



doi 10.26089/NumMet.v23r206

УДК 519.63

Эффективный алгоритм решения системы уравнений Аллена–Кана и Кана–Хиллиарда: моделирование процесса спекания

Д. И. Прохоров

Институт математики имени С. Л. Соболева СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация
ORCID: 0000-0002-8547-930X, e-mail: d.prokhorov@alumni.nsu.ru

Я. В. Базайкин

Институт математики имени С. Л. Соболева СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация
ORCID: 0000-0003-3043-4224, e-mail: bazaikin@math.nsc.ru

В. В. Лисица

Институт нефтегазовой геологии и геофизики имени А. А. Трофимука СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация
ORCID: 0000-0003-3544-4878, e-mail: LisitsaVV@ipgg.sbras.ru

Аннотация: В работе представлен алгоритм решения системы уравнений Аллена–Кана и Кана–Хиллиарда, которая описывает процесс спекания. Алгоритм не требует значительных по мощности вычислительных ресурсов и позволяет выполнить моделирование процесса спекания большого количества отдельных частиц на вычислительном узле с процессором Intel Xeon E5 2697 v3 и графическим ускорителем NVIDIA K40 за приемлемое время. Проведены эксперименты по моделированию спекания сорбентоподобных структур — упаковок сферических частиц, и на них показана эффективность алгоритма.

Ключевые слова: спекание, фазовое поле, уравнение Кана–Хиллиарда, уравнение Аллена–Кана.

Для цитирования: Прохоров Д.И., Базайкин Я.В., Лисица В.В. Эффективный алгоритм решения системы уравнений Аллена–Кана и Кана–Хиллиарда: моделирование процесса спекания // Вычислительные методы и программирование. 2022. **23**, № 2. 75–94. doi 10.26089/NumMet.v23r206.



Efficient algorithm for solving the system of Allen–Cahn and Cahn–Hilliard equations: modeling the sintering process

Dmitry I. Prokhorov

Sobolev Institute of Mathematics,
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
ORCID: 0000-0002-8547-930X, e-mail: d.prokhorov@alumni.nsu.ru

Yaroslav V. Bazaikin

Sobolev Institute of Mathematics,
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
ORCID: 0000-0003-3043-4224, e-mail: bazaikin@math.nsc.ru

Vadim V. Lisitsa

Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics,
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
ORCID: 0000-0003-3544-4878, e-mail: LisitsaVV@ipgg.sbras.ru

Abstract: In this work, we present an algorithm for solving the system of Allen–Cahn and Cahn–Hilliard equations, which describes the process of sintering. The algorithm does not require significant computational resources and makes possible the sintering simulating of a large number of grains using a computation node with an Intel Xeon E5 2697 v3 CPU and an NVIDIA K40 GPU in a reasonable time. Experiments were carried out to simulate the sintering of sorbent-like structures (packings of spherical particles), for which the efficiency of the algorithm was shown.

Keywords: sintering, phase-field, Cahn–Hilliard equation, Allen–Cahn equation.

For citation: D. I. Prokhorov, Ya. V. Bazaikin, V. V. Lisitsa, “Efficient algorithm for solving the system of Allen–Cahn and Cahn–Hilliard equations: modeling the sintering process,” Numerical Methods and Programming. 23 (2), 75–94 (2022). doi 10.26089/NumMet.v23r206.

1. Введение. Спекание является одним из основных методов получения пористых материалов с заданными фильтрационными, прочностными и сорбционными свойствами. Например, материалы на основе карбида вольфрама и карбида кремния получили широкое распространение при создании особо прочных инструментов и абразивов [1, 2]. Сорбенты, полученные спеканием, активно применяются для химического поглощения углекислого газа [3, 4]. При этом процесс спекания гранулированного материала с формированием пористой структуры зависит от ряда факторов, таких как температура, длительность воздействия, внешние нагрузки и пр., которые оказывают существенное влияние на свойства получаемого материала на макромасштабе. Поэтому численное моделирование процесса спекания является актуальной задачей в области изучения материалов [5].

С математической точки зрения задача спекания является задачей Стефана или задачей с подвижной границей. Известен ряд подходов к решению задачи Стефана. В частности, при рассмотрении фазовых температурных переходов используется энтальпийная постановка, предполагающая наличие переходной зоны, температура и состояние вещества в которой определяются на основе эмпирических соотношений [6–8]. В задачах моделирования многофазных течений жидкости распространены методы отслеживания границы (в англоязычной литературе *front-tracking*) в комбинации с методом конечных объемов с усеченными ячейками [9–12]. Однако такой подход чрезвычайно сложен в реализации, поскольку требует на каждом шаге по времени решать ряд геометрических задач для определения положения границы, что особенно осложняется случаями изменения топологии каждой из фаз. Еще одним подходом к решению задачи Стефана является метод поверхности уровня, или *level-set* [13–15], который применяется вместе с методами погруженных границ [16–20] в задачах моделирования течений многофазных жидкостей, химического взаимодействия флюида с матрицей пористого материала [21, 22]. При моделировании спекания

этот метод не получил широкого распространения, потому что поток поверхностной диффузии, который является одним из механизмов переноса массы при спекании, требует очень аккуратной аппроксимации [23, 24]. Наиболее перспективным и бурно развивающимся подходом к решению задачи Стефана в настоящее время является метод фазового поля, или phase-field [25]. Суть этого подхода в использовании нескольких непрерывных функций поля для описания формы и пространственного расположения частиц различного состава. Переменные поля соответствуют таким физическим величинам, как состав и порядковые параметры, причем эти переменные принимают определенные значения в каждой частице и непрерывно меняются на границе.

В случае однокомпонентной системы модель описывается системой уравнений, состоящей из одного консервативного уравнением Кана–Хиллиарда [26] и I уравнений Аллена–Кана [27], где I — количество различных частиц. Каждое из уравнений Аллена–Кана описывает эволюцию параметра порядка, задающего одну из частиц [28]. При решении данной системы конечно-разностными методами возникает необходимость хранить значения переменных для каждой из I частиц. Таким образом, с ростом числа частиц при заданном размере сетки растет и потребность в вычислительных ресурсах. При этом на большей части сетки значение переменной, соответствующей частице, равно нулю. Один из способов преодоления этой проблемы был предложен в [29]. Основная особенность подхода [29] — ограничение на количество ненулевых параметров порядка, одновременно существующих в узле сетки.

В этой работе предлагается другой подход к отслеживанию большого количества частиц в модели. Эволюция параметра порядка вычисляется в небольшой области, содержащей соответствующую частицу. Более того, в компьютерной реализации значения параметров порядка в узлах сетки хранятся только для тех узлов, которые содержатся в области. В процессе эволюции частиц меняется их размер, поэтому периодически пересчитываются и размеры сеток. Частота изменения размеров сеток зависит от физических параметров модели.

Статья имеет следующую структуру. В разделе 2 описана модель спекания. В разделе 3 приведены разностная схема и описание алгоритма. Раздел 4 содержит результаты экспериментов: показана эффективность алгоритма, проведено сравнение решений, которые были получены с помощью предлагаемого алгоритма, и решений, полученных простым вычислением во всех узлах сетки.

2. Модель спекания. Метод фазового поля наиболее часто применяется для моделирования микроструктурной эволюции в таких процессах, как затвердевание [30], твердофазное спекание [31, 32], рост зерен [33] и т.д. Основная особенность данного метода заключается в том, что граница между различными фазами задается неявно — это узкая область, в которой происходит изменение значений переменных фазового поля.

В основе нашей работы лежит модель, предложенная в [28].

2.1. Постановка задачи. Рассматривается упаковка частиц, состоящих из однородного материала, при этом форма и размер частиц могут быть различными. Упаковка находится в прямоугольной области $\Omega = [X_1^{\min}, X_1^{\max}] \times [X_2^{\min}, X_2^{\max}] \times [X_3^{\min}, X_3^{\max}]$. Пространство, не занятое частицами, будем называть порами. Кристаллографическая ориентация описывается параметрами порядка $\eta_i(\mathbf{x}, t)$, $1 \leq i \leq I$. Порядковые параметры меняются непрерывно от 0 до 1. В качестве примера рассмотрим одномерную область на рис. 1: $\eta_i = 1$ в частице с номером i , на границе частицы значение параметра изменяется от 1 до 0, в остальной части области значение параметра равно 0. Плотность описывается параметром $\rho(\mathbf{x}, t)$, который также меняется от 0 в порах до 1 в частицах.

В соответствии с [26, 34] полная свободная энергия неоднородной системы может быть записана как

$$F = \int \left(f(\rho, \eta_1, \dots, \eta_I) + \frac{1}{2} \beta_\rho |\nabla \rho|^2 + \frac{1}{2} \beta_\eta \sum_i |\nabla \eta_i|^2 \right) d\Omega,$$

где f — плотность локальной свободной химической энергии, β_ρ, β_η — коэффициенты градиентной энергии

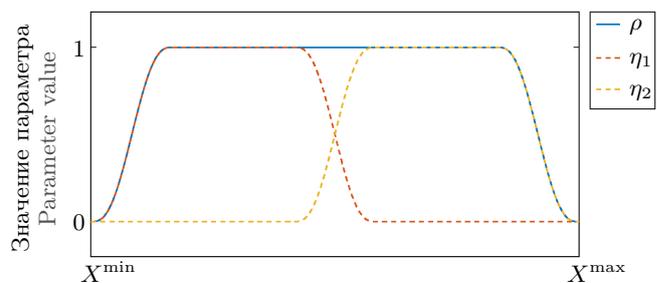


Рис. 1. Переменные фазового поля

Fig. 1. Phase-field variables

гии. Второе слагаемое описывает вклад в энергию от границы между частицами и порами, а третье — вклад в энергию от границы между частицами с различными кристаллографическими ориентациями.

Изменение ρ описывается уравнением Кана–Хиллиарда [26]: плотность меняется под действием потока J , который пропорционален градиенту химического потенциала μ (закон Фика [35]) с коэффициентом диффузии D :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot J, \tag{1}$$

$$J = -D\nabla\mu, \tag{2}$$

$$\mu = \frac{\delta F}{\delta \rho} = \frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho. \tag{3}$$

Эволюция параметров порядка описывается уравнением Аллена–Кана [27]:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} = -L \left(\frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \beta_\eta \Delta \eta_i \right), \quad \forall i, \tag{4}$$

где L — константа, характеризующая мобильность частиц.

Начальные условия задаются характеристическими функциями частиц:

$$\eta_i(\mathbf{x}, 0) = \chi_i(\mathbf{x}), \quad \forall i,$$

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \max \{ \chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_I(\mathbf{x}) \}.$$

Граничные условия — периодические:

$$\begin{aligned} \eta_i((X_1^{\min}, 0, 0), t) &= \eta_i((X_1^{\max}, 0, 0), t), \\ \eta_i((0, X_2^{\min}, 0), t) &= \eta_i((0, X_2^{\max}, 0), t), \\ \eta_i((0, 0, X_3^{\min}), t) &= \eta_i((0, 0, X_3^{\max}), t), \\ \rho((X_1^{\min}, 0, 0), t) &= \rho((X_1^{\max}, 0, 0), t), \\ \rho((0, X_2^{\min}, 0), t) &= \rho((0, X_2^{\max}, 0), t), \\ \rho((0, 0, X_3^{\min}), t) &= \rho((0, 0, X_3^{\max}), t). \end{aligned}$$

В качестве плотности локальной свободной химической энергии используется функция

$$f(\rho, \eta_1, \dots, \eta_I) = A\rho^2(1 - \rho)^2 + B \left[\rho^2 + 6(1 - \rho) \sum_i \eta_i^2 - 4(2 - \rho) \sum_i \eta_i^3 + 3 \left(\sum_i \eta_i^2 \right)^2 \right], \tag{5}$$

где A, B — константы, связанные с физическими параметрами: поверхностной энергией и энергией границ между частицами.

