

Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки
Институт математики им. С. Л. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук

Доклад по материалам диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2
Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Алгоритмы численного моделирования морфологии пористых сред для улавливания и хранения диоксида углерода

Докладчик: **Прохоров Дмитрий Игоревич**
Научный руководитель:
д.ф.-м.н. **Базайкин Ярослав Владимирович**

Новосибирск, 2023

алгоритмы численного моделирования морфологии пористых сред на предмет их развития и использования для задач улавливания и хранения углекислого газа (сорбция CO_2 сорбентами на основе оксида кальция, закачка CO_2 в пласт).

- Улавливание и хранение CO_2 с помощью твердых сорбентов
- Процесс спекания позволяет получать материалы с заранее заданными параметрами
- Захоронение CO_2 в пористых геологических формациях
- Измерение свойств химическими или физическими методами является весьма ресурсоемкой задачей

развитие программно–алгоритмической составляющей методов численного моделирования эволюции пористых сред в процессе химических воздействий для снижения времени вычислений и требований на вычислительные ресурсы за счет использования вычислительной топологии, параллельных вычислений и учета особенностей морфологии пористых сред при разработке алгоритмов.

Научные задачи:

- Разработать и реализовать в виде программного продукта алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен оксида кальция сферической формы с заданной пористостью и содержанием темплата.
- Разработать и реализовать в виде программного продукта алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зёрнами произвольной формы для оценки изменения пористости и площади поверхности в процессе высокотемпературных воздействий.
- На основе метода ретракции разработать и реализовать в виде программного продукта алгоритм редукции трехмерного цифрового изображения с целью увеличения эффективности вычисления одномерных персистентных диаграмм алгоритмом Эдельсбруннера–Летшера–Зомородяна.

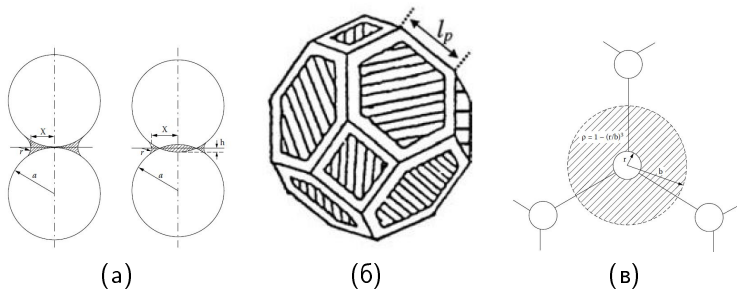
Численное моделирование
сорбционных и текстурных
свойств сорбентов на основе
CaO
с различной структурой пор

Геометрические модели спекания

предполагают, что зерна имеют сферическую форму и одинаковый размер, упаковка регулярна, а рост зерен отсутствует. Эти предположения почти никогда не воспроизводятся в реальных упаковках зерен [Rahaman 2007].

Процесс спекания концептуально разделяется на три этапа:

- 1 начальный (а) [Cho 2006]
- 2 промежуточный (б) [Coble 1961]
- 3 финальный (в) [Coble 1961]

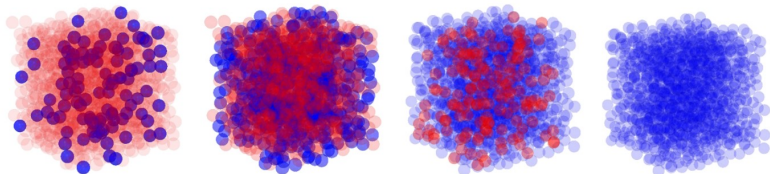
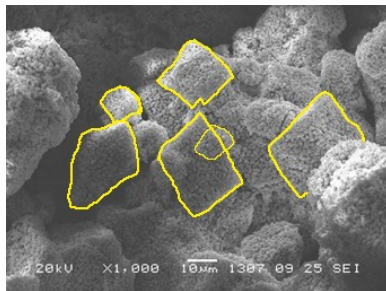


Иллюстрации: [Rahaman 2007]

- Аппроксимирующей формулы на основе экспериментальных данных и физических законов [Zhou 2013, Lopez 2018, Abreu 2020]
- Объемное спекание. Модель дает прогноз изменения текстурных свойств сорбента (например значения удельной площади поверхности и среднего размера пор) для большого числа циклов сорбции/регенерации [Bazaikin 2016]
- Поверхностное спекание. Модель описывает резкое уменьшение степени использования сорбента в течение первых 6-9 циклов [Bazaikin 2019]

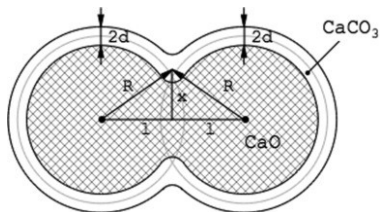
Геометрическая модель регулярной области *CaO*-сорбента

- n сфер *CaO*
- N сфер полистирола
- $n + N = 1000$
- 33 — упаковки с темплатом,
1 — без темплата
- Пористость 0.94—0.59



