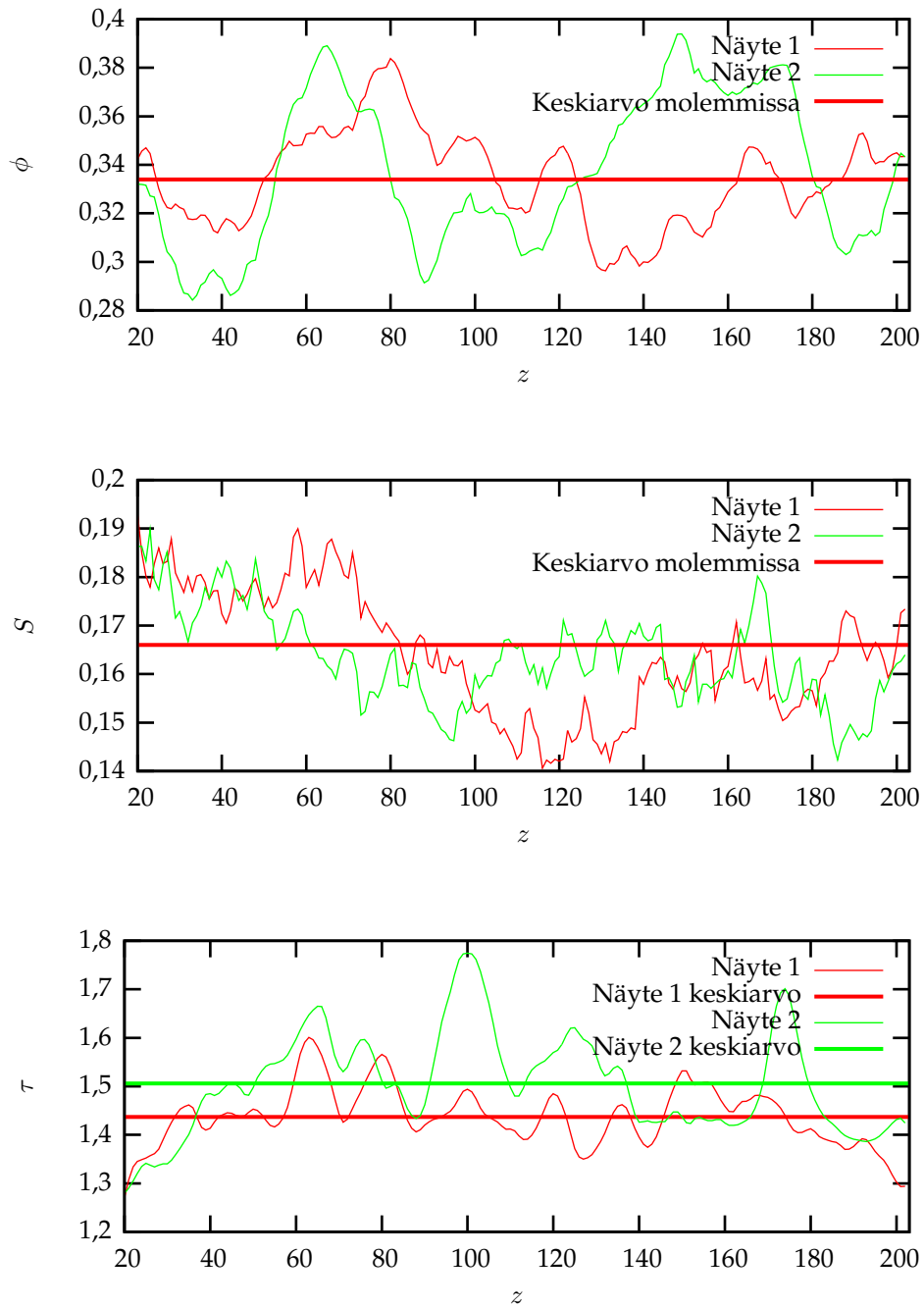
Kuvissa 23-26 on esitetty valittujen näytteiden paikalliset huokoisuus-, ominaispinta-ala-, tortuositeetti- ja permeabiliteettikäyttäytymiset. Permeabiliteettikäyrät on määritetty sekä todellisina paikallisina permeabiliteetteina että Kozenyn lain avulla käyttäen kunkin näytteen paikallisia arvoja. Kuvia tarkasteltaessa huomataan, että Kozenyn lain antamat permeabiliteetin arvot seuraavat yllättävän hyvällä tarkkuudella simuloituja permeabiliteettejä. Koko näytteen permeabiliteetti on yleensä samaa luokkaa paikallisen permeabiliteetin keskiarvon kanssa.