Функция f выбрана так, чтобы иметь минимумы в $I + 1$ точке, а именно при $\rho = 0, \eta_i = 0, \forall i$, и $\rho = 1, \eta_i = 1, \eta_j = 0, \forall j \neq i, 1 \leq i \leq I$. Таким образом плотность локальной свободной химической энергии отделяет поры от частиц и частицы с различными ориентациями друг от друга [28].

Подставляя (5) в (1)–(4), можно получить:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \left(12B\eta_i \left(1 - \rho - (2 - \rho)\eta_i + \sum_j \eta_j^2 \right) - \beta_\eta \Delta \eta_i \right), \quad \forall i,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot D\nabla \left(2A\rho(1 - \rho)(1 - 2\rho) + B(2\rho - 6 \sum_i \eta_i^2 + 4 \sum_i \eta_i^3) - \beta_\rho \Delta \rho \right).$$



В процессе спекания перенос массы происходит под действием различных механизмов диффузии [36]:

1. Объемная диффузия — перенос массы изнутри частицы.
2. Диффузия испарения — перенос массы через поры.
3. Поверхностная диффузия — перенос массы вдоль поверхности из областей с высокой кривизной к областям с низкой кривизной.
4. Диффузия на границе частиц — перенос массы вдоль границы между частицами.

Следующая форма коэффициента диффузии позволяет учитывать различные механизмы диффузии в терминах фазового поля:

$$D = D_{\text{vol}} \phi(\rho) + D_{\text{vap}}(1 - \phi(\rho)) + D_{\text{surf}} \rho^2(1 - \rho^2) + D_{\text{gb}} \sum_{i < j} \eta_i \eta_j,$$

где

$$\phi(\rho) = \rho^3(10 - 15\rho + 6\rho^2).$$

Такой выбор функции ϕ искусственно сужает интерфейс фазового поля. Сужение используется потому, что в методе фазового поля толщина интерфейса может быть значительно больше реальной толщины диффузного интерфейса [37].

Коэффициенты D_{vol} , D_{vap} , D_{surf} , D_{gb} — константы, зависящие от диффузивности материала внутри частиц, в порах, на поверхности и на границе между частицами, соответственно.

2.2. Численные методы решения. Для решения уравнений в области Ω вводится регулярная прямоугольная сетка G . Пусть эта сетка имеет пространственные шаги h_m , $m = 1, 2, 3$. Обозначим целочисленные узлы — $(x_m)_j = h_m j$, а полуцелочисленные — $(x_m)_{j+1/2} = h_m(j + 1/2)$. Так как на границе заданы периодические условия, то, предполагая что $X_m^{\min} = j_m^{\min} h_m$ и $X_m^{\max} = (j_m^{\max} + 1) h_m$,

$$\begin{aligned} (x_m)_{j_m^{\min}-1} &= (x_m)_{j_m^{\max}}, \\ (x_m)_{j_m^{\max}+1} &= (x_m)_{j_m^{\min}}. \end{aligned}$$

Для краткости значения компонент решения в узлах обозначаются следующим образом:

$$\begin{aligned} g_{j_1 j_2 j_3} &= g((x_1)_{j_1}, (x_2)_{j_2}, (x_3)_{j_3}), \\ g_{j_1+1/2 j_2 j_3} &= g((x_1)_{j_1+1/2}, (x_2)_{j_2}, (x_3)_{j_3}), \\ g_{j_1 j_2+1/2 j_3} &= g((x_1)_{j_1}, (x_2)_{j_2+1/2}, (x_3)_{j_3}), \\ g_{j_1 j_2 j_3+1/2} &= g((x_1)_{j_1}, (x_2)_{j_2}, (x_3)_{j_3+1/2}). \end{aligned}$$

Применяя конечно-разностную схему второго порядка для аппроксимации пространственных производных и метод Эйлера для аппроксимации производных по времени, из (1)–(4) получаем схему:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{j_1 j_2 j_3}^{n+1} - \rho_{j_1 j_2 j_3}^n}{\tau} &= -(\mathbf{D}_1^{c_2} [J_1]_{j_1 j_2 j_3} + \mathbf{D}_2^{c_2} [J_2]_{j_1 j_2 j_3} + \mathbf{D}_3^{c_2} [J_3]_{j_1 j_2 j_3}), \\ (J_1)_{j_1+1/2 j_2 j_3}^n &= -D_{j_1+1/2 j_2 j_3}^n \mathbf{D}_1^{c_1} [\mu]_{j_1+1/2 j_2 j_3}, \\ (J_2)_{j_1 j_2+1/2 j_3}^n &= -D_{j_1 j_2+1/2 j_3}^n \mathbf{D}_2^{c_1} [\mu]_{j_1 j_2+1/2 j_3}, \\ (J_3)_{j_1 j_2 j_3+1/2}^n &= -D_{j_1 j_2 j_3+1/2}^n \mathbf{D}_3^{c_1} [\mu]_{j_1 j_2 j_3+1/2}, \\ \mu_{j_1 j_2 j_3}^n &= \frac{\partial f}{\partial \rho} \left(\rho_{j_1 j_2 j_3}^n, (\eta_1)_{j_1 j_2 j_3}^n, \dots, (\eta_I)_{j_1 j_2 j_3}^n \right) - \beta_\rho \mathbf{L}[\rho]_{j_1 j_2 j_3}^n, \\ \frac{(\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^{n+1} - (\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n}{\tau} &= -L \left[\frac{\partial f}{\partial \eta_i} \left(\rho_{j_1 j_2 j_3}^n, (\eta_1)_{j_1 j_2 j_3}^n, \dots, (\eta_I)_{j_1 j_2 j_3}^n \right) - \beta_\eta \mathbf{L}[\eta_i]_{j_1 j_2 j_3}^n \right], \end{aligned} \quad (6)$$

$$1 \leq i \leq I,$$

$$j_m^{\min} \leq j_m \leq j_m^{\max},$$

где дифференциальные операторы аппроксимируются как

$$\mathbf{L}[g]_{j_1 j_2 j_3} = \mathbf{D}_1^2[g]_{j_1 j_2 j_3} + \mathbf{D}_2^2[g]_{j_1 j_2 j_3} + \mathbf{D}_3^2[g]_{j_1 j_2 j_3},$$

$$D_1^2[g]_{j_1 j_2 j_3} = \frac{g_{j_1+1 j_2 j_3} - 2g_{j_1 j_2 j_3} + g_{j_1-1 j_2 j_3}}{h_1^2} = \frac{\partial^2 g}{\partial x_1^2} \Big|_{j_1 j_2 j_3} + O(h_1^2),$$

$$D_1^{c2}[g]_{j_1 j_2 j_3} = \frac{g_{j_1+1 j_2 j_3} - g_{j_1-1/2 j_2 j_3}}{h_1} = \frac{\partial g}{\partial x_1} \Big|_{j_1 j_2 j_3} + O(h_1^2),$$

$$D_1^{c1}[g]_{j_1+1/2 j_2 j_3} = \frac{g_{j_1+1 j_2 j_3} - g_{j_1 j_2 j_3}}{h_1} = \frac{\partial g}{\partial x_1} \Big|_{j_1+1/2 j_2 j_3} + O(h_1^2).$$

Операторы, аппроксимирующие производные по другим пространственным направлениям, получаются из представленных перестановкой пространственных индексов.

Для вычисления производных плотности локальной свободной химической энергии и коэффициента диффузии используются следующие выражения:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)_{j_1 j_2 j_3}^n = 2A\rho_{j_1 j_2 j_3}^n (1 - \rho_{j_1 j_2 j_3}^n)(1 - 2\rho_{j_1 j_2 j_3}^n) +$$

$$+ B \left[2\rho_{j_1 j_2 j_3}^n - 6 \sum_i ((\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n)^2 + 4 \sum_i ((\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n)^3 \right],$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \eta_i}\right)_{j_1 j_2 j_3}^n = 12B(\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n \left[1 - \rho_{j_1 j_2 j_3}^n - (2 - \rho_{j_1 j_2 j_3}^n)(\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n + \sum_i ((\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n)^2 \right],$$

$$D_{j_1+1/2 j_2 j_3}^n = \frac{D_{j_1+1 j_2 j_3}^n + D_{j_1 j_2 j_3}^n}{2},$$

$$D_{j_1 j_2 j_3}^n = D_{\text{vol}} \phi(\rho_{j_1 j_2 j_3}^n) + D_{\text{vap}}(1 - \phi(\rho_{j_1 j_2 j_3}^n)) + D_{\text{surf}}(\rho_{j_1 j_2 j_3}^n)^2(1 - (\rho_{j_1 j_2 j_3}^n)^2) +$$

$$+ \frac{D_{\text{gb}}}{2} \left[\left(\sum_i (\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n \right)^2 - \sum_i ((\eta_i)_{j_1 j_2 j_3}^n)^2 \right].$$

3. Особенности алгоритмической реализации.

3.1. Изменения в разностной схеме. В случае если I велико, $\eta_i = 0$ в большей части области Ω . Поэтому для каждого параметра η_i вводится прямоугольная область $\Omega_i = [X_{i1}^{\min}, X_{i1}^{\max}] \times [X_{i2}^{\min}, X_{i2}^{\max}] \times [X_{i3}^{\min}, X_{i3}^{\max}]$, для которой выполняется $\text{supp}(\eta_i) \subseteq \Omega_i \subseteq \Omega$. На границе области задано условие Дирихле:

$$\eta_i|_{\partial\Omega_i} = 0.$$

Такая постановка задачи вносит следующие изменения. Предположим, что Ω_i выбрана так, чтобы целочисленные узлы G лежали на границе, т. е. $X_{im}^{\min} = (j_i)_{im}^{\min} h_m$ и $X_{im}^{\max} = (j_i)_{im}^{\max} h_m$. Тогда в уравнении (6) для каждого из значений i пространственные индексы меняются в пределах

$$(j_i)_{im}^{\min} + 1 \leq j_m \leq (j_i)_{im}^{\max} - 1,$$

а во всех остальных узлах значение η_i считается равным 0. Обозначим через $G_i \subseteq G$ сетку, состоящую из тех узлов, которые находятся внутри области Ω_i .

Перейдем к программной реализации схемы. Для удобства считаем, что индексы узлов сетки G находятся в пределах $0 \leq j_1 \leq k_1$, $0 \leq j_2 \leq k_2$, $0 \leq j_3 \leq k_3$, а индексы узлов G_i лежат в пределах $k_{i1}^{\min} \leq j_1 \leq k_{i1}^{\max}$, $k_{i2}^{\min} \leq j_2 \leq k_{i2}^{\max}$, $k_{i3}^{\min} \leq j_3 \leq k_{i3}^{\max}$.