Геометрическая модель спекания сорбента в процессе карбонизации и разложения в гранулах CaO

$$m \frac{d^2 l}{dt^2} = -(F - F_0) = -\alpha R d(t) + \pi \sigma_0 (x - d(t))^2$$



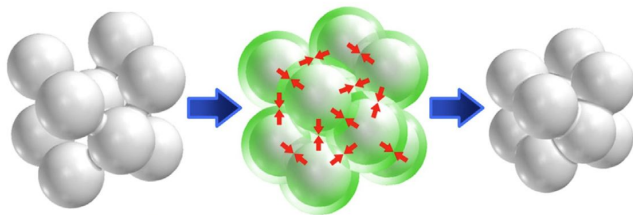
- Сила F сближает центры
- Сила F_0 — препятствует сближению

Геометрическая модель спекания сорбента в процессе карбонизации и разложения в гранулах CaO

$$V_{\mu}(r) = \mu^3 V(r/\mu)$$

$$RE_k = \frac{\Delta\mu_k^3}{V_0} \left(V \left(\frac{1 + \delta_T}{\mu_k} R \right) - V \left(\frac{1 - \delta_T}{\mu_k} R \right) \right)$$

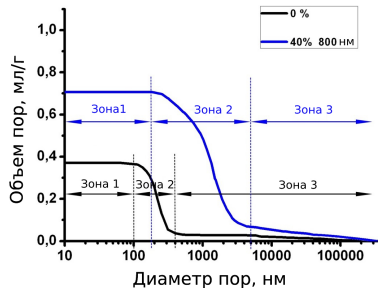
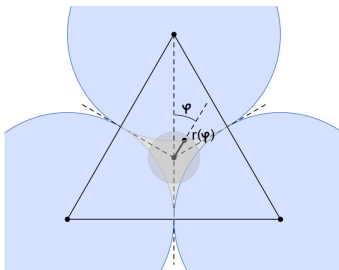
$$SWC = 100 \left(1 + RE \frac{M_{CaCO_3}}{M_{CaO}} \right)$$



Изображение: [Bazaikin 2016]

Диаметр минимального канала

- $D_1 = 100\text{нм}$, $R_1 \approx 220\text{нм}$ — нетемплатный образец
- $D_2 = 180\text{нм}$, $R_2 \approx 400\text{нм}$ — темплатный образец



Использование метода Монте-Карло и конечно-разностного метода для вычисления площади поверхности и объема упаковки пересекающихся сфер

- Последовательность радиусов $\{R = R_1, R_2, \dots, R_m\}$
- k случайных точек с равномерным распределением
- d_i — расстояние до центра i -й сферы
- l_i , такой что $R_{l_i-1} \leq d_i < R_{l_i}$. В случае $l_i < R$ полагается $l_i = 1$

Последовательность объемов упаковки:

$$V_j = 1000 \cdot \frac{|\{l_i | l_i \leq j, 1 \leq i \leq k\}|}{k}, 1 \leq j \leq n.$$

Площадь сферы:

$$S = \lim_{dR \rightarrow 0} \frac{dV(R)}{dR} = V'(R).$$

Последовательность площадей упаковки:

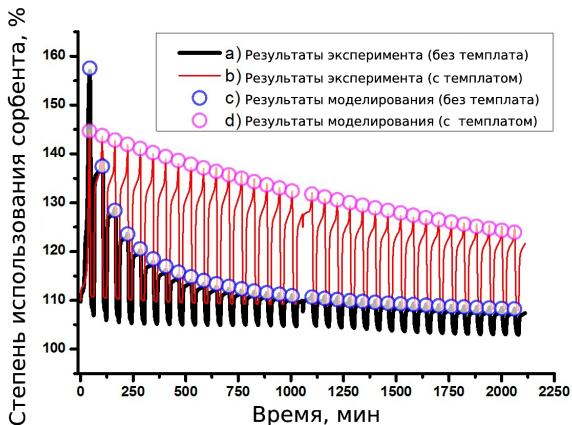
$$S_1 = 1000 \cdot 4\pi R^2,$$

$$S_j = \frac{V_j - V_{j-1}}{R_j - R_{j-1}}, 2 \leq j \leq n.$$

Степень использования сорбента (33 цикла)

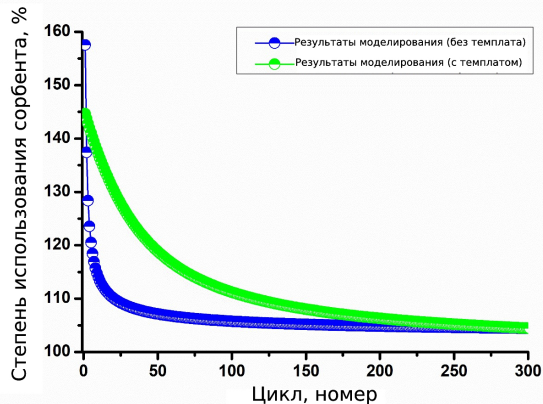
Темплатный сорбент: $n = N = 500$

	δ_T	μ_0	μ_∞	χ
Нетемплатный CaO	0.57	0.87	0.41	0.44
Темплатный CaO	0.31	0.80	0.33	0.12