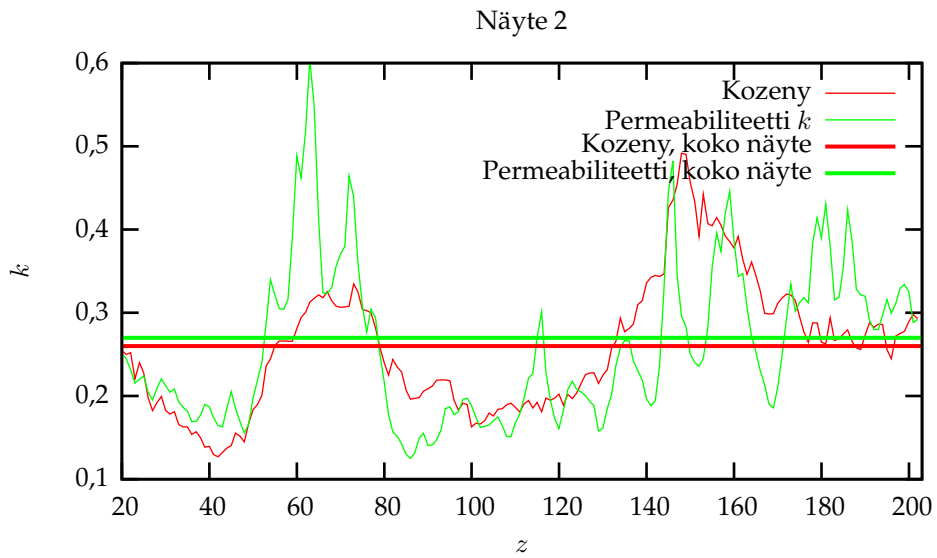
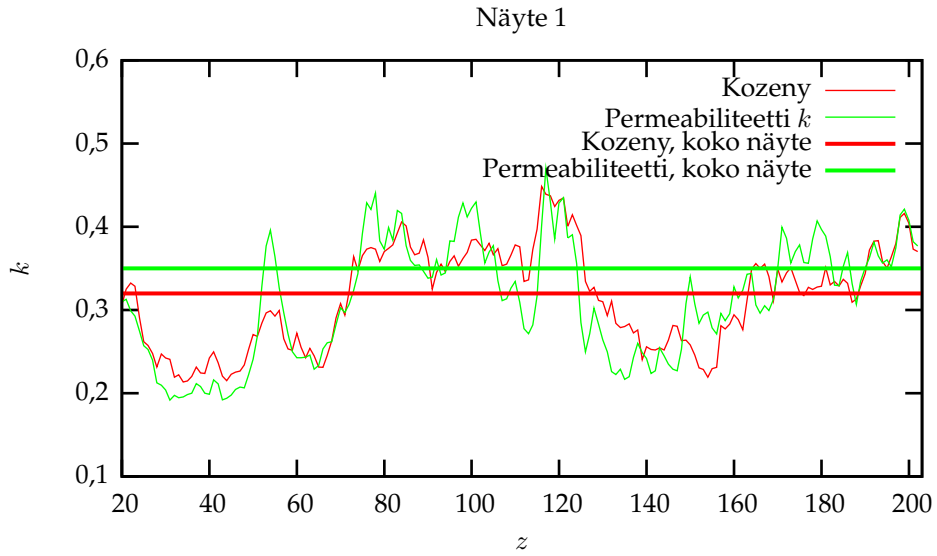
Kuva 23: Paikallinen huokoisuus, ominaispinta-ala ja tortuositeetti kahdelle OmyaCarb-näytteelle.



Kuva 24: OmyaCarb-näytteiden permeabiliteetti sekä Kozenyn lain käyttäytyminen $k = \frac{\phi^3}{c\tau^2S^2}$ käyttäen paikallisia arvoja (ϕ, τ, S) .



Kuva 25: Paikallinen huokoisuus, ominaispinta-ala ja tortuositeetti kahdelle Durcal-näytteelle.



Kuva 26: Durcal-näytteiden permeabiliteetti sekä Kozenyn lain käyttäytymisen $k = \frac{\phi^3}{c\tau^2 S^2}$ käyttäen paikallisia arvoja (ϕ , τ , S).

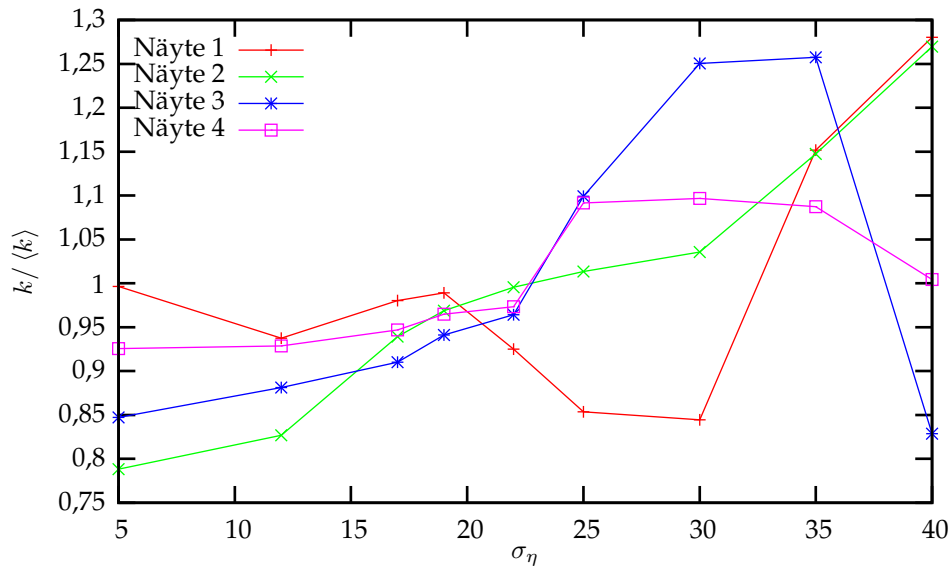
7.5 Paperinäytteen permeabiliteettisimuloinnit

Paperinäytteiden permeabiliteetin tutkiminen on erityisen mielenkiintoista hila-Boltzmann-simulointien kannalta sen vuoksi, että tutkittaville näytteille on tehty paljon kokeellisia mittauksia. Kokeet on suoritettu fysiikan laitoksella rakennetulla laitteella, jossa paperinäytteen läpi ohjataan vesi- tai ilmavirtaus. Vedellä toteutettavassa mittauksessa vesi tunkeutuu paperin kuituihin ja saa ne turpoamaan, joka vaikuttaa virtausominaisuuksiin. Tämän vuoksi hila-Boltzmann-simuloinneilla saatuja tuloksia on järkevää verrata lähinnä ilmavirtauksella toteutettuihin permeabiliteettimittauksiin. Mittauslaitteiston avulla voidaan määrittää kutakin paine-eroa vastaava tilavuusvirta, josta Darcyn lain avulla voidaan laskea permeabiliteetti.