Положим, что значения ρ на сетке G хранятся в области памяти размера $(k_1 + 1) \times (k_2 + 1) \times (k_3 + 1)$. Значение элемента массива с индексом $\tilde{j} = (\tilde{j}_1, \tilde{j}_2, \tilde{j}_3)$ равно значению ρ в узле $\mathbf{j} = (j_1, j_2, j_3)$. Значения η_i на сетке G_i хранятся в массиве размера $(k_{i1}^{\max} - k_{i1}^{\min} + 1) \times (k_{i2}^{\max} - k_{i2}^{\min} + 1) \times (k_{i3}^{\max} - k_{i3}^{\min} + 1)$. В этом случае значение элемента массива с индексом $\tilde{j} = (\tilde{j}_1, \tilde{j}_2, \tilde{j}_3)$ равно значению η_i в узле $\mathbf{j} + \mathbf{k}_i = (j_1 + k_{i1}^{\min}, j_2 + k_{i2}^{\min}, j_3 + k_{i3}^{\min})$. Таким образом установлено взаимно однозначное соответствие между узлами расчетной области и элементами массивов. В листингах алгоритмов 1 и 2 показано использование этого соответствия для вычисления параметров.



Алгоритм 1. Вычисление $\sum_i \eta_i$

Algorithm 1. Computation $\sum_i \eta_i$

```

1: for all  $j$  do
2:    $(\sum_i \eta_i)_{\tilde{j}} = 0$ 
3: end for
4: for  $i = 1$  to  $N$  do
5:   for all  $j_i$  do
6:      $\tilde{j} \leftarrow \tilde{j}_i - \mathbf{k}_i$ 
7:      $(\sum_i \eta_i)_{\tilde{j}} += (\eta_i)_{\tilde{j}_i}$ 
8:   end for
9: end for
    
```

▷ j — узел G
 ▷ j_i — узел сетки G_i

Алгоритм 2. Эволюция η_i

Algorithm 2. Эволюция η_i

```

1: for  $i = 1$  to  $N$  do
2:   for all  $j_i$  do
3:      $\tilde{j} \leftarrow \tilde{j}_i - \mathbf{k}_i$ 
4:      $(\eta_i)_{\tilde{j}_i}^{n+1} = (\eta_i)_{\tilde{j}_i}^n - \tau L \left[ \frac{\partial f}{\partial \eta_i} \left( \rho_{\tilde{j}}^n, (\eta_i)_{\tilde{j}_i}^n \right) - \beta_\eta \mathbf{L}[\eta_i]_{\tilde{j}_i}^n \right]$ 
5:   end for
6: end for
    
```

▷ j_i — узел сетки G_i

Величина $\sum_i \eta_i^2$ вычисляется аналогично.

Затраты вычислительных ресурсов при вычислении $\sum_{i < j} \eta_i \eta_j$ позволяют снизить следующее выражение:

$$\sum_{i < j} \eta_i \eta_j = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i \eta_i \right)^2 - \sum_i \eta_i^2 \right].$$

3.2. Отслеживание областей. В процессе эволюции уравнений происходит рост и смещение частиц, поэтому время от времени нужно заново выбирать области Ω_i и изменять размеры областей памяти, в которых хранятся значения параметров η_i .

Обозначим минимальное из расстояний от частицы i до плоскостей, образующих Ω_i — $mindist_i$, а максимальное — $maxdist_i$.

Алгоритм, который отслеживает расстояния от частиц до $\partial\Omega_i$ и изменяет размер этих областей, состоит из следующих шагов:

1. Инициализация: области Ω_i выбираются так, чтобы $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$.
2. Проверка: каждые T_r единиц модельного времени области проверяются на условие $mindist_i > F_{min}$.
3. Увеличение размера: размер областей, для которых не выполняется $mindist_i > F_{min}$, увеличивается так, чтобы $mindist_i = F_{start}$.
4. Изменение размера всех областей: каждые T_{fr} единиц модельного времени размеры всех областей Ω_i изменяются так, чтобы $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$.

Таким образом, алгоритм зависит от четырех параметров: $F_{min}, T_r, F_{start}, T_{fr}$. Причем только первые два зависят от физических параметров модели. Если считать границей частицы уровень $\eta_i = 0.5$, то F_{min} должен быть не меньше половины ширины интерфейса фазового поля. Иначе не весь интерфейс окажется в области Ω_i . Ограничения для параметра T_r можно найти из следующей оценки для нормальной скорости границы частицы [38]:

$$v_\eta = -L\beta_\eta \kappa_b,$$

где κ_b — кривизна поверхности частицы. Если частицы имеют форму шара радиуса R , то получаем оценку:

$$T_r < \frac{F_{\min} R^2}{L \beta_\eta}.$$

3.3. Особенности параллелизации с использованием GPU. Данную разностную схему можно параллелизовать с использованием GPU. На каждом шаге по времени параметры μ, D, J, ρ вычисляются последовательно. Рассмотрим вычисление μ , его значение в узле сетки на шаге $n + 1$ зависит только от значений с шага n . Поэтому его значения в узлах сетки могут быть вычислены параллельно, независимо друг от друга. Аналогичная ситуация с параметрами D, J, ρ , их значения на шаге $n + 1$ зависят от значений с шага n и уже вычисленных (последовательно) значений параметров.

Отдельно стоит рассмотреть вычисление сумм и эволюции η_i . В алгоритмах 1 и 2 параллельно выполняется внутренний цикл по j , а внешний цикл по i выполняется последовательно. В первом случае это вызвано тем, что для различных значений i происходит запись в одну и ту же ячейку памяти. Во втором случае это сделано для упрощения реализации параллельного алгоритма.

4. Результаты. Для симуляции были использованы четыре набора параметров: W, A_1, A_2 и A_3 , они приведены в табл. 1. Первый из них — обезразмеренные параметры из [28].

Остальные наборы параметров основаны на физических значениях поверхностной энергии γ_s , граничной энергии γ_{gb} , молярного объема V_m и коэффициентов диффузии $D_{vol}^p, D_{vap}^p, D_{surf}^p, D_{gb}^p$ для оксида алюминия [32]. Параметры модели получаются из физических величин с помощью следующих выражений [37]:

$$\begin{aligned} A &= \frac{12\gamma_s - 7\gamma_{gb}}{l}, & B &= \frac{\gamma_{gb}}{l}, \\ \beta_\rho &= 0.75 l (2\gamma_s - \gamma_{gb}), & \beta_\eta &= 0.75 l \gamma_{gb}, \\ D_{surf} &= \frac{\gamma_s D_{surf}^p V_m \delta}{\beta_\rho RT}, & L &= \frac{\gamma_{gb} D_a^p V_m}{\beta_\eta RT l}, \end{aligned} \tag{7}$$

где $D_a^p = 0.5 D_{gb}^p$ — коэффициент диффузии атомов сквозь границу между частицами, D_{vol}, D_{vap}, D_{gb} вычисляются аналогично D_{surf} , T — температура спекания, R — газовая постоянная, δ — толщина физического диффузного интерфейса (порядка 1 нм), а l — толщина интерфейса в модели.

Если задать $l = \delta$, то для разрешения интерфейса на сетке необходимо использовать пространственный шаг $h < 1$ нм, из-за чего становится невозможным моделирование на мезомасштабе. Но совпадение толщины интерфейса фазового поля и физического интерфейса не является необходимым, задать интерфейс большего размера, не изменяя при этом динамику процесса, позволяют выражения для параметров модели (7). Подробнее об этом можно узнать в [39].

Таблица 1. Параметры модели

Table 1. Simulation parameters

	W	A ₁	A ₂	A ₃
A	16	4.933	7.733	7.733
B	1	0.667	0.267	0.267
β_ρ	10	17.5	25	25
β_η	1	12.5	5	5
L	10	0.203	0.129	0.129
D_{vol}	0.01	$5.559 \cdot 10^{-5}$	$7.759 \cdot 10^{-5}$	$3.103 \cdot 10^{-5}$
D_{vap}	0.001	$2.779 \cdot 10^{-5}$	$3.879 \cdot 10^{-5}$	$1.552 \cdot 10^{-5}$
D_{surf}	4	$5.559 \cdot 10^{-2}$	$7.759 \cdot 10^{-2}$	$3.103 \cdot 10^{-2}$
D_{gb}	0.4	$5.559 \cdot 10^{-2}$	$7.759 \cdot 10^{-2}$	$3.103 \cdot 10^{-2}$
$h_1 = h_2 = h_3 = h$	1	1	1	1
τ	0.001	0.05	0.01	0.05



Таблица 2. Физические параметры
 Table 2. Physical parameters

	\mathbb{A}_1	\mathbb{A}_2	\mathbb{A}_3
γ_s	0.8		
γ_{gb}	0.667	0.267	
D_{vol}^p	$1 \cdot 10^{-14}$		
D_{vap}^p	$0.5 \cdot 10^{-14}$		
D_{surf}^p	$1 \cdot 10^{-11}$		
D_{gb}^p	$1 \cdot 10^{-11}$		
$h_1 = h_2 = h_3 = h$	$3.125 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-8}$	$2.5 \cdot 10^{-8}$
τ	$3.23 \cdot 10^{-3}$	$1.35 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-3}$
T	1708.15		
δ	$1 \cdot 10^{-9}$		
V_m	$25.5 \cdot 10^{-6}$		
l	$5h = 15.625 \cdot 10^{-8}$	$5h = 5 \cdot 10^{-8}$	$5h = 12.5 \cdot 10^{-8}$

Далее параметры модели были обезразмерены согласно следующим формулам:

$$\begin{aligned}
 A^* &= Al, & B^* &= Bl, \\
 \beta_\rho^* &= \frac{\beta_\rho l}{h_1^2}, & \beta_\eta^* &= \frac{\beta_\eta l}{h_1^2}, \\
 D_{surf}^* &= \frac{D_{surf}}{Lh_1^2 A l}, & L^* &= \frac{1}{A l}, \\
 \tau^* &= LA\tau, & h_1^* &= 1, \\
 h_2^* &= \frac{h_2}{h_1}, & h_3^* &= \frac{h_3}{h_1},
 \end{aligned}$$

Значения физических параметров приведены в табл. 2. Отметим, что хоть l и не является физическим параметром, он также находится в этой таблице для удобства.

Каждый из экспериментов проводился в двух вариантах: в первом, обозначим его \mathbb{S} , η_i вычислялись на всей сетке G , т.е. использовалась схема без модификаций, описанных в разделе 3, во втором, \mathbb{T} , эти модификации использовались. Далее будем обозначать конфигурацию эксперимента парой, состоящей из используемого алгоритма и набора параметров, например (\mathbb{S}, \mathbb{W}) .

В дальнейшем, говоря об абсолютной или относительной погрешности какой-либо величины, мы считаем ее истинным значением величину, полученную с помощью алгоритма \mathbb{S} для соответствующих параметров.

Все эксперименты выполнены на устройстве с процессором Intel Xeon E5 2697 v3 и ускорителем NVIDIA K40.