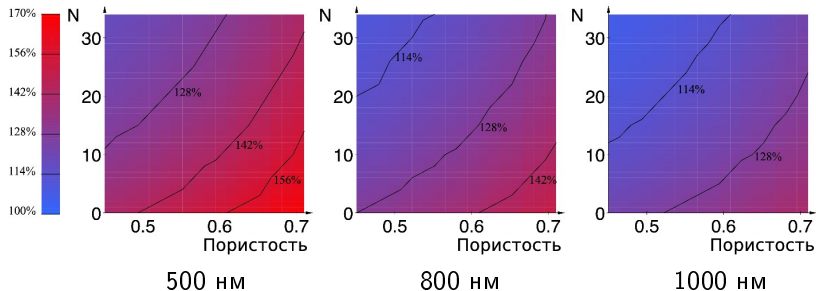


Степень использования сорбента (300 цикл). Полная эффективность

$$\frac{\sum_{300cycles} (w_i^{nt} - w_0)}{\sum_{300cycles} (w_i^t - w_0)} \approx 16.109$$



Степень использования сорбента для различных размеров зерен и значений пористости



Алгоритм решения
системы уравнений
Аллена-Кана и
Кана-Хиллиарда
для моделирования процесса
спекания зернистых
материалов

Методы решения:

- методы отслеживания границы вместе с методом конечных объемов с усеченными ячейками [Trebotich 2014, Molins 2014]
- методы молекулярной динамики [Henz 2009]
- метод поверхности уровня вместе с методами погруженных границ [Osher 2001, Smereka 2001, Sotiropoulos 2014]
- метод фазового поля [Wang 2005, Moelans 2008, Hotzer 2018,]

Уравнение Кана–Хиллиарда.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla \cdot J, \\ J &= D \nabla \mu, \\ \mu &= \frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho.\end{aligned}$$

Уравнения Аллена–Кана.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \eta_i}{\partial t} &= -L \left(\frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \beta_\eta \Delta \eta_i \right) \\ &1 \leq i \leq I.\end{aligned}$$

- 1 Альтернативные модели на основе закона Фика [Zhang 2014, Hotzer 2018]
- 2 Метод локально уменьшенных параметров порядка. Реализован в программном пакете Phase3D [Kim 2006, Hotzer 2018]

Уравнение Кана–Хиллиарда.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla \cdot J, \\ J &= D \nabla \mu, \\ \mu &= \frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho.\end{aligned}$$

Уравнения Аллена–Кана.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \eta_i}{\partial t} &= -L\left(\frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \beta_\eta \Delta \eta_i\right) \\ &1 \leq i \leq I.\end{aligned}$$

Прямоугольная область

$$\Omega = [X_1^{\min}, X_1^{\max}] \times [X_2^{\min}, X_2^{\max}] \times [X_3^{\min}, X_3^{\max}].$$

Граничные условия - периодические.

Начальные условия:

$$\begin{aligned}\eta_i(\mathbf{x}, 0) &= \chi_i(\mathbf{x}), \forall i, \\ \rho(\mathbf{x}, 0) &= \max_i(\chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_I(\mathbf{x})).\end{aligned}$$

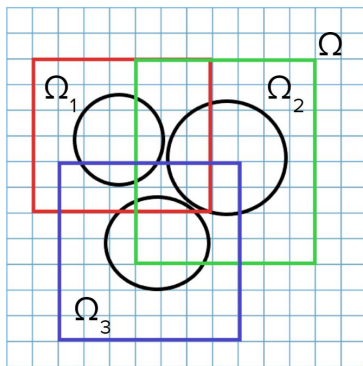
Адаптация конечно-разностной схемы для большого числа зерен

Для каждого зерна определяется область

$$\Omega_i = [X_{i1}^{min}, X_{i1}^{max}] \times [X_{i2}^{min}, X_{i2}^{max}] \times [X_{i3}^{min}, X_{i3}^{max}], 1 \leq i \leq I,$$

такая что $supp(\eta_i) \subseteq \Omega_i \subseteq \Omega$.

Граничные условия Дирихле: $\eta_i|_{\partial\Omega_i} = 0$



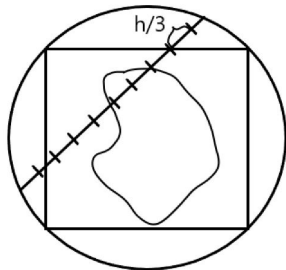
Формула Крофтона для вычисления площади поверхности неявно заданного интерфейса

Последовательность значений $\rho \{\rho_0, \dots, \rho_{k+1}\}$.
Количество пересечений с $\partial\Omega$:

$$N = \frac{k - \sum_{i=0}^k \operatorname{sgn}((\rho_i - 0.5)(\rho_{i+1} - 0.5))}{2}.$$