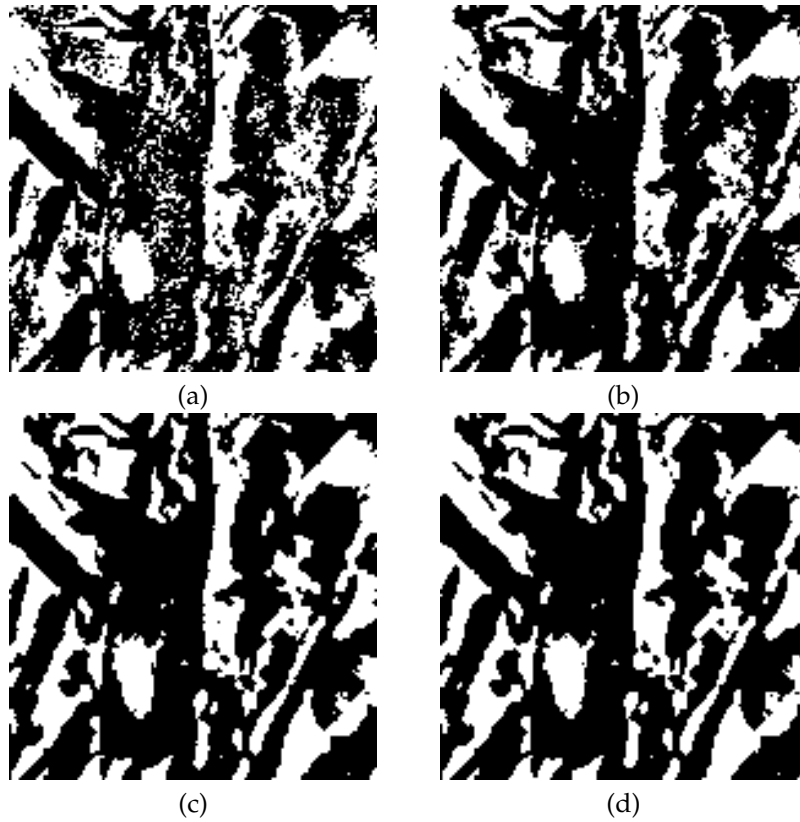
Paperinäytteiden röntgenmikrotomografiakuvat ovat otettu Grenoblessa Euroopan synkrotronisäteilylaboratoriossa. Siellä oleva röntgenmikrotomografialaitte saa tarvittavan röntgensäteilyn hiukkaskiihdyttimeltä. Kiihdyttimeltä tuleva röntgensäteily on yhdensuuntaista ja monokromaattista, jonka vuoksi laite on Jyväskylän fysiikan laitoksen vastaavaa laitetta tarkempi. Tuloksena saatavien tomografiakuvien vokselin koko on $(0,7 \mu\text{m})^3$.

7.5.1 Kynnystämisen vaikutus paperinäytteen permeabiliteettiin

Luvussa 4.3.1 esiteltiin käytetty kohinanpoistomenetelmä ja kynnystysmenetelmä. Kohinanpoistossa käytettävä varianssiparametri vaikuttaa kynnystetyn kuvan laatuun. Kuvassa esiintyvä kohina lisää mm. näytteen ominaispinta-alaa, joka vaikuttaa suoraan näytteen permeabiliteettiin. Kohinan varianssi on kuvalle suoritettavassa esikäsittelyssä ainoa vapaasti valittava parametri. Kohinan täsmällistä vaikutusta permeabiliteettiin ei tunnettu, joten sen vaikutuksen arvioimista varten suoritettiin sarja simulointeja neljälle paperinäytteelle yhdeksällä erisuuruusella varianssiparametrilla. Simulointisarjan tulokset on esitetty kuvassa 27. Simulointituloksista havaitaan, että kohinan varianssiparametri vaikuttaa kohtuullisen vähän näytteiden permeabiliteetteihin, suhteessa muihin menetelmään liittyviin virhetekijöihin.



Kuva 27: Permeabiliteetin riippuvuus kohinan varianssiparametrin σ_η paperinäytteille. Permeabiliteetit on normitettu jakamalla ne kunkin näytesarjan permeabiliteettien keskiarvolla $\langle k \rangle$. Silmämääräisesti paras arvo varianssille oli noin $\sigma_\eta = 17$, ks. kuva 28 (b).



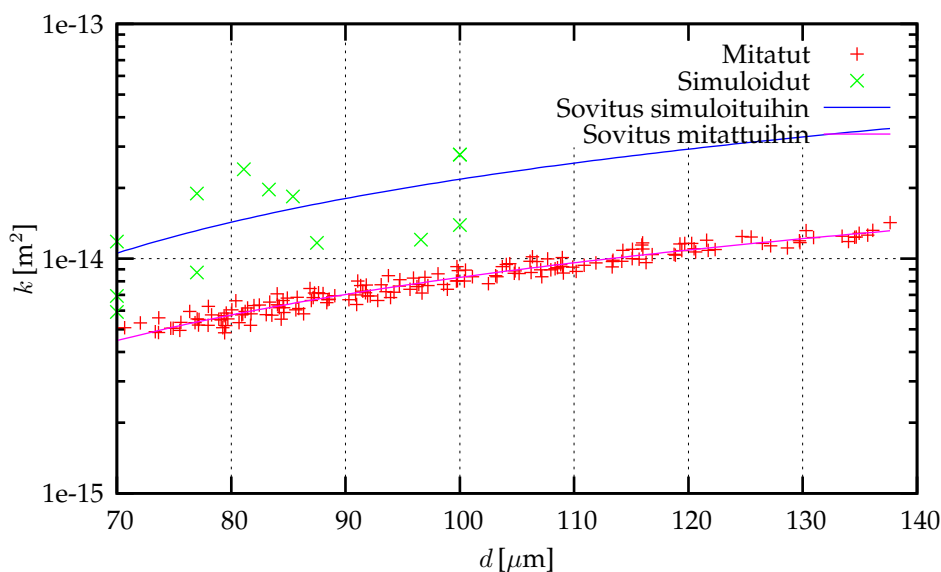
Kuva 28: Kohinanpoistosuodatuksessa käytettävän kohinan varianssiparametrin σ_η vaikutus lopulliseen kynnystettyyn kuvaan: kohdassa (a) $\sigma_\eta = 5$, (b) $\sigma_\eta = 17$, (c) $\sigma_\eta = 35$ ja (d) $\sigma_\eta = 40$. Kuvien näyte on kuvan 27 näyte 3.