4.1. Спекание двух одинаковых шарообразных частиц. Одним из распространенных тестов для моделей спекания является задача спекания двух одинаковых шарообразных частиц, касающихся друг друга [28, 32]. В процессе спекания между частицами формируется перешеек. Чтобы модель соответствовала физическому процессу, отношение диаметра перешейка X к диаметру частиц D должно иметь степенную зависимость от времени [28]:

$$\frac{X}{D} = Kt^n,$$

причем значение параметра n зависит от доминирующего механизма диффузии.

Для конфигураций (\mathbb{S}, \mathbb{W}) и (\mathbb{T}, \mathbb{W}) (рис. 2) использовалась сетка размера $120 \times 120 \times 200$. Радиус частиц — 40. Моделирование происходило на протяжении $5 \cdot 10^6$ шагов по времени.

На шагах с номерами $\{1, 2, \dots, 9, 10, 20, \dots, 100, 200, \dots, 5 \cdot 10^6\}$ измерялся диаметр перешейка между частицами (итого 59 значений). По полученным значениям методом наименьших квадратов были подобраны параметры для зависимости вида

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

Добавление члена C вызвано тем, что разрешающая способность дискретной сетки не позволяет задать касание частиц в начальный момент времени. На рис. 3 изображен рост перешейка и полученная кривая для (T, W) . Значение $n = 0.219$ близко к одной из возможных оценок для поверхностной диффузии [40].

График для (S, W) мы не приводим, поскольку абсолютная погрешность размера перешейка не превышает 10^{-14} . Более того, абсолютная погрешность ρ не превышает 10^{-12} .

Для конфигураций (S, A_1) и (T, A_1) (рис. 4) также использовалась сетка размера $120 \times 120 \times 200$ и было проведено $5 \cdot 10^6$ временных итераций, что соответствует 4.5 часам физического времени. Радиус частиц равнялся 40 пространственным шагам или 1.25 мкм. Как и в предыдущем случае, построена зависимость диаметра перешейка от времени (рис. 5). Значение параметра $n = 0.172$ соответствует оценке для диффузии на границе зерен [40]. Погрешности размера перешейка и ρ равны 10^{-4} и 10^{-3} соответственно.

Параметры для алгоритма отслеживания областей имели следующие значения:

$$F_{\min} = 5h, \quad T_r = 10000\tau, \\ F_{\text{start}} = 10h, \quad T_{\text{fr}} = 100000\tau.$$

В предыдущих экспериментах граница между частицами остается неподвижной, а размеры частиц меняются незначительно, следовательно изменение размеров сеток не происходит. Поэтому единственным важным параметром является F_{start} . Найденные погрешности позволяют считать, что при $F_{\text{start}} = 10h_1$ модификация схемы незначительно влияет на решение.

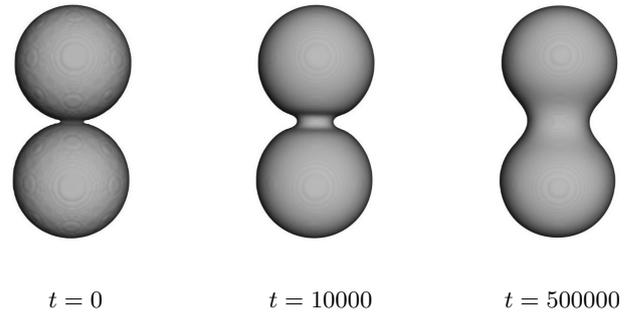


Рис. 2. Рост перешейка между двумя частицами, конфигурация (T, W)

Fig. 2. Neck growth between two particles, configuration (T, W)

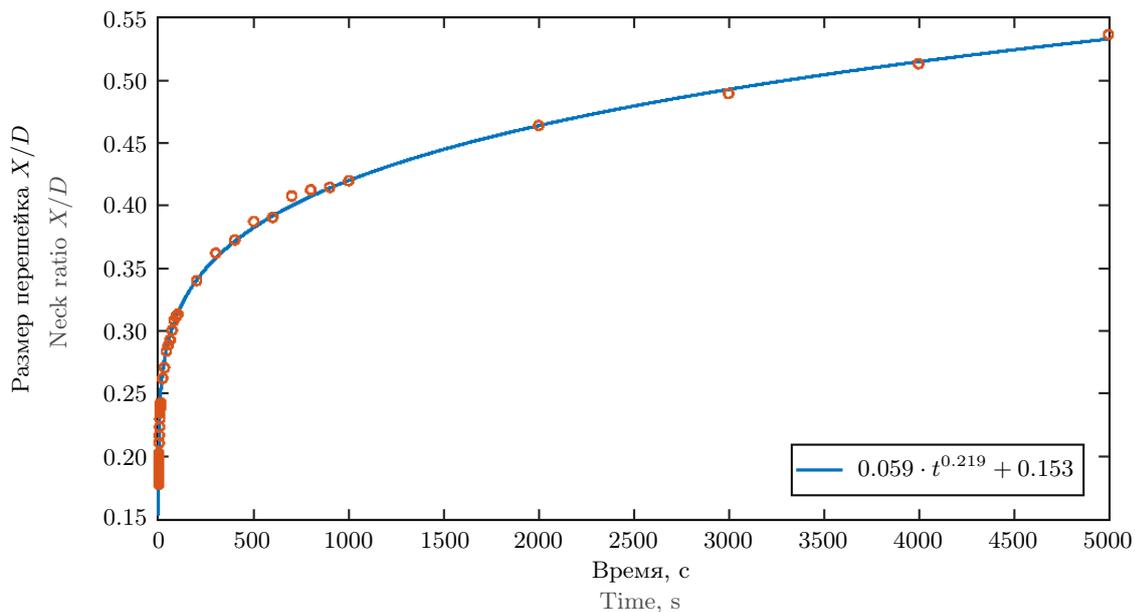


Рис. 3. Зависимость диаметра перешейка от времени для конфигурации (T, W)

Fig. 3. Time dependence of neck diameter for configuration (T, W)

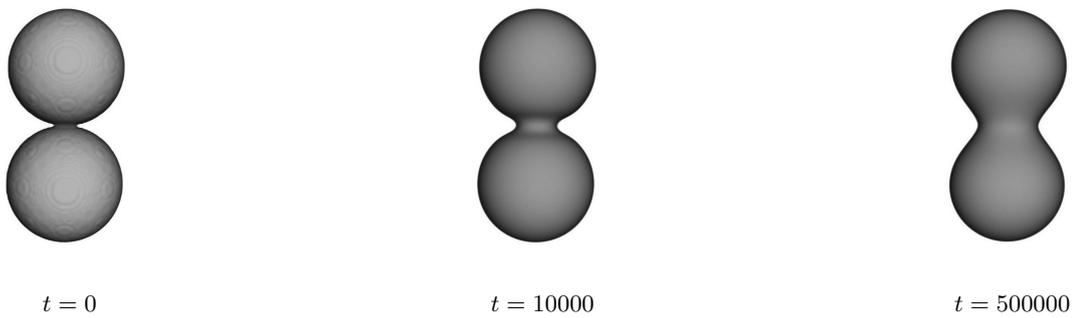


Рис. 4. Рост перешейка между двумя частицами, конфигурация (T, A_1)
Fig. 4. Neck growth between two particles, configuration (T, A_1)

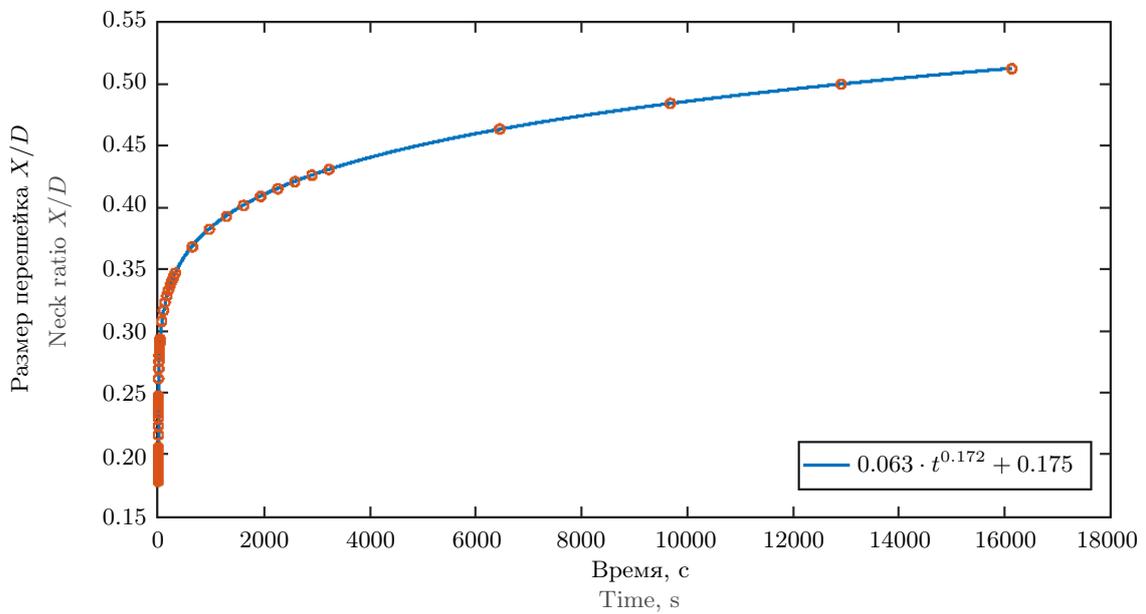


Рис. 5. Зависимость диаметра перешейка от времени для конфигурации (T, A_1)
Fig. 5. Time dependence of neck diameter for configuration (T, A_1)

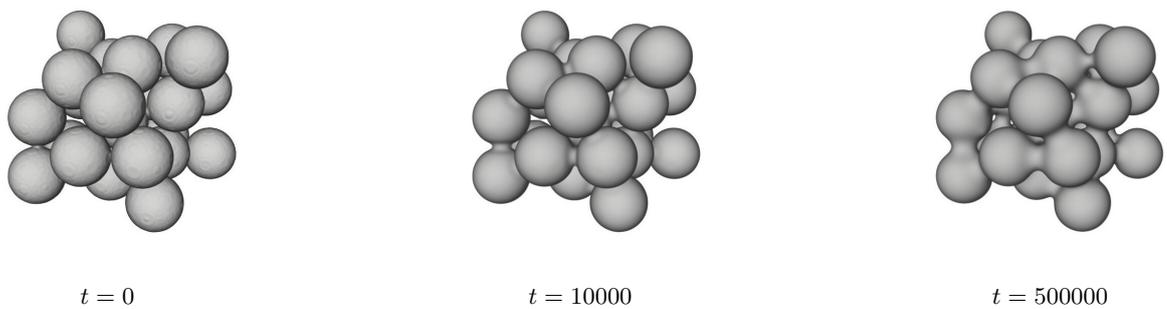


Рис. 6. Спекание упаковки из 25 частиц, конфигурация (T, A_2)
Fig. 6. Sintering of 25 spheres packing, configuration (T, A_2)

4.2. Спекание упаковки из 25 одинаковых шарообразных частиц. Одним из ключевых параметров сорбента является сорбционная емкость, которая зависит от площади поверхности. В процессе спекания, как при производстве сорбента, так и во время его эксплуатации (в течение циклов сорбции/регенерации), емкость сорбента падает [41]. В данном разделе представлены результаты моделирования спекания 10 упаковок из 25 одинаковых частиц, проведено сравнение полученных значений удельной площади поверхности для различных конфигураций. Выражение для удельной площади:

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

где S — площадь поверхности, V_{Ω} — объем области, в которой проводилось моделирование.