Итоговая площадь поверхности $\partial\Omega$:

$$S \approx 3\pi l_{\Omega}^2 \frac{\sum_{i=1}^M N_i}{2M}.$$



Спекание двух сферических зерен

- Размер сетки — $120 \times 120 \times 200$
- Радиус зерен — $40h$ (1.25 мкм)
- Число итераций — $5 \cdot 10^6$ (4.5 часа)

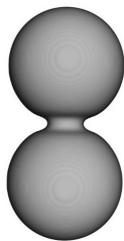
Рост перешейка между двумя зернами:

$$\frac{X}{D} = Kt^n + C.$$

Динамика роста перешейка для параметров модели W



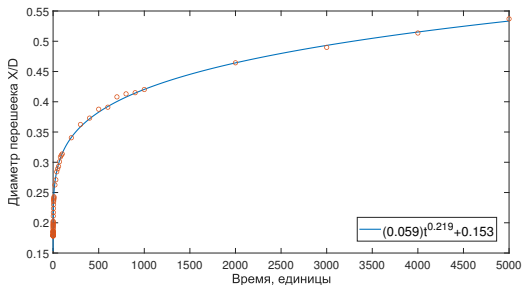
$t = 0$



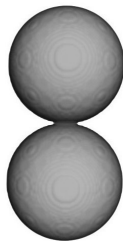
$t = 10000\tau$



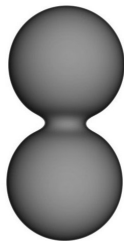
$t = 5000000\tau$



Динамика роста перешейка для параметров модели A_1



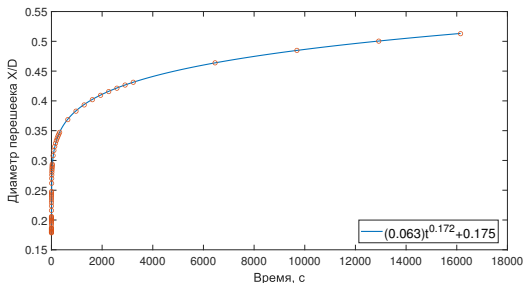
$t = 0$



$t = 10000\tau$



$t = 5000000\tau$



Спекание упаковок из 25 зерен

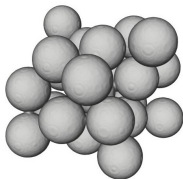
- Размер сетки — $200 \times 200 \times 200$
- Радиус зерен — $25h$ (250 нм)
- Число итераций — $5 \cdot 10^5$ (6.75 с)

Удельная поверхность:

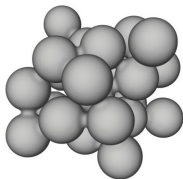
$$SSA = \frac{S}{V_{\Omega}},$$

Параметры алгоритма:

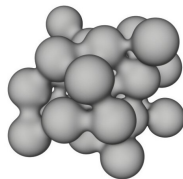
$$F_{min} = 5h, \quad T_r = 100\tau,$$
$$F_{start} = 10h, \quad T_{fr} = 1000\tau.$$



$t = 0$



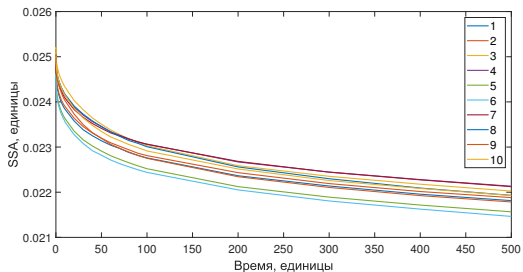
$t = 10000\tau$



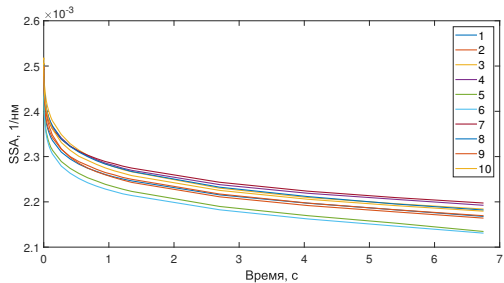
$t = 500000\tau$

Удельная поверхность упаковок из 25 зерен

W



A₂

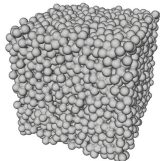


Вычислительный узел с процессором Intel Xeon E5 2697 v3 и графическим ускорителем NVIDIA K40. Суперкомпьютерный центр “Политехнический”.

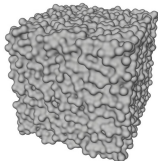
Конфигурация	Время	Коэффициент ускорения
(S, W)	22 ч. 26 мин.	6.6
(T, W)	3 ч. 23 мин.	
(S, A ₂)	22 ч. 27 мин.	6.7
(T, A ₂)	3 ч. 21 мин.	