7.5.2 Kesän 2005 näytesarja

Kesällä 2005 suoritetuissa virtauslaskuissa käytössä oli 4 GB:n muistilla varustettu laskentakone, jonka vuoksi laskenta suoritettiin melko pienille näytteille. Tutkittava näytesarja koostui eri paksuisiksi puristetuista näytteistä. Permeabiliteettia tutkittiin näytteen paksuuden funktiona ja tuloksia verrattiin mitattuihin tuloksiin.

Suuresta paperinäytteestä valittiin paloja simulointia varten. Näytteiden koko oli $300 \times 300 \times z$, missä z oli kunkin näytteen paksuus, $z \in [50, 110]$. Virtaussimuloinnilla lasketut permeabiliteetit ovat siis pienten näytepalojen permeabiliteetteja - tästä syystä tulosten hajonta on kokeellisia tuloksia suurempi. Tulokset on esitetty kuvassa 29. Simuloinnin tuloksissa on noin tekijän kaksi ero mitattuihin verrattuna, mitä voi pitää hyvänä tuloksena permeabiliteetille tehtävässä tutkimuksessa. Tasoero tulosten välillä johtuu erityisesti siitä, että käytetyssä hila-BGK-menetelmässä faasiin reunan paikka ei ole täsmälleen hi-

lapisteiden puolivälissä kuten voisi olettaa, vaan riippuu viskositeetista, jota säädellään relaksaatioparametrilla ξ . Lisäksi virtausnopeudet olivat käytettävän menetelmän vuoksi samaa luokkaa kuin tilavuusvoiman vaikuttama nopeuden lisäys, joka lisää simuloinnin epäluotettavuutta. Kuitenkin erityisesti käyttäytyminen näytteen paksuuden d funktiona on täysin samanlaista, jonka näkee hyvin siitä, että sovitetut suorat ovat lähes saman suuntaiset.

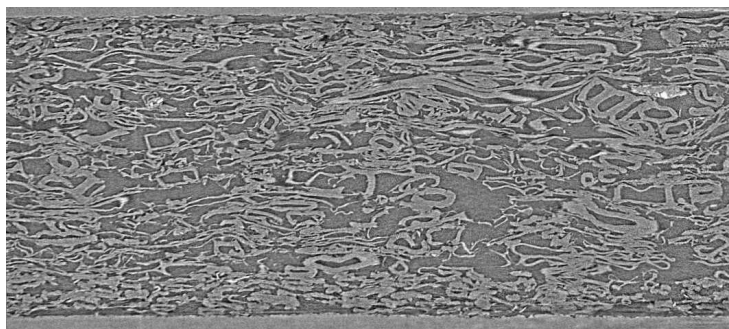


Kuva 29: Puristettujen paperinäytteiden permeabiliteetti paksuuden funktiona logaritmisella asteikolla. Samassa kuvassa on piirretty kokeellisesti mitattu pistejoukko, hila-Boltzmann-simulointien tulokset sekä suoran $k(d) = a \cdot d + b$ sovitukset molempiin pistejoukkoihin.

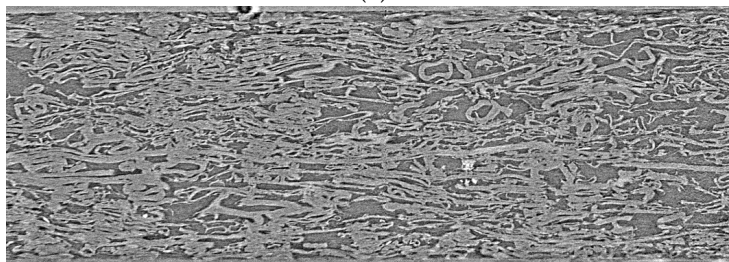
Puristamisen vaikutuksesta näytteen huokoisuus pienenee. Sitä kautta myös permeabiliteetti pienenee, joka näkyy simulointituloksissa. Permeabiliteetin pieneminen johtuu siitä, että virtauskanavien koon pienetessä virtausvastus kasvaa. Liian pienet virtauskanavat kuitenkin aiheuttavat simulaatioon luvussa 6.2 todettua permeabiliteetin viskositeettiriippuvuutta, jonka vuoksi tulosten luotettavuus kärsii vähemmän huokoisilla näytteillä. Lisäksi käytettävän BGK-relaksointimenetelmän vuoksi viskositeetti oli niin suuri, että virtausnopeudet olivat suuruudeltaan tilavuusvoiman luokkaa, joka lisää tulosten epäluotettavuutta.

7.5.3 Kevään 2006 näytesarja

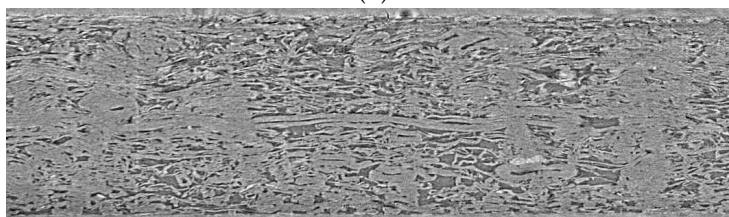
Keväällä 2006 mitatussa näytesarjassa käytössä oli suurempi laskentaklusteri jossa käytettävissä oli yhteensä 80 GB muistia. Tämän vuoksi laskettavan näytteen koko oli huomattavasti aikaisempaa näytesarjaa suurempi. Lisäksi otettiin käyttöön MRT-relaksointimenetelmä, jonka viskositeettiparametria pienentämällä saatiin virtausnopeus riittävän suureksi. Näiden tekijöiden odotettiin parantavan tuloksena saatavien permeabiliteettien luotettavuutta huomattavasti.