Все упаковки получены с помощью алгоритма Любачевского–Стиллинджера [42], для вычисления площади поверхности использовалась формула Крофтона [43].

Для каждой из 10 упаковок было проведено 4 эксперимента, по одному для каждой из конфигураций: (S, W), (T, W), (S, A₂), (T, A₂) (рис. 6). Во всех экспериментах размер сетки был равен 200×200×200, радиус частиц составлял 25 пространственных шагов (250 нм для параметров A₂), а моделирование проводилось на протяжении 500000 временных итераций (6.75 с для параметров A₂).

Значения SSA для конфигураций (T, W) и (T, A₂) представлены на рис. 7, 8 соответственно. С увеличением времени площадь поверхности уменьшается, причем быстрее всего площадь падает на начальном этапе. Относительные погрешности SSA для конфигураций (T, W) и (T, A₂) равны $8 \cdot 10^{-4}$.

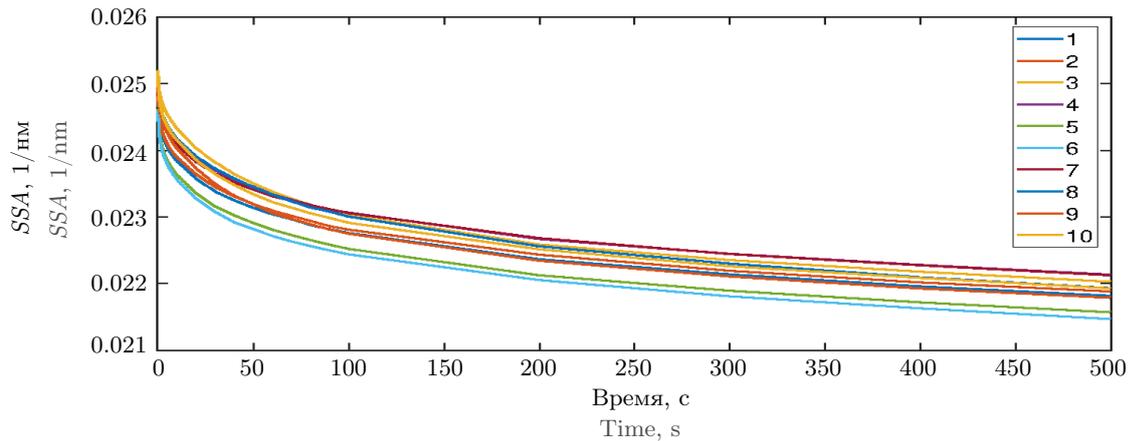


Рис. 7. Зависимость SSA от времени для конфигурации (T, W)

Fig. 7. Time dependence of SSA for configuration (T, W)

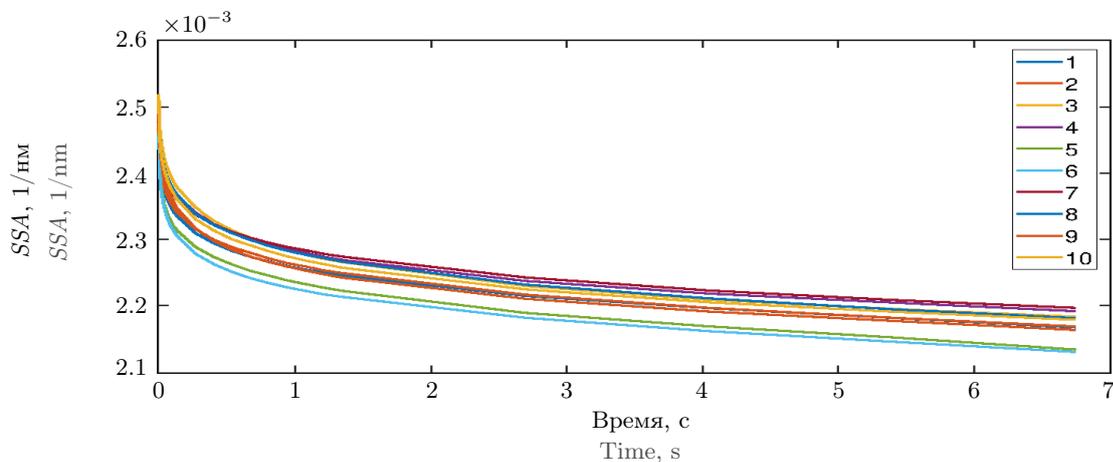


Рис. 8. Зависимость SSA от времени для конфигурации (T, A₂)

Fig. 8. Time dependence of SSA for configuration (T, A₂)



Параметры для алгоритма отслеживания областей имели следующие значения:

$$F_{\min} = 5h, \quad T_r = 100\tau,$$

$$F_{\text{start}} = 10h, \quad T_{\text{fr}} = 1000\tau.$$

Мы измерили время работы алгоритма для каждого эксперимента и усреднили полученные значения по конфигурациям (табл. 3). С помощью алгоритма отслеживания областей удалось уменьшить затраты машинного времени более чем в 6 раз.

4.3. Спекание большого количества частиц.

В данном разделе описаны результаты моделирования спекания упаковки из 4302 частиц с конфигурацией (Т, А₃) (рис. 9). С помощью алгоритма Любачевского–Стилинджера [42] мы получили упаковку с плотностью 0.55, затем мы смоделировали начальный этап спекания путем увеличения радиуса в 1.2 раза, как описано в [41]. Таким образом была получена упаковка с плотностью 0.856. Это было сделано для того, чтобы уделить больше внимания процессу роста зерен, возникающему на поздних этапах спекания [40].

Моделирование проводилось на сетке размера 320 × 320 × 320 на протяжении 500000 временных итераций, что соответствует 527 секундам. Радиус частиц — 10 пространственных шагов или 250 нм.

В процессе моделирования были измерены пористость и SSA. Так как более интересным показателем является площадь внутренних пор, а не внешней поверхности, мы использовали метод, описанный в [32]. От куба, в который упакованы сферы, был сделан отступ внутрь, равный одному радиусу сферы, и уже в этом меньшем кубе измерялись пористость (рис. 10) и SSA (рис. 11). В процессе спекания пористость падает практически равномерно, а SSA быстро уменьшается в первые 50 с и затем почти не меняется.

Таблица 3. Замеры времени

Table 3. Time measurements

Конфигурация Configuration	Время работы Time	Ускорение Speed-up
(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	

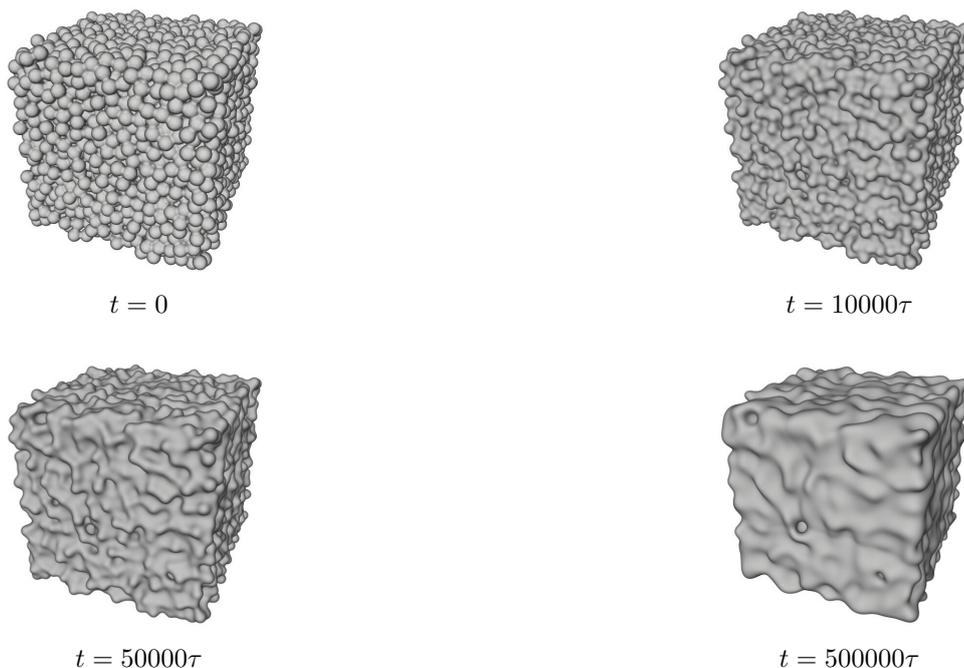


Рис. 9. Спекание упаковки из 4302 частиц, конфигурация (Т, А₃)

Fig. 9. Sintering of 4302 spheres packing, configuration (T, A₃)

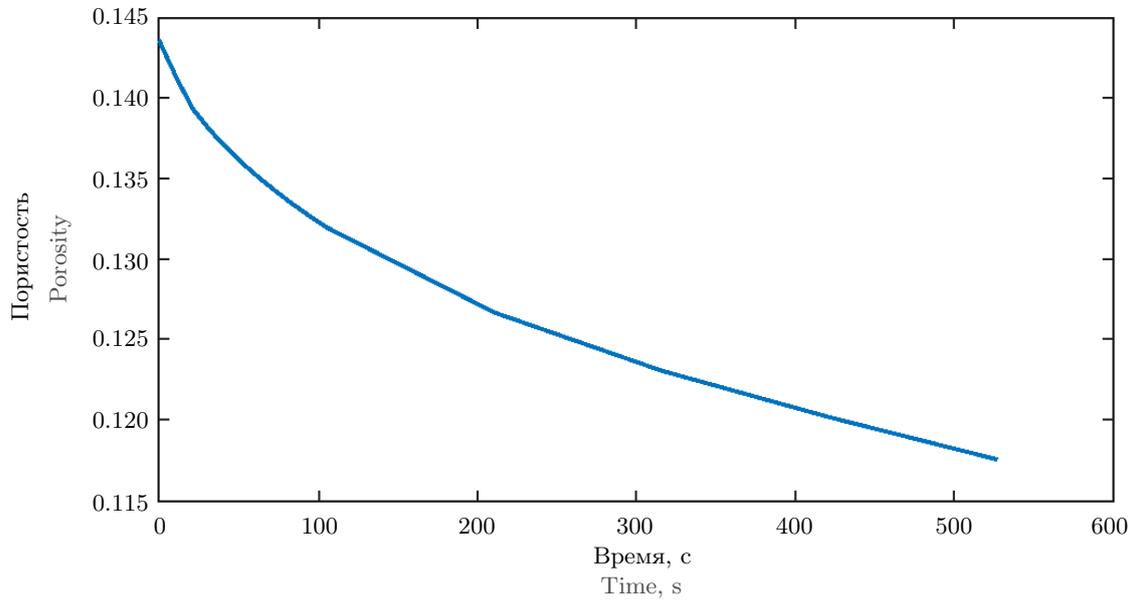


Рис. 10. Зависимость пористости от времени для упаковки из 4302 сфер
Fig. 10. Time dependence of porosity for packing of 4302 spheres