Спекание упаковки из 4302 зерен

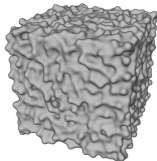
- Размер сетки — $320 \times 320 \times 320$
- Радиус зерен — $10h$ (250 нм)
- Радиусы частиц увеличены в 1.2 раза
- Число итераций — $5 \cdot 10^5$ (527 с)



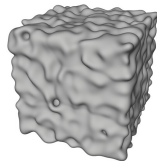
$t = 0$



$t = 10000\tau$



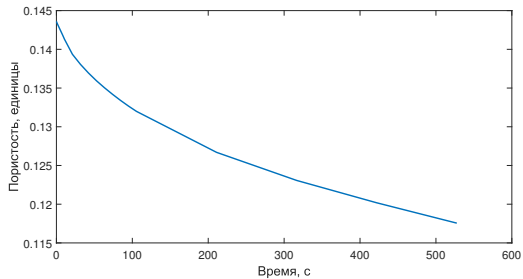
$t = 500000\tau$



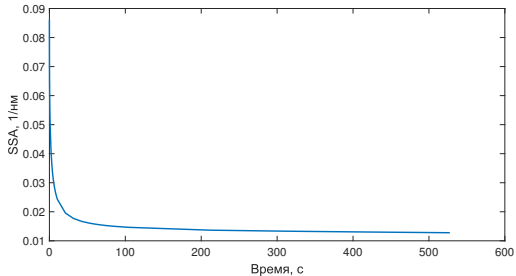
$t = 500000\tau$

Характеристики порового пространства

Пористость

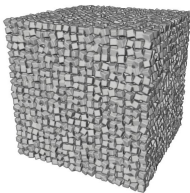


SSA

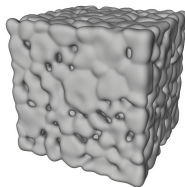


Спекание упаковок из 4096 и 8000 зерен оксида иттрия

Образец	Число кубов	Размер сетки	Количество итераций	Время вычислений
S_{16}	4096	294^3	1000000	36.5 ч
S_{20}	8000	358^3	1000000	74 ч

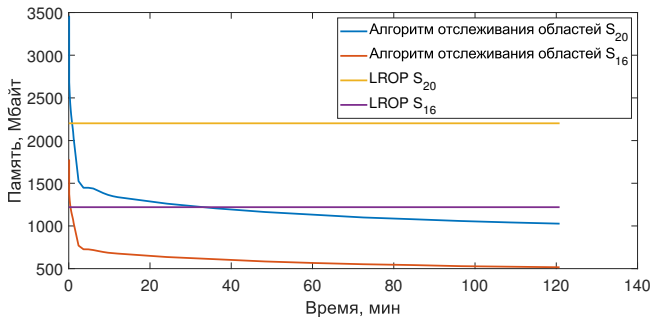


$t = 0$



$t = 1000000\tau$

Память необходимая для хранения значений η_i

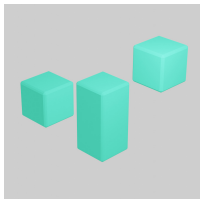
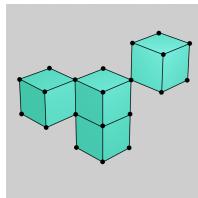
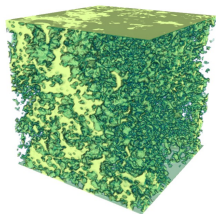


Топологическая оценка
изменений порового
пространства породы,
вызванных растворением, с
использованием редукции
трехмерных цифровых
изображений

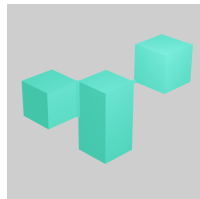
Взаимосвязь между свойствами пористой среды и характеристиками порового пространства

- Зависимости между пористостью, проницаемостью и капиллярным давлением [Tiab 2015, Dullien 2012]
- Связность порового пространства [Blunt 2017]
- Функционалы Минковского — количественная оценка геометрии объекта на основе микромасштабных измерений [Arns 2001, Blunt 2013]
- Персистентные гомологии — выделение наиболее значимых топологических особенностей [Robins 2016]

- Алгоритм Эдельсбруннера–Летшера–Зомородяна $O(n^3)$ [Edelsbrunner 2008]
- Дискретная теория Морса [Robins 2011]
- Ко-редукция [Mrozek 2009]
- Метод ациклического подпространства [Mrozek 2008]
- Редукция [Dlotko 2014]

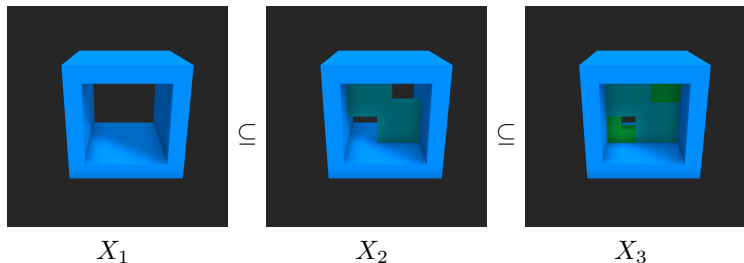


6-связность



26-связность

Фильтрация цифрового изображения



- 0 — "отсутствующие" воксели
- 1 — синие воксели
- 2 — бирюзовые воксели
- 3 — зеленые воксели