(a)



(b)



(c)

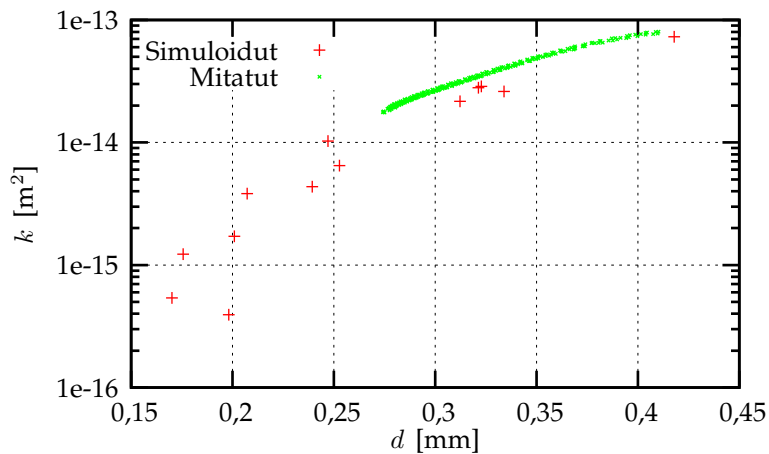
Kuva 30: Kynnystämättömät leikekuvat taulukon 5 näytteille 3a, 3b, ja 3c. Puristamisen vaikutuksesta huokoiset pienenevät ja kuitujen pinnat liittyvät toisiinsa.

Näytesarja koostui taulukossa 5 esitellyistä näytteistä. Yhdestä puristus-sarjasta on esitetty leikekuvat kuvassa 30. Näytteiden kooksi valittiin $940 \times 940 \times z$, missä z oli koko näytteen paksuus, joka vaihteli käytettävän puristuksen mukaan välillä $[200, 500]$ pikseliä. Jotta virtausnopeus saatiin riittävän

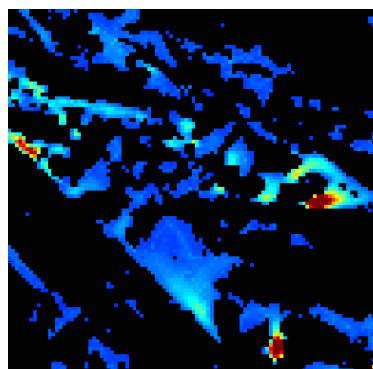
suureksi, asetettiin simulaatiossa käytettäväksi viskositeetiksi hyvin pieni arvo, $\nu = 0,025$. Hyvin pienestä viskositeetista huolimatta eniten puristetulla näytteellä virtausnopeus oli vain kaksinkertainen tilavuusvoiman suuruuteen verrattuna. Huokoisemmilla, vähemmän puristetuilla näytteillä virtausnopeudet olivat riittävän suuria.

Taulukko 5: Grenoblessa kuvatut paperinäytteet. Jokaisesta näytteestä on kolme tomografiakuvaa erisuuruisilla puristumilla. Kunkin näytteen ominaispinta-ala on ilmoitettu hila-yksiköissä $[S] = \frac{[A]}{[V]} = \frac{1}{D}$, missä $D = 0,7 \mu\text{m}$. Näyte 5 on kokonaan puristamaton paperinäyte.

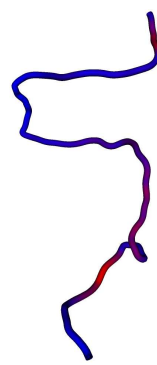
Näyte	d [mm]	ϕ	S	τ	k [10^{-15} m^2]
1a	0,31	0,54	0,387	2,700	21,66
1b	0,25	0,42	0,444	2,974	6,48
1c	0,20	0,28	0,424	3,343	1,69
2a	0,32	0,57	0,392	2,592	27,99
2b	0,24	0,38	0,470	2,996	4,38
2c	0,20	0,18	0,310	4,434	0,40
3a	0,32	0,57	0,407	2,550	28,76
3b	0,21	0,33	0,465	2,787	3,84
3c	0,17	0,18	0,324	3,638	0,56
4a	0,33	0,58	0,386	2,663	26,11
4b	0,25	0,47	0,469	2,750	10,30
4c	0,18	0,25	0,408	3,183	1,24
5	0,37	0,69	0,326	2,488	72,84



Kuva 31: Kevään 2006 puristettujen paperinäytteiden permeabiliteetti paksuuden funktiona. Samaan kuvaan on piirretty kokeellisesti mitattu pistejoukko ja hila-Boltzmann-simulointien tulokset logaritmisella asteikolla.



(a)

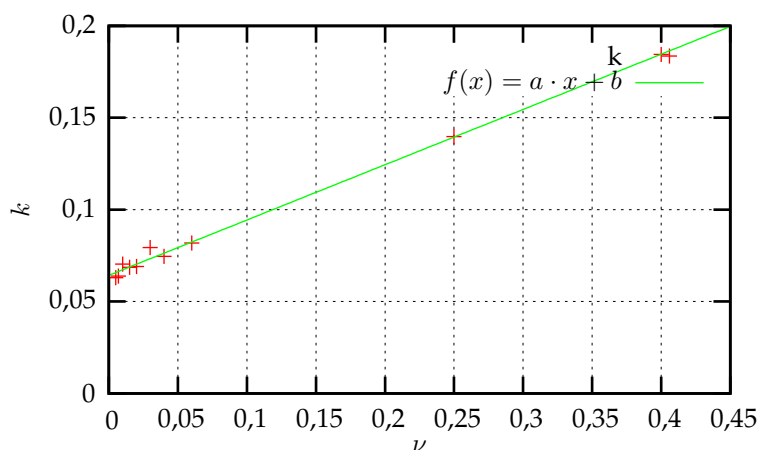


(b)

Kuva 32: Puristettujen paperinäytteiden läpi kulkeva virtaus kulkee tyypillisesti pääasiassa vain muutamien kanavien kautta. Kuvassa (a) on 100x100 hi-layksikön kokoinen leikekuva taulukon 5 näytteestä 3c. Kuvassa on kiintoaine merkitty mustalla, hitaan virtauksen alueet sinisellä ja nopean virtauksen alueet punaisella. Kuvassa (b) on piirretty yksittäinen virtaviiva samassa rakenteessa erään merkittävän virtauskanavan läpi.