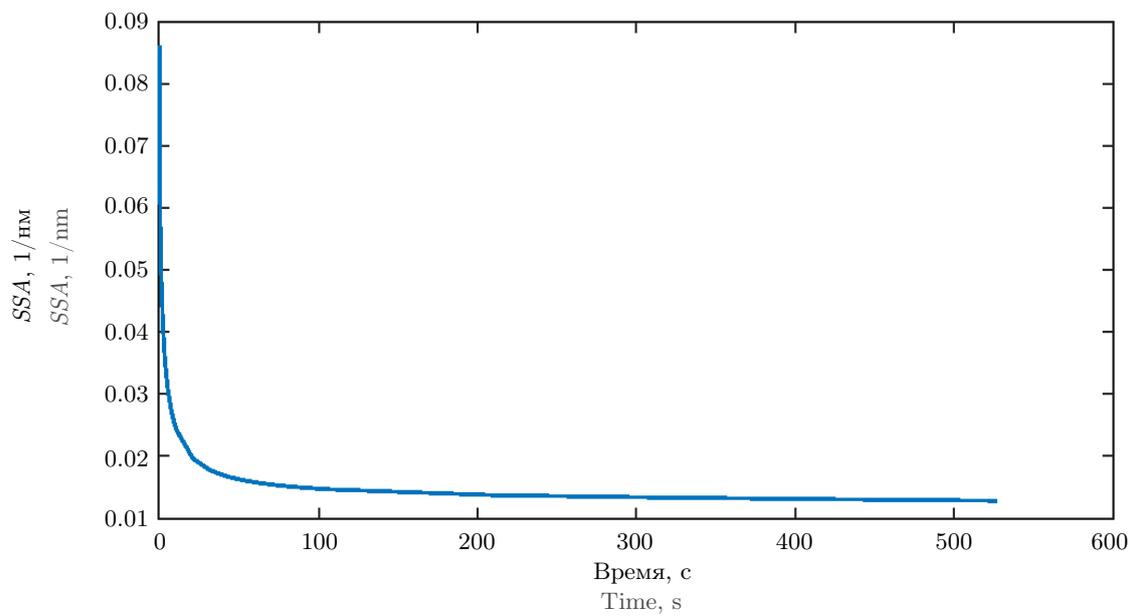


Рис. 11. Зависимость SSA от времени для упаковки из 4302 сфер
Fig. 11. Time dependence of SSA for packing of 4302 spheres

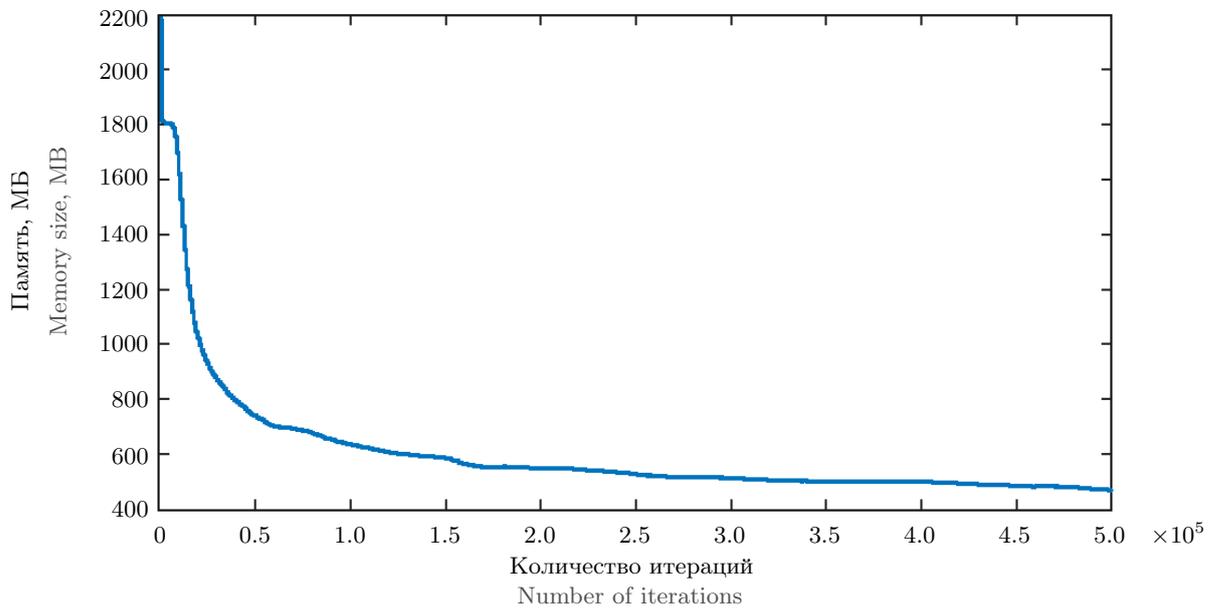


Рис. 12. Память, необходимая для хранения η_i
Fig. 12. Memory required for η_i storage

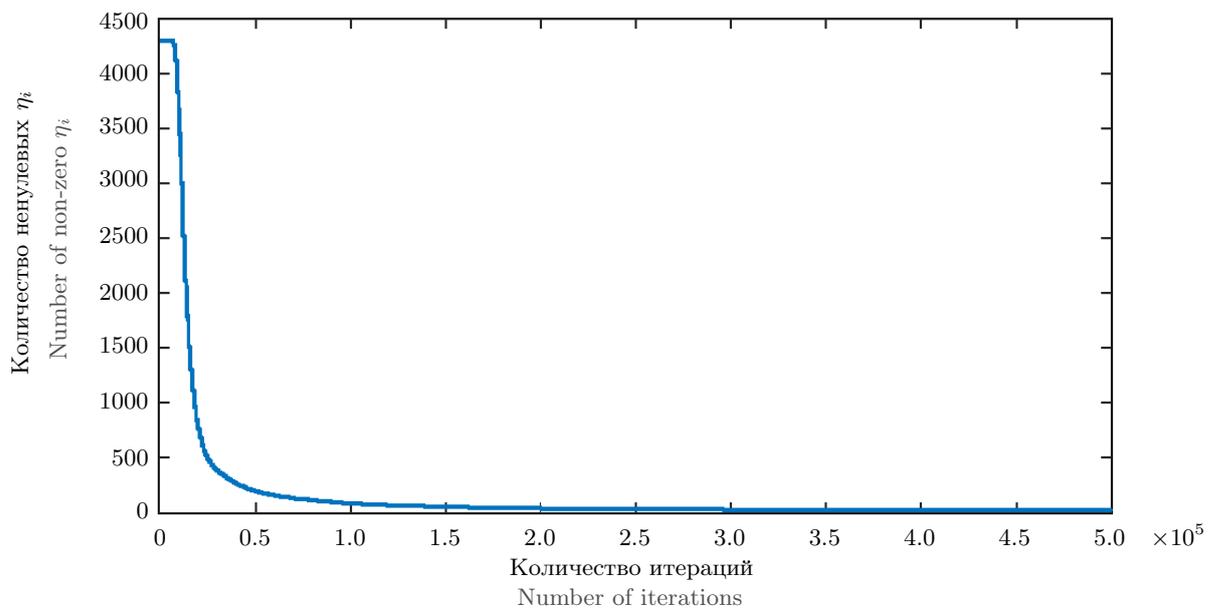


Рис. 13. Количество ненулевых η_i
Fig. 13. Number of non-zero η_i

В алгоритме отслеживания использовались следующие значения параметров:

$$\begin{aligned}F_{\min} &= 5h, & T_r &= 100\tau, \\F_{\text{start}} &= 10h, & T_{\text{fr}} &= 1000\tau.\end{aligned}$$

Каждые 100 итераций (т.е. при каждом изменении размеров областей) мы измеряли количество памяти, необходимое для хранения значений η_i . Затраты памяти снижаются в три раза после 50000 итераций (рис. 12), а за все время работы алгоритма объем памяти снижается с 2.2 ГБ до 0.5 ГБ (для вычислений использовались 64-битные вещественные числа). А количество ненулевых η_i в конечном итоге уменьшается до 22 (рис. 13).

Сравнение с конфигурацией $(\mathbb{S}, \mathbb{A}_3)$ не приводится, так как для вычислений потребовалось бы больше 1 ТБ памяти.

В [29] предложен подход, согласно которому в каждом узле сетки хранится I_c значений η_i . Авторы [29] полагают значение $I_c = 6$ наилучшим для трехмерного моделирования. При таком значении параметра I_c потребуется 1.57 ГБ памяти для хранения η_i в данном эксперименте, что меньше, чем необходимо нашему алгоритму на старте. Но начиная с итерации 11100, т.е. для 97.8% от общего числа итераций, затраты памяти для алгоритма отслеживания областей становятся меньше, чем для алгоритма из [29].

На проведение данного эксперимента потребовалось 22 ч 24 мин.

5. Заключение. В работе представлен алгоритм для моделирования спекания упаковок, состоящих из большого числа зерен с различными кристаллографическими ориентациями. Показано, что использование алгоритма позволяет значительно ускорить вычисления, не теряя качества результатов. Помимо этого, становится возможным существенно снизить затраты компьютерной памяти, что особенно важно при вычислениях на GPU.

В качестве дальнейшей работы мы планируем: во-первых, использовать алгоритм для моделирования спекания частиц оксида иттрия, которые имеют прямоугольную форму [44], а во-вторых, модифицировать алгоритм так, чтобы учитывать адвекционный член, описанный в [28].

Д. И. Прохоров реализовал алгоритм отслеживания областей, и Я. В. Базайкин выполнил валидацию модели при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант 21–71–20003). В. В. Лисица осуществил численные эксперименты по спеканию при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание 0331–2019–0008). Для выполнения расчетов были использованы вычислительные ресурсы Суперкомпьютерного Центра “Политехнический” (<https://research.spbstu.ru/skc/>).

Список литературы

1. Tanaka H. Sintering of silicon carbide and theory of sintering // Journal of the Ceramic Society of Japan. 2002. **110**, N 1286. 877–883. doi 10.2109/jcersj.110.877.
2. Poetschke J., Richter V., Gestrich T., Michaelis A. Grain growth during sintering of tungsten carbide ceramics // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2014. **43**. 309–316. doi 10.1016/j.ijrmhm.2014.01.001.
3. Florin N., Fennell P. Synthetic CaO-based sorbent for CO₂ capture // Energy Procedia. 2011. **4**. 830–838. doi 10.1016/j.egypro.2011.01.126.
4. Bazaikin Ya.V., Malkovich E.G., Derevschikov V.S., Lysikov A.I., Okunev A.G. Evolution of sorptive and textural properties of CaO-based sorbents during repetitive sorption/regeneration cycles // Chemical Engineering Science. 2016. **152**. 709–716. doi 10.1016/j.ces.2016.06.064.
5. Bordia R.K., Kang S.-J.L., Olefsky E.A. Current understanding and future research directions at the onset of the next century of sintering science and technology // Journal of the American Ceramic Society. 2017. **100**, N 6. 2314–2352. doi 10.1111/jace.14919.
6. White R.E. An enthalpy formulation of the Stefan problem // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1982. **19**, N 6. 1129–1157. <https://www.jstor.org/stable/2157200>. Cited April 10, 2022.
7. Date A.W. A strong enthalpy formulation for the Stefan problem // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1991. **34**, N 9. 2231–2235. doi 10.1016/0017-9310(91)90049-K.
8. Tarwidi D., Pudjaprasetya S.R. Godunov method for Stefan problems with enthalpy formulations // East Asian Journal on Applied Mathematics. 2013. **3**, N 2. 107–119. doi 10.4208/eajam.030513.200513a.