Вложение $X_i \subseteq X_j$ образует гомоморфизм p -мерных гомологий:

$$f_p^{i,j} : H_p(X_i) \rightarrow H_p(X_j).$$

Персистентная p -мерная группой гомологий:

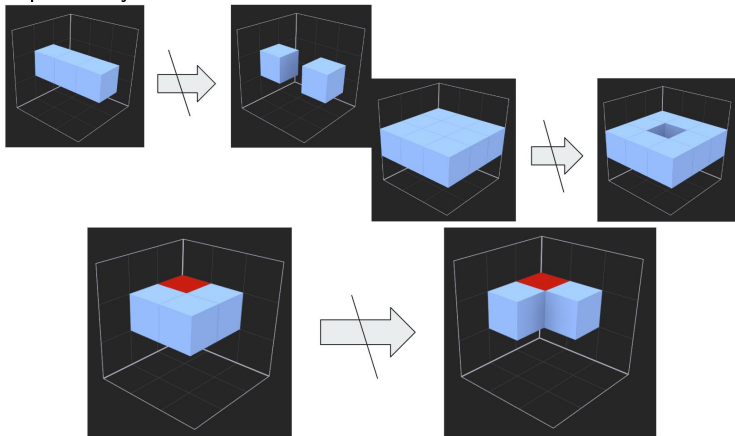
$$H_p^{i,j} = \text{Im}(f_p^{i,j})$$

Число независимых p -мерных гомологических циклов, появляющихся в X_i и исчезающих в X_j :

$$\mu_p^{i,j} = (\beta_p^{i,j-1} - \beta_p^{i,j}) - (\beta_p^{i-1,j-1} - \beta_p^{i-1,j})$$

Алгоритм редукции трехмерных цифровых изображений

Для каждого вокселя в его окрестности размера $3 \times 3 \times 3$ проверяются условия



Численное моделирование реактивного переноса в масштабе пор

Уравнение Стокса:

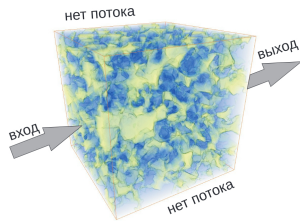
$$\nabla p - \nu \Delta \vec{u} = 0, \quad \nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad \vec{x} \in \Omega_p.$$

Уравнение адвекции-диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) - \nabla \cdot (D \nabla C) = 0, \quad \vec{x} \in \Omega_p$$

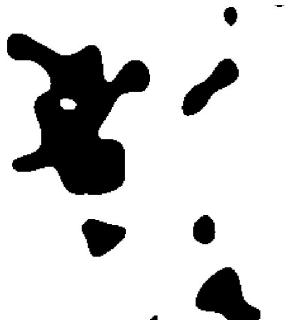
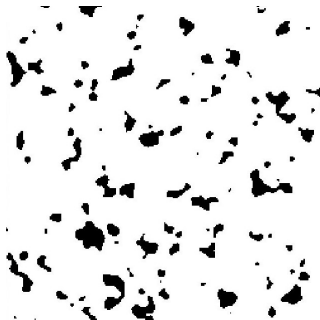
Уравнение движения интерфейса:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = v_n(\vec{x}, t) = \frac{K_c k_{chem}}{\rho} (C - C_s), \quad \vec{x} \in \Gamma(t),$$

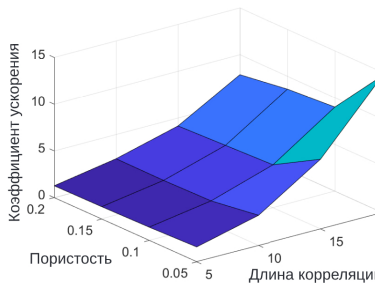


Равномерное химическое растворение

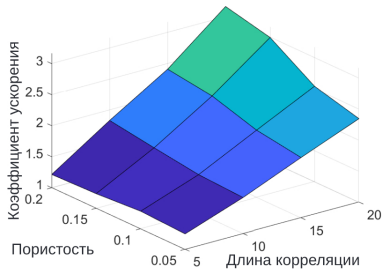
1600 изображений размера 250^3 вокселей. Пористость принимает значения $\{0.05, 0.1, 0.15, 0.2\}$. Длина корреляции — $\{5, 10, 15, 20\}$.
 $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$.