Kuvassa 31 on esitelty saadut tulokset. Havaitaan, että mittaustulokset ovat melko tarkasti samat kuin simulointitulokset, toisin kuin aikaisemmin saadut, kuvassa 29 esitetyt tulokset. Parempi tulos johtuu erityisesti siitä, että merkittävästi suuremman käytettävissä olevan muistikapasiteetin vuoksi pystyttiin simuloimaan virtausta riittävän suurien näytteiden läpi. Myös tomografiakuvien laatu oli aikaisempaa parempi ja mittaustulokset olivat luotettavampia entistä paremman mittauslaitteiston vuoksi.

Kuten taulukosta 5 nähdään, ovat paperinäytteiden tortuositeettien arvot huomattavan suuria. Kuvassa 32 on visualisoitu paperinäytteen 3c virtauskenttä sekä tyypillistä virtaviivaa erään tärkeän virtauskanavan läpi. Paperinäytteiden läpi ajattavalle nestevirtaukselle on tyypillistä se, että suurin osa nestevuosta menee yksittäisiä virtauskanavia pitkin. Tämä nähdään myös kuvan 32a virtauskentän visualisoinnista, jossa näkyy 2-3 merkittävää virtauskanavaa.



Kuva 33: Kuvassa on paperinäytteestä 3a otetulle osanäytteelle tehty MRT-menetelmän permeabiliteetin viskositeettiriippuvuustarkastelu.

Mikäli tarkasteltava näyte on diskretoitu riittävän tiheällä hilalla, ei MRT-menetelmää käytettäessä permeabiliteetilla esiinny viskositeettiriippuvuutta juuri lainkaan. Kuvassa 33 on piirretty paperinäytteen 3a permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus, joka onkin kohtuullisen pieni tarkasteltavalla viskositeettialueella. Luvun 6.2 tarkastelun perusteella voidaan päätellä, että pienellä viskositeetilla tulos on lähellä oikeaa. Koska paperinäytteillä havaitaan kuitenkin olevan edelleen permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus, on selvää, että tarvetta tiheämmälle diskretoinnille olisi. Diskretoinnin tihentäminen kuitenkin osoittautuu ongelmaksi nykyisissä laskentakoneissa käytettävissä olevan muistikapasiteetin vuoksi.

Kun puristamattoman näytteen huokoisuus ϕ tunnetaan, voidaan puristetun näytteen huokoisuudelle ϕ' esittää arvio puristuman funktiona seuraavasti:

$$\phi' = \frac{V_p - \delta d \cdot A}{V - \delta d \cdot A} = \frac{\phi V - \delta d \cdot A}{V - \delta d \cdot A}, \quad (62)$$

missä δd on näytteen puristuma, V sen lähtötilavuus ja A sen poikkipinta-ala. Taulukon 5 näytteen 3 puristetuille versioille 3b ja 3c saadaan näin seuraavat huokoisuudet: $\phi_{3b} = 0,30$ ja $\phi_{3c} = 0,16$, jotka ovat lähes samat kuin tuloksissa taulukossa 5 ilmoitetut. Samanlainen tarkastelu voidaan tehdä myös ominaispinta-alalle, mutta tulokset eivät siinä tapauksessa vastaa toisiaan sen vuoksi, että näytettä puristettaessa osa pinnoista liimautuu yhteen. Tämän vuoksi näytettä puristettaessa ominaispinta-ala aluksi kasvaa, mutta kun näytettä puristetaan lisää, se alkaa jossain vaiheessa pienetä. Puristettaessa syntyvän uuden kuitujen välisen kontaktipinta-alan määrää voidaan arvioida siten, että

$$\begin{aligned} S' &= \frac{A_s - \Delta A_s}{V - \delta d \cdot A} = \frac{SV - \Delta A_s}{V - \delta d \cdot A} \Rightarrow \\ \Delta A_s &= SV - S'(V - \delta d \cdot A), \end{aligned} \quad (63)$$

missä ΔA_s on kontaktipinta-alan muutos, S ominaispinta-ala ennen puristusta ja S' ominaispinta-ala puristuksen jälkeen. Kyseisille näytteille pinta-alaksi saadaan $\Delta A_s^{(3b)} = 4,7 \cdot 10^7$ ja $\Delta A_s^{(3c)} = 6,9 \cdot 10^7$ hilayksikköä. Paperinäytteesä olevat kuidut ovat noin $D_k = 35$ hilayksikön paksuisia ja kahden kuidun keskimääräistä kontaktipinta-alaa voidaan arvioida lausekkeella $A_k \approx (2D_k)^2$. Puristuksessa syntyneiden kuitukontaktien määrä ΔN_k voidaan siten arvioida lausekkeella

$$N_k \approx \frac{\Delta A_s}{4D_k^2}. \quad (64)$$

Näin saadaan arvio syntyvien kuitukontaktien lukumäärälle kummassakin puristusvaiheessa: $N_k^{(3b)} \approx 9500$ kpl ja $N_k^{(3c)} \approx 14000$ kpl. Tarkastelu on karkea arvio todellisuudesta. Tarkemmassa tarkastelussa pitäisi ottaa huomioon mm. onttojen kuitujen luhistuminen, joka myös pienentää näytteen ominaispinta-alaa. Tämän tekijän arvioiminen on kuitenkin vaativa tehtävä, eikä sitä tehdä tässä yhteydessä.