9. Molins S., Trebotich D., Steefel C., Shen C. An investigation of the effect of pore scale flow on average geochemical reaction rates using direct numerical simulation // *Water Resources Research*. 2012. **48**, N 3. doi [10.1029/2011WR011404](https://doi.org/10.1029/2011WR011404). 24.
10. Molins S., Trebotich D., Yang L., Ajo-Franklin J., Ligocki T., Shen C., Steefel C. Pore-scale controls on calcite dissolution rates from flow-through laboratory and numerical experiments // *Environmental Science and Technology*. 2014. **48**, N 13. 7453–7460. doi [10.1021/es5013438](https://doi.org/10.1021/es5013438).
11. Steefel C.I., Lasaga A.C. A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems // *American Journal of Science*. 1994. **294**, N 5. 529–592. doi [10.2475/ajs.294.5.529](https://doi.org/10.2475/ajs.294.5.529).
12. Trebotich D., Adams M.F., Molins S., Steefel C., Shen C. High-resolution simulation of pore-scale reactive transport processes associated with carbon sequestration // *Computing in Science and Engineering*. 2014. **16**, N 6. 22–31. doi [10.1109/MCSE.2014.77](https://doi.org/10.1109/MCSE.2014.77).
13. Li X., Huang H., Meakin P. Level set simulation of coupled advection–diffusion and pore structure evolution due to mineral precipitation in porous media // *Water Resources Research*. 2008. **44**, N 12. doi [10.1029/2007WR006742](https://doi.org/10.1029/2007WR006742).
14. Li X., Huang H., Meakin P. A three-dimensional level set simulation of coupled reactive transport and precipitation/dissolution // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2010. **53**, N 13. 2908–2923. doi [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.01.044](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.01.044).
15. Osher S., Fedkiw R.P. Level set methods: an overview and some recent results // *Journal of Computational Physics*. 2001. **169**, N 2. 463–502. doi [10.1006/jcph.2000.6636](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6636).
16. Marella S., Krishnan S., Liu H., Udaykumar H.S. Sharp interface Cartesian grid method I: an easily implemented technique for 3D moving boundary computations // *Journal of Computational Physics*. 2005. **210**, N 1. 1–31. doi [10.1016/j.jcp.2005.03.031](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.031).
17. Mittal R., Iaccarino G. Immersed boundary methods // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2005. **37**, N 1. 239–261. doi [10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743).
18. Peskin C.S. Flow patterns around heart valves: a numerical method // *Journal of Computational Physics*. 1972. **10**, N 2. 252–271. doi [10.1016/0021-9991\(72\)90065-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(72)90065-4).
19. Sotiropoulos F., Yang X. Immersed boundary methods for simulating fluid–structure interaction // *Progress in Aerospace Sciences*. 2014. **65**. 1–21. doi [10.1016/j.paerosci.2013.09.003](https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2013.09.003).
20. Tseng Y.-H., Ferziger J.H. A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry // *Journal of Computational Physics*. 2003. **192**, N 2. 593–623. doi [10.1016/j.jcp.2003.07.024](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.07.024).
21. Гадьльшчина К.А., Хачкова Т.С., Лисица В.В. Численное моделирование химического взаимодействия флюида с горной породой // *Вычислительные методы и программирование*. 2019. **20**, № 4. 457–470. doi [10.26089/NumMet.v20r440](https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r440).
22. Prokhorov D., Lisitsa V., Khachkova T., Bazaikin Ya., Yongfei Y. Topology-based characterization of chemically-induced pore space changes using reduction of 3D digital images // *Journal of Computational Science*. 2022. **58**. doi [10.1016/j.jocs.2021.101550](https://doi.org/10.1016/j.jocs.2021.101550).
23. Munoz D.P., Bruchon J., Valdivieso F., Drapier S. Solid-state sintering simulation: surface, volume and grain-boundary diffusions // *Proc. ECCOMAS 2012: European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*. Vienna, Austria, September 10–14, 2012. https://www.researchgate.net/publication/235673306_Solid-state_sintering_simulation_Surface_volume_and_grain-boundary_diffusions. Cited April 10, 2022.
24. Smereka P. Semi-implicit level set methods for curvature and surface diffusion motion // *Journal of Scientific Computing*. 2003. **19**, N 1–3. 439–456. doi [10.1023/A:1025324613450](https://doi.org/10.1023/A:1025324613450).
25. Moelans N., Blanpain B., Wollants P. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution // *Calphad*. 2008. **32**, N 2. 268–294. doi [10.1016/j.calphad.2007.11.003](https://doi.org/10.1016/j.calphad.2007.11.003).
26. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *J. Chem. Phys.* 1958. **28**, N 2. 258–267. doi [10.1063/1.1744102](https://doi.org/10.1063/1.1744102).
27. Allen S.M., Cahn J.W. Ground state structures in ordered binary alloys with second neighbor interactions // *Acta Metallurgica*. 1972. **20**, N 3. 423–433. doi [10.1016/0001-6160\(72\)90037-5](https://doi.org/10.1016/0001-6160(72)90037-5).
28. Wang Yu.U. Computer modeling and simulation of solid-state sintering: a phase field approach // *Acta Materialia*. 2006. **54**, N 4. 953–961. doi [10.1016/j.actamat.2005.10.032](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.10.032).
29. Kim S.G., Kim D.I., Kim W.T., Park Y.B. Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth // *Phys. Rev. E*. 2006. **74**, N 6. doi [10.1103/PhysRevE.74.061605](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.061605).

30. Hötzer J., Jainta M., Steinmetz P., et al. Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification // *Acta Materialia*. 2015. **93**. 194–204. doi [10.1016/j.actamat.2015.03.051](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.03.051).
31. Zhang R., Chen Z., Fang W., Qu X. Thermodynamic consistent phase field model for sintering process with multiphase powders // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2014. **24**, N 3. 783–789. doi [10.1016/S1003-6326\(14\)63126-5](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(14)63126-5).
32. Hötzer J., Seiz M., Kellner M., Rheinheimer W., Nestler B. Phase-field simulation of solid state sintering // *Acta Materialia*. 2019. **164**, 184–195. doi [10.1016/j.actamat.2018.10.021](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.10.021).
33. Moelans N., Wendler F., Nestler B. Comparative study of two phase-field models for grain growth // *Computational Materials Science*. 2009. **46**, N 2, 479–490. doi [10.1016/j.commatsci.2009.03.037](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.03.037).
34. Cahn J.W. On spinodal decomposition // *Acta Metallurgica*. 1961. **9**, N 9. 795–801. doi [10.1016/0001-6160\(61\)90182-1](https://doi.org/10.1016/0001-6160(61)90182-1).
35. Fick A. Ueber diffusion // *Ann. Phys.* 1855. **170**, N 1. 59–86. doi [10.1002/andp.18551700105](https://doi.org/10.1002/andp.18551700105).
36. Гегузин Я.Е. Физика спекания. М.: Наука, 1984.
37. Ahmed K., Pakarinen J., Allen T., El-Azab A. Phase field simulation of grain growth in porous uranium dioxide // *Journal of Nuclear Materials*. 2014. **446**, N 1–3. 90–99. doi [10.1016/j.jnucmat.2013.11.036](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.11.036).
38. Spears M.A., Evans A.G. Microstructure development during final/intermediate stage sintering—II. Grain and pore coarsening // *Acta Metallurgica*. 1982. **30**, N 7. 1281–1289. doi [10.1016/0001-6160\(82\)90146-8](https://doi.org/10.1016/0001-6160(82)90146-8).
39. Shen C., Chen Q., Wen Y.H., Simmons J.P., Wang Y. Increasing length scale of quantitative phase field modeling of growth-dominant or coarsening-dominant process // *Scripta Materialia*. 2004. **50**, N 7. 1023–1028. doi [10.1016/j.scriptamat.2003.12.029](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2003.12.029).
40. German R.M. Sintering theory and practice. New York: Wiley, 1996.
41. Bazaikin Ya.V., Malkovich E.G., Prokhorov D.I., Derevschikov V.S. Detailed modeling of sorptive and textural properties of CaO-based sorbents with various porous structures // *Separation and Purification Technology*. 2021. **255**. doi [10.1016/j.seppur.2020.117746](https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117746).
42. Lubachevsky B.D., Stillinger F.H. Geometric properties of random disk packings // *J. Stat. Phys.* 1990. **60**. 561–583. doi [10.1007/BF01025983](https://doi.org/10.1007/BF01025983).
43. Liu Y.-S., Yi J., Zhang H., et al. Surface area estimation of digitized 3D objects using quasi-Monte Carlo methods // *Pattern Recognition*. 2010. **43**, N 11. 3900–3909. doi [10.1016/j.patcog.2010.06.002](https://doi.org/10.1016/j.patcog.2010.06.002).
44. Derevschikov V.S., Veselovskaya J.V., Kardash T.Yu., et al. Direct CO₂ capture from ambient air using K₂CO₃/Y₂O₃ composite sorbent // *Fuel*. 2014. **127**. 212–218. doi [10.1016/j.fuel.2013.09.060](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.09.060).

Поступила в редакцию
3 марта 2022 г.

Принята к публикации
2 апреля 2022 г.

Информация об авторах

Дмитрий Игоревич Прохоров — мл. научн. сотр., Институт математики имени С. Л. Соболева СО РАН, просп. Коптюга, 4, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Ярослав Владимирович Базайкин — д.ф.-м.н., заведующий лабораторией, Институт математики имени С. Л. Соболева СО РАН, просп. Коптюга, 4, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Вадим Викторович Лисица — д.ф.-м.н., заведующий лабораторией, Институт нефтегазовой геологии и геофизики имени А. А. Трофимука СО РАН, просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

References

1. H. Tanaka, “Sintering of Silicon Carbide and Theory of Sintering,” *J. Ceramic Soc. JAPAN* **110** (1286), 877–883 (2002). doi [10.2109/jcersj.110.877](https://doi.org/10.2109/jcersj.110.877)
2. J. Poetschke, V. Richter, T. Gestrich, and A. Michaelis, “Grain Growth during Sintering of Tungsten Carbide Ceramics,” *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **43**, 309–316 (2014). doi [10.1016/j.ijrmhm.2014.01.001](https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2014.01.001)
3. N. Florin and P. Fennell, “Synthetic CaO-based Sorbent for CO₂ Capture,” *Energy Procedia* **4**, 830–838 (2011). doi [10.1016/j.egypro.2011.01.126](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2011.01.126)