Равномерное химическое растворение



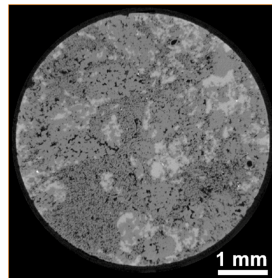
$$c_S = \frac{T_0}{T_1}.$$



$$c_{ST} = \frac{T_0}{T_1 + T_R}.$$

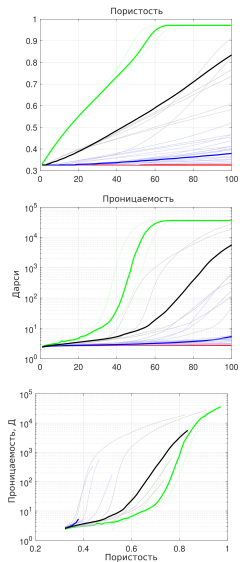
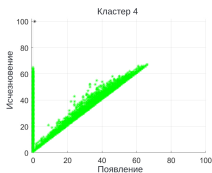
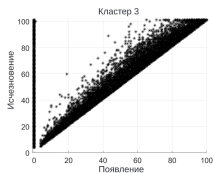
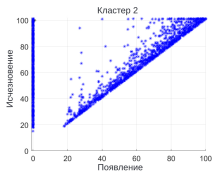
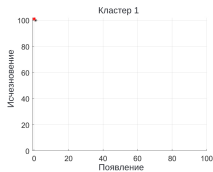
Растворением с различными параметрами потока

- Размер — 200^3 вокселей.
- Разрешение КТ-изображения — 5.2 мкм на воксель
- Плотность матрицы кальцита $\rho = 2710$ кг/м³
- Стехиометрический коэффициент $K_c = 1$
- Динамическая вязкость жидкости $\mu = 0.00028$ Па·с
- Водородный показатель pH равновесной концентрации H^+ равен семи
- $k_{chem} \in \{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0\}$ м/с,
- $D \in \{10^{-9}, 10^{-8}, 10^{-7}\}$ м²/с,
- $dP \in \{0.5, 1, 2\}$ Па,
- $pH \in \{3, 4, 5\}$.

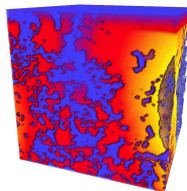
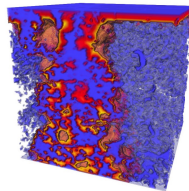
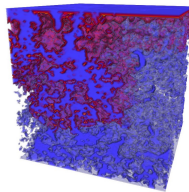
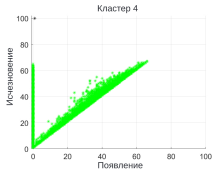
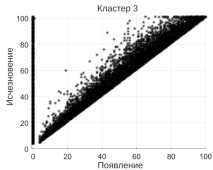
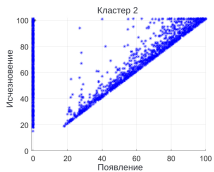
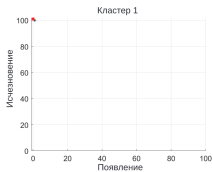


Изображение:
[Al-Khulaifi 2019]

Кластеризация 1-мерных персистентных диаграмм



Кластеризация 1-мерных персистентных диаграмм



Защищаемые научные результаты:

- Алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен оксида кальция сферической формы с заданной пористостью и содержанием темплата.
- Алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зёрнами произвольной формы для оценки изменения пористости и площади поверхности в процессе высокотемпературных воздействий.
- Алгоритм редукции трехмерного цифрового изображения, разработанный на основе метода ретракции, для увеличения эффективности вычисления персистентных диаграмм алгоритмом Эдельсбруннера–Летшера–Зомородяна.

- 1 Разработан и реализован в виде научно-исследовательской версии программного продукта алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен CaO сферической формы с заданной пористостью и содержанием темплата (совместно с Я. В. Базайкиным), который включает оригинальные решения:
 - с использованием метода Монте-Карло и конечно-разностного метода получены оценки изменения сорбционной емкости темплатных (с различным содержанием темплата) и нетемплатных сорбентов на основе CaO в процессе 300 циклов сорбции/регенерации.
 - в результате анализа оценок сорбционной емкости найдена оптимальная (по эффективности сорбционной емкости) структура темплатного сорбента на основе CaO (совместно с Я. В. Базайкиным, Е. Г. Мальковичем и В. С. Деревщиковым).

Преимущество предложенного подхода:

- прогнозирование зависимости текстурных изменений и степени рекарбонизации от количества циклов сорбции/регенерации для сорбентов с различными пористостью и размером зерен.

- 2 Разработан и реализован в виде научно-исследовательской версии программного продукта, ориентированного на использование графических сопроцессоров, алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зернами произвольной формы для оценки изменения пористости и площади поверхности в процессе высокотемпературных воздействий, который включает ряд оригинальных решений:
- ограничение расчетных областей параметров порядка с учетом толщины интерфейса фазового поля и скорости движения границы зерен.
 - алгоритм перераспределения машинной памяти для изменения расчетных областей параметров порядка при росте и движении зерен.

Преимущества предложенного подхода:

- моделирование спекания образцов, состоящих из 8000 зерен, на сетке 358^3 с использованием одного графического ускорителя, объем памяти которого составляет 12 Гб.
- в сравнении с явным подходом время вычислений сокращается в 6–14 раз, а затраты памяти для хранения значений параметров порядка в 9 раз.
- в сравнении с подходом LROP разработанному алгоритму требуется на 40-50% процентов больше памяти для хранения параметров порядка. Однако, с укрупнением зерен затраты памяти снижаются до уровня LROP (а затем до 50% от исходной памяти).