8 Johtopäätökset

8.1 Virheen arviointi

Hila-Boltzmann-simulointimenetelmä on tehokas väline laminaarisen virtauksen tutkimuksessa. Helpon rinnakkaistettavuutensa ansiosta menetelmällä voidaan tehokkaasti tutkia hyvin suuria näytteitä. Muilla menetelmillä nimenomaan rinnakkaistaminen on suurin ongelma, jonka vuoksi käytännön tutkimusongelmien suurien näytteiden simulointi ei onnistu yhden prosessorin lasentakoneissa käytettävissä olevan muistikapasiteetin rajallisuuden vuoksi.

Hila-Boltzmann-simulaatiossa on useita virhelähteitä, joiden vaikutus on pyrittävä simuloinneissa eliminoimaan. Simuloitavan näytteen pitäisi olla mahdollisimman edustava otos tutkittavasta materiaalista. Erityisesti jos näyte on epähomogeeninen, on vaikeampaa valita riittävän edustava näyte. Näytteistä on pyrittävä ottamaan niin iso pala simulointiin, että se edustaa materiaalia keskimääräisesti. Esimerkiksi paperinäytteissä riittävän suuren näytteen valinta on tärkeää sen takia, että näytteen rakenteen vuoksi materiaalissa on huomattavan pitkiä vaakasuoria virtauskanavia, jotka näytteen pienentäminen tukkisi. Riittävän näytteen koon voi määrittää tutkimalla permeabiliteetin muuttumista näytteen kokoa kasvatettaessa usealla eri kokoisella näytteellä.

Myös kuvantamismenetelmiin liittyy tietty epätarkkuus. Kuvauslaitteiden resoluutio ei ole riittävä kaikkien tutkimuksen kannalta mielenkiintoisten näytteiden virtaussimulointien toteuttamiseen. Mikäli näytteestä ei saada kuvattua riittävän tarkasti yksityiskohtia, ei virtaussimulointikaan välttämättä vastaa todellisuutta. Lisäksi tulokset riippuvat paljon käytettävien kuvankäsittely- ja kynnystysalgoritmien tarkkuudesta.

Permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus aiheuttaa lisää ongelmia simulointitulosten tarkastelussa. Myös MRT-menetelmää käytettäessä permeabiliteetti riippuu jonkin verran käytössä olevasta viskositeetista. Viskositeettiriippuvuus voidaan eliminoida, mikäli käsiteltävän näytteen diskretointia tiheentään siten, että merkittävien virtauskanavien halkaisijat ovat vähintään 20 hila-laysikön kokoisia. Tämä on kuitenkin usein mahdotonta nykyisten laitteiden muistirajoitteiden vuoksi.

Simuloinnin tuottamia permeabiliteetin arvoja voidaan verrata kokeellisesti saatuihin tuloksiin. Tällöin useammalla eri menetelmällä saadut arvot voivat tukea toisiaan. Todellisen permeabiliteetin määrittämisessä kokeellisiin tuloksiin vertaaminen ei välttämättä kuitenkaan aina tuo lisätarkkuutta, koska myös mittaukseen liittyy epävarmuustekijöitä.

Myös muita virhetekijöitä voi olla. Suoritetuissa simulaatiossa ei esimerkiksi otettu huomioon näytteen kemiallisia ominaisuuksia, joilla voi joissain ta-

pauksissa olla suuri vaikutus nesteenläpäisevyyteen. Myös materiaalissa nesteen vaikutuksesta tapahtuvat muodonmuutokset vaikuttavat virtaukseen.

8.2 Kolmiointimenetelmä faasirajapinnalle

Tutkielmaan liittyen kehitettiin tehokas menetelmä tarkemman faasirajapinnan määrittämiseksi pintamonikulmiointien avulla. Monikulmiointiin käytettiin Marching Cubes -algoritmia ja toteutettiin ohjelmisto, joka laskee rajapinnan reunaehdossa tarvittavat q -arvot sekä faasi-informaation. Kolmiointiin liittyvää simulaattorin ohjelmointiosuutta ei tämän tutkielman aikarajojen puitteissa voitu toteuttaa, jonka vuoksi menetelmän toimivuuden ja tehokkuuden tarkastelu jätettiin alkuperäisistä suunnitelmista poiketen raportoimatta.

8.3 Monen relaxointiajan menetelmä

Permeabiliteettisimuloinneissa otettiin käyttöön monen relaxointiajan menetelmä. Menetelmän permeabiliteetin viskositeettiriippuvuutta testattiin ja havaittiin, että se on moninverroin BGK-menetelmän vastaavaa riippuvuutta pienempi. Havaittiin kuitenkin, että myös MRT:ssä on kyseinen riippuvuus ja sen puolestaan havaittiin riippuvan selvästi hilan tiheydestä. Noin 20 hilyksikön kokoisilla virtauskanavilla viskositeettiriippuvuus on jo huomaamattoman pieni.

8.4 Simuloinnit

Tutkielmassa tutkittiin erilaisten näytteiden virtausominaisuuksia ja erityisesti permeabiliteettia hila-Boltzmann-simulointimenetelmän avulla. Simuloinnilla saatuja näytteiden permeabiliteettien arvoja verrattiin Kozenyn lailla (lauseke (7) sivulla 8) saatuihin arvoihin. Osoittautui, että paikallisessa tarkastelussa Kozenyn laki kuvasi hyvin permeabiliteetin käyttäytymisen, kun sitä verrattiin simuloimalla saatuun permeabiliteettiin. Paikallisella tarkastelulla saatiin myös määritettyä Kozenyn vakio c hyvin virherajoineen, jota käyttäen koko näytteelle lasketuilla keskiarvoisilla parametreilla Kozenyn laki antoi hyviä tuloksia.