4. Ya. V. Bazaikin, E. G. Malkovich, V. S. Derevschikov, et al., “Evolution of Sorptive and Textural Properties of CaO-based Sorbents during Repetitive Sorption/Regeneration Cycles,” *Chem. Eng. Sci.* **152**, 709–716 (2016). doi [10.1016/j.ces.2016.06.064](https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.06.064)
5. R. K. Bordia, S.-J. L. Kang, and E. A. Olevsky, “Current Understanding and Future Research Directions at the Onset of the Next Century of Sintering Science and Technology,” *J. Am. Ceram. Soc.* **100** (6), 2314–2352 (2017). doi [10.1111/jace.14919](https://doi.org/10.1111/jace.14919)
6. R. E. White, “An Enthalpy Formulation of the Stefan Problem,” *SIAM J. Numer. Anal.* **19** (6), 1129–1157 (1982). <https://www.jstor.org/stable/2157200>. Cited April 10, 2022.
7. A. W. Date, “A Strong Enthalpy Formulation for the Stefan Problem,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **34** (9), 2231–2235 (1991). doi [10.1016/0017-9310\(91\)90049-K](https://doi.org/10.1016/0017-9310(91)90049-K)
8. D. Tarwidi and S. R. Pudjaprasetya, “Godunov Method for Stefan Problems with Enthalpy Formulations,” *East Asian J. Appl. Math.* **3** (2), 107–119 (2013). doi [10.4208/eajam.030513.200513a](https://doi.org/10.4208/eajam.030513.200513a)
9. S. Molins, D. Trebotich, C. Steefel, and C. Shen, “An Investigation of the Effect of Pore Scale Flow on Average Geochemical Reaction Rates Using Direct Numerical Simulation,” *Water Resour. Res.* **48** (3) (2012). doi [10.1029/2011WR011404](https://doi.org/10.1029/2011WR011404)
10. S. Molins, D. Trebotich, L. Yang, et al., “Pore-Scale Controls on Calcite Dissolution Rates from Flow-through Laboratory and Numerical Experiments,” *Environ. Sci. Technol.* **48** (13), 7453–7460 (2014). doi [10.1021/es5013438](https://doi.org/10.1021/es5013438)
11. C. I. Steefel and A. C. Lasaga, “A Coupled Model for Transport of Multiple Chemical Species and Kinetic Precipitation/Dissolution Reactions with Application to Reactive Flow in Single Phase Hydrothermal Systems,” *Am. J. Sci.* **294** (5), 529–592 (1994). doi [10.2475/ajs.294.5.529](https://doi.org/10.2475/ajs.294.5.529)
12. D. Trebotich, M. F. Adams, S. Molins, et al., “High-Resolution Simulation of Pore-Scale Reactive Transport Processes Associated with Carbon Sequestration,” *Comput. Sci. Eng.* **16** (6), 22–31 (2014). doi [10.1109/MCSE.2014.77](https://doi.org/10.1109/MCSE.2014.77)
13. X. Li, H. Huang, and P. Meakin, “Level Set Simulation of Coupled Advection–Diffusion and Pore Structure Evolution due to Mineral Precipitation in Porous Media,” *Water Resour. Res.* **44** (12) (2008). doi [10.1029/2007WR006742](https://doi.org/10.1029/2007WR006742)
14. X. Li, H. Huang, and P. Meakin, “A Three-Dimensional Level Set Simulation of Coupled Reactive Transport and Precipitation/Dissolution,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **53** (13), 2908–2923 (2010). doi [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.01.044](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.01.044)
15. S. Osher and R. P. Fedkiw, “Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results,” *J. Comput. Phys.* **169** (2), 463–502 (2001). doi [10.1006/jcph.2000.6636](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6636)
16. S. Marella, S. Krishnan, H. Liu, and H. S. Udaykumar, “Sharp Interface Cartesian Grid Method I: An Easily Implemented Technique for 3D Moving Boundary Computations,” *J. Comput. Phys.* **210** (1), 1–31 (2005). doi [10.1016/j.jcp.2005.03.031](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.031)
17. R. Mittal and G. Iaccarino, “Immersed Boundary Methods,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **37** (1), 239–261 (2005). doi [10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743)
18. C. S. Peskin, “Flow Patterns around Heart Valves: A Numerical Method,” *J. Comput. Phys.* **10** (2), 252–271 (1972). doi [10.1016/0021-9991\(72\)90065-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(72)90065-4)
19. F. Sotiropoulos and X. Yang, “Immersed Boundary Methods for Simulating Fluid–Structure Interaction,” *Prog. Aerosp. Sci.* **65**, 1–21 (2014). doi [10.1016/j.paerosci.2013.09.003](https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2013.09.003)
20. Y.-H. Tseng and J. H. Ferziger, “A Ghost-Cell Immersed Boundary Method for Flow in Complex Geometry,” *J. Comput. Phys.* **192** (2), 593–623 (2003). doi [10.1016/j.jcp.2003.07.024](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.07.024)
21. K. A. Gadylyshina, T. S. Khachkova, and V. V. Lisitsa, “Numerical Modeling of Chemical Interaction between a Fluid and Rocks,” *Vychisl. Metody Program.* **20** (4), 457–470 (2019). doi [10.26089/NumMet.v20r440](https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r440)
22. D. Prokhorov, V. Lisitsa, T. Khachkova, et al., “Topology-Based Characterization of Chemically-Induced Pore Space Changes Using Reduction of 3D Digital Images,” *J. Comput. Sci.* **58** (2022). doi [10.1016/j.jocs.2021.101550](https://doi.org/10.1016/j.jocs.2021.101550)
23. D. P. Munoz, J. Bruchon, F. Valdivieso, and S. Drapier, “Solid-State Sintering Simulation: Surface, Volume and Grain-Boundary Diffusions,” in *Proc. ECCOMAS 2012: European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Vienna, Austria, September 10–14, 2012*, https://www.researchgate.net/publication/235673306_Solid-state_sintering_simulation_Surface_volume_and_grain-boundary_diffusions. Cited April 10, 2022.
24. P. Smereka, “Semi-Implicit Level Set Methods for Curvature and Surface Diffusion Motion,” *J. Sci. Comput.* **19** (1–3), 439–456 (2003). doi [10.1023/A:1025324613450](https://doi.org/10.1023/A:1025324613450)
25. N. Moelans, B. Blanpain, and P. Wollants, “An Introduction to Phase-Field Modeling of Microstructure Evolution,” *Calphad* **32** (2), 268–294 (2008). doi [10.1016/j.calphad.2007.11.003](https://doi.org/10.1016/j.calphad.2007.11.003)

26. J. W. Cahn and J. E. Hilliard, “Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy,” *J. Chem. Phys.* **28** (2), 258–267 (1958). doi [10.1063/1.1744102](https://doi.org/10.1063/1.1744102)
27. S. M. Allen and J. W. Cahn, “Ground State Structures in Ordered Binary Alloys with Second Neighbor Interactions,” *Acta Metall.* **20** (3), 423–433 (1972). doi [10.1016/0001-6160\(72\)90037-5](https://doi.org/10.1016/0001-6160(72)90037-5)
28. Yu. U. Wang, “Computer Modeling and Simulation of Solid-State Sintering: A Phase Field Approach,” *Acta Mater.* **54** (4), 953–961 (2006). doi [10.1016/j.actamat.2005.10.032](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.10.032)
29. S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, and Y. B. Park, “Computer Simulations of Two-Dimensional and Three-Dimensional Ideal Grain Growth,” *Phys. Rev. E* **74** (2006). doi [10.1103/PhysRevE.74.061605](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.061605)
30. J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, et al., “Large Scale Phase-Field Simulations of Directional Ternary Eutectic Solidification,” *Acta Mater.* **93**, 194–204 (2015). doi [10.1016/j.actamat.2015.03.051](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.03.051)
31. R. Zhang, Z. Chen, W. Fang, and X. Qu, “Thermodynamic Consistent Phase Field Model for Sintering Process with Multiphase Powders,” *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **24** (3), 783–789 (2014). doi [10.1016/S1003-6326\(14\)63126-5](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(14)63126-5)
32. J. Hötzer, M. Seiz, M. Kellner, et al., “Phase-Field Simulation of Solid State Sintering,” *Acta Mater.* **164**, 184–195 (2019). doi [10.1016/j.actamat.2018.10.021](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.10.021)
33. N. Moelans, F. Wendler, and B. Nestler, “Comparative Study of Two Phase-Field Models for Grain Growth,” *Comput. Mater. Sci.* **46** (2), 479–490 (2009). doi [10.1016/j.commatsci.2009.03.037](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.03.037)
34. J. W. Cahn, “On Spinodal Decomposition,” *Acta Metall.* **9** (9), 795–801 (1961). doi [10.1016/0001-6160\(61\)90182-1](https://doi.org/10.1016/0001-6160(61)90182-1)
35. A. Fick, “Ueber Diffusion,” *Ann. Phys.* **170** (1), 59–86 (1855). doi [10.1002/andp.18551700105](https://doi.org/10.1002/andp.18551700105)
36. Ya. E. Geguzin, *Physics of Sintering* (Nauka, Moscow, 1984) [in Russian].
37. K. Ahmed, J. Pakarinen, T. Allen, and A. El-Azab, “Phase Field Simulation of Grain Growth in Porous Uranium Dioxide,” *J. Nucl. Mater.* **446** (1–3), 90–99 (2014). doi [10.1016/j.jnucmat.2013.11.036](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.11.036)
38. M. A. Spears and A. G. Evans, “Microstructure Development during Final/Intermediate Stage Sintering—II. Grain and Pore Coarsening,” *Acta Metall.* **30** (7), 1281–1289 (1982). doi [10.1016/0001-6160\(82\)90146-8](https://doi.org/10.1016/0001-6160(82)90146-8)
39. C. Shen, Q. Chen, Y. H. Wen, et al., “Increasing Length Scale of Quantitative Phase Field Modeling of Growth-Dominant or Coarsening-Dominant Process,” *Scr. Mater.* **50** (7), 1023–1028 (2004). doi [10.1016/j.scriptamat.2003.12.029](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2003.12.029)
40. R. M. German, *Sintering Theory and Practice* (Wiley, New York, 1996).
41. Ya. V. Bazaikin, E. G. Malkovich, D. I. Prokhorov, and V. S. Derevschikov, “Detailed Modeling of Sorptive and Textural Properties of CaO-Based Sorbents with Various Porous Structures,” *Sep. Purif. Technol.* **255** (2021). doi [10.1016/j.seppur.2020.117746](https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117746)
42. B. D. Lubachevsky and F. H. Stillinger, “Geometric Properties of Random Disk Packings,” *J. Stat. Phys.* **60**, 561–583 (1990). doi [10.1007/BF01025983](https://doi.org/10.1007/BF01025983)
43. Y.-S. Liu, J. Yi, H. Zhang, et al., “Surface Area Estimation of Digitized 3D Objects Using Quasi-Monte Carlo Methods,” *Pattern Recognit.* **43** (11), 3900–3909 (2010). doi [10.1016/j.patcog.2010.06.002](https://doi.org/10.1016/j.patcog.2010.06.002)
44. V. S. Derevschikov, J. V. Veselovskaya, T. Yu. Kardash, et al., “Direct CO₂ Capture from Ambient Air Using K₂CO₃/Y₂O₃ Composite Sorbent,” *Fuel* **127**, 212–218 (2014) doi [10.1016/j.fuel.2013.09.060](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.09.060)

Received
March 3, 2022

Accepted for publication
April 2, 2022

Information about the authors

Dmitry I. Prokhorov — Junior Researcher, Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Koptyug prospekt, 4, 630090, Novosibirsk, Russia.

Yaroslav V. Bazaikin — Dr. Sci., Head of Laboratory, Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Koptyug prospekt, 4, 630090, Novosibirsk, Russia.

Vadim V. Lisitsa — Dr. Sci., Head of Laboratory, Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Koptyug prospekt, 3, 630090, Novosibirsk, Russia.