- 3 На основе метода ретракции разработан и реализован в виде научно-исследовательской версии программного продукта оригинальный алгоритм редукции трехмерного цифрового изображения, для увеличения эффективности вычисления персистентных диаграмм алгоритмом

Эдельсбруннера–Летшера–Зомородяна:

- редукция проводится без конвертации трехмерного цифрового изображения в кубический или симплициальный комплекс.
- с использованием кластеризации k -средних построена зависимость между параметрами химического растворения горной породы (перепад давления, скорость реакции, коэффициент молекулярной диффузии, водородный показатель) и изменениями ее топологии в трехмерном пространстве.

Преимущества предложенного подхода:

- выход алгоритма редукции трехмерных цифровых изображений гарантированно содержит меньшее количество вокселей, чем входные данные.
- ускорение вычисления персистентных диаграмм в 15 раз
- кластеризация зависимости пористости и проницаемости от времени, а также их взаимных зависимостей по персистентным диаграммам позволяет существенно повысить понимание того, как меняется поровое пространство породы при различных сценариях растворения.

Статьи в рецензируемых журналах из перечня ВАК

- 1 Прохоров, Д. Редукция цифрового изображения для анализа топологических изменений порового пространства породы в процессе химического растворения / Д. Прохоров, Я. Базайкин, В. Лисица // Вычислительные методы и программирование. — 2020. — сен. — Т. 21, № 65. — С. 319—328.
- 2 Detailed modeling of sorptive and textural properties of CaO-based sorbents with various porous structures / Y. Bazaikin [et al.] // Separation and Purification Technology. — 2021. — Vol. 255. — P. 117746.
- 3 Prokhorov, D. Digital image reduction for the analysis of topological changes in the pore space of rock matrix / D. Prokhorov, V. Lisitsa, Y. Bazaikin // Computers and Geotechnics. — 2021. — Vol. 136. — P. 104171.
- 4 Topology-based characterization of chemically-induced pore space changes using reduction of 3D digital images / D. Prokhorov [et al.] // Journal of Computational Science. — 2022. — Vol. 58. — P. 101550.
- 5 Прохоров, Д. И. Эффективный алгоритм решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда: моделирование процесса спекания / Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, В. В. Лисица // Вычислительные методы и программирование. — 2022.
- 6 Phenomenology and modeling of Y₂O₃ porous grain sintering / V. Derevschikov [et al.] // Ceramics International. — 2023. — Vol. 49, no. 6. — P. 9452—9464.

Программы для ЭВМ

- 1 Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ. CubicTopology_Reduction / Д. И. Прохоров. — № 2022669497 ; заявл. 20.10.2022 ; опубл. 20.10.2022, 2022669497 (Рос. Федерация).

Материалы конференций

- 1 Прохоров, Д. И. Применение алгоритма редукции цифрового изображения для вычисления персистентных диаграмм порового пространства породы в процессе химического растворения / Д. И. Прохоров // Тезисы XXI всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. — 2020.
- 2 Прохоров, Д. И. Редукция цифровых изображений для эффективного вычисления топологических изменений в матрице породы / Д. И. Прохоров, В. Лисица, Я. В. Базайкин // Интерэкспо ГЕО-Сибирь. — 2021. — Т. 2. — С. 251—257.
- 3 Prokhorov, D. Digital Image Reduction for Analysis of Topological Changes in Pore Space During Chemical Dissolution / D. Prokhorov, V. Lisitsa, Y. Bazaikin // Computational Science – ICCS 2021 / ed. by M. Paszynski [et al.]. — Springer International Publishing. — P. 382—393.
- 4 Numerical Simulation of the Reactive Transport at Pore Scale in 3D / V. Lisitsa [et al.] // Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. — Cham : Springer International Publishing, 2021. — P. 375—387.
- 5 Прохоров, Д. И. Моделирование спекания оксида иттрия методом фазового поля с учетом большого количества зерен / Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, В. Лисица // Интерэкспо ГЕО-Сибирь. — 2022. — Т. 2. — С. 202—208.
- 6 Численное исследование изменений структуры порового пространства и фильтрационных свойств породы под действием химически активных флюидов / Т. Хачкова [и др.] // Интерэкспо ГЕО-Сибирь. — 2022. — Т. 2. — С. 232—239.
- 7 Прохоров, Д. И. Численное моделирование спекания зерен оксида иттрия / Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, В. С. Деревщиков // Суперкомпьютерные технологии математического моделирования: Тезисы докладов V международной конференции. — 2022.
- 8 Prokhorov, D. Sintering Simulation Using GPU-Based Algorithm for the Samples with a Large Number of Grains / D. Prokhorov, Y. Bazaikin, V. Lisitsa // Supercomputing / ed. by V. Voevodin [et al.]. — Cham : Springer International Publishing, 2022. — P. 313—327.

Спасибо за внимание!