Koko näytteen permeabiliteettiin vaikuttavat erityisesti näytteen tukkoiset alueet. Tämä on yhtäpitävää sen kanssa, että koko näytteen permeabiliteetti saadaan kaavan (45) mukaan osa-alueiden permeabiliteettien käänteislukujen keskiarvon käänteislukuna, joka on eräänlainen pieniä arvoja painottava keskiarvosuure. Näytteen tukkoisimmat alueet löydetään tutkimalla näytettä paikallisesti.

8.5 Paperinäytteet

Paperinäytteille tehdyissä permeabiliteettisimuloinneissa hila-Boltzmann-menetelmä osoittautuu soveltuvan erityisen hyvin materiaalin permeabiliteetin tutkimiseen. Kesällä 2005 suoritettujen simulointien tuloksissa oli tekijän kaksi tasoero mitattuihin arvoihin. Tällöin käytössä oli BGK-menetelmä ja simuloinnit tehtiin pienille näytepaloille. Keväällä 2006 suoritettujen uusimpien kokeellisten mittausten ja suoritettujen simulointien antamat tulokset ovat aikaisempia tuloksia parempia - tasoeroa kokeellisten ja simuloitujen tulosten välillä ei enää ole havaittavissa. Tulosten paranemiseen on vaikuttanut sekä simulointien että kokeiden kehittyminen. Simuloinneissa on otettu käyttöön monen relaxsointiajan menetelmä (MRT), jonka permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus on aikaisempaa BGK-menetelmää huomattavasti pienempi ja simuloinnit on voitu suorittaa huomattavasti suuremmille näytteille.

Havaitaan, että MRT-menetelmällä permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus riippuu oleellisesti diskretoinnin tiheydestä. Mikäli näyte diskretoidaan riittävän tiheällä simulointihilalla, permeabiliteetti ei menetelmässä merkittävästi riipu viskositeetista. Tämän vuoksi permeabiliteetin viskositeettiriippuvuustarkastelu osoittautuu toimivaksi tavaksi tutkia diskretoinnin riittävyttä. Tarkastelluilla näytteillä havaittiin kohtuullinen permeabiliteetin viskositeettiriippuvuus, josta voidaan päätellä, että virtaus merkittävässä määrin joutuu kulkemaan liian huonosti diskretoitujen kanavien läpi. Diskretoinnista aiheutuvan virheen havaittiin luvussa 6.2 olevan pieni pienillä viskositeeteilla yksinkertaisille pallonäytteille. Hyvällä syyllä voidaan siten arvioida, että saadut permeabiliteetin arvot ovat melko tarkasti oikeita. Tämän puolesta puhuu myös kokeellisten tulosten yhtäpitävyys simulointitulosten kanssa.

Viitteet

- [1] Y.H. Qian, D. d’Humières ja P. Lallemand, *Europhys. Lett.* **17**, 479 (1992).
- [2] Ks. S. Kostek, L.M. Schwartz ja D. L. Johnson, *Phys. Rev. B* **45**, 186 (1992); A. H. Thompson, S. W. Sinton, S. L. Huff, A. J. Katz, R. A. Raschke ja G. A. Gist, *J., Appl. Phys.* **65**, 3259 (1989); D. L. Johnson, D. L. Hemmic ja H. Kojima, *J. Appl. Phys.* **76**, 104 (1994), ja näissä olevat viittaukset.
- [3] H. Darcy, *Les Fontaines Publiques da la Ville de Dijon* (Dalmont, Paris, 1856).
- [4] A. Scheidegger, *The physics of flow in porous media* (The Macmillian company, New York, 1957).
- [5] L. Boltzmann, *Vorlesungen über Gastheorie*, Lectures on Gas Theory, Dover, 1995.
- [6] B. Chopard ja M. Drotz, *Cellular automata modelling of physical systems* (Lecture notes, University of Geneva, 1996).
- [7] B. Ferréol, ja D. H. Rothman, *Transport in Porous Media* **20**, 3 (1995).
- [8] P. M. Adler, *Porous Media. Geometry and Transport* (Butterworth-Heinemann, Boston, 1992).
- [9] F. M. White, *Fluid Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 2003).
- [10] A. Koponen, M. Kataja, J. Timonen, *Phys. Rev. E* **54** 406 (1996).
- [11] A. Scheidegger, *The physics of flow through porous media*, Macmillan, New York, 1957.
- [12] J. Happel, *AIChE J.* **5**, 174 (1959).
- [13] A. Koponen, D. Kandhai, E. Hellén, M. Alava, A. Hoekstra, M. Kataja, K. Niskanen, P. Soot ja J. Timonen, *Phys. Rev.* **80**, 716 (1998).
- [14] P. Lallemand, L.-S. Luo, *Journal of Computational Physics* **184**, 406-421 (2003).
- [15] Lorensen, William and Harvey E. Cline, *Computer Graphics (SIGGRAPH 87 Proceedings)* **21**, 163-170 (July 1987).
- [16] D. D’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand ja L.-S. Luo, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **360**, 437-451 (2002).
- [17] C. Pan, L.-S. Luo, C. T. Miller, *An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation*, *Computers & fluids* (ei julkaistu).

- [18] B. Chopard, M. Droz, *Cellular automata modelling of physical systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998)
- [19] U. Aaltosalmi, *Fluid flow in porous media with the lattice-Boltzmann method*, Research report No. 3/2005, University of Jyväskylä, p. 23.
- [20] P. Lallemand, L.-S. Luo, *Phys. Rev. E* **61**, 6546-6562 (2000).
- [21] U. Frisch, B. Hasslacher, ja Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1505 (1986).
- [22] R. C. Gonzalez, R. E. Woods, *Digital Image Processing*, Prentice Hall, Inc. (2002).
- [23] T. W. Ridler and E. S. Calvard, *IEEE Trans. Syst. Mun Cybern.*, vol. **SMC-8**, 630-632, (Aug. 1978).
- [24] R. Larson ja J. Higdon, *Phys. Fluids A* **1** 38 (1989).