Sintering simulation using GPU-based algorithm for the samples with a large number of grains

Dmitriy Prokhorov[1], Yaroslav Bazaikin[1] and Vadim Lisitsa[1]

[1] Sobolev Institute of Mathematics SB RAS

Актуальность

- Для улавливания и хранения CO_2, поступающего из крупных стационарных источников могут быть использованы твердые сорбенты на основе кальция.
- Добавление Y_2O_3 в такие сорбенты, позволяет повысить их устойчивость к спеканию и продлить срок службы.

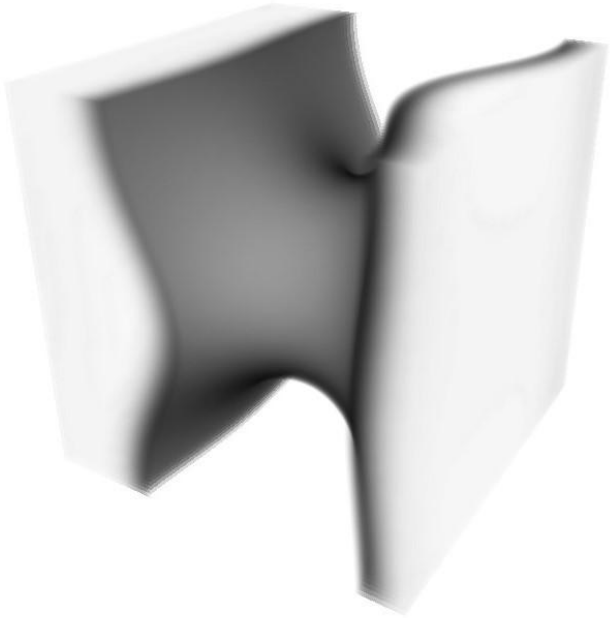
Цель работы

- Разработка алгоритма, позволяющего моделировать спекание образцов состоящих из нескольких тысяч зерен.

Необходимость в большом количестве зерен

Спекание сопровождается процессом **роста зерен**.

Начиная с некоторого момента времени, останется лишь одно зерно.



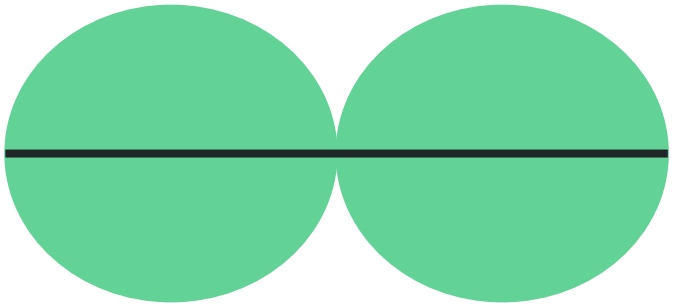
Методы

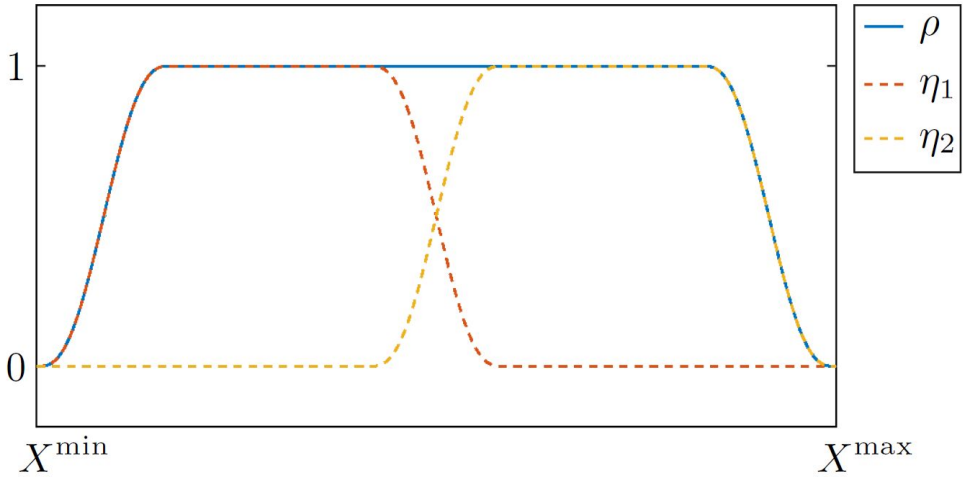
Задача спекания является задачей Стефана или задачей с подвижной границей.

- Метод отслеживания границы и метод конечных объемов
- Метод поверхности уровня и метод погруженных границ
- **Метод фазового поля**

Метод фазового поля

- ρ - состав
- η_i - параметры порядка





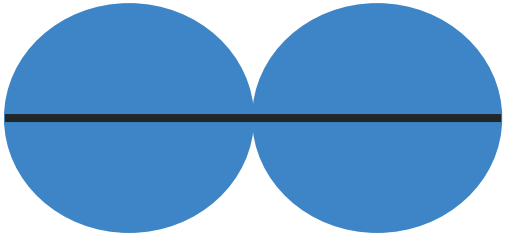
Уравнение Кана-Хиллиарда

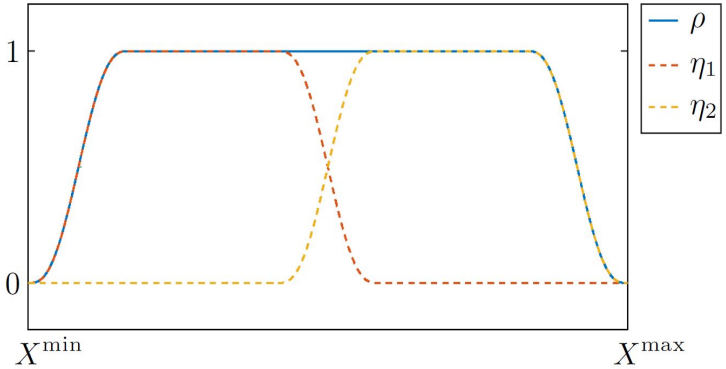
$$F = \int \left(f(\rho, \eta_1, \ldots, \eta_I) + \frac{1}{2}\beta_\rho |\nabla \rho|^2 + \frac{1}{2}\beta_\eta \sum_i |\nabla \eta_i|^2 \right) d\Omega$$

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

$$J = -D \nabla \mu,$$

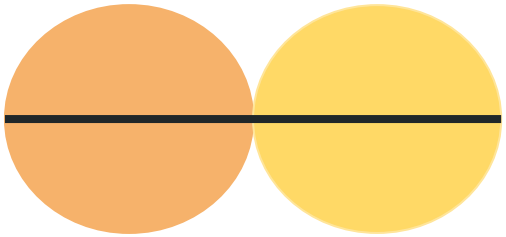
$$\mu = \frac{\delta F}{\delta \rho} = \frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho.$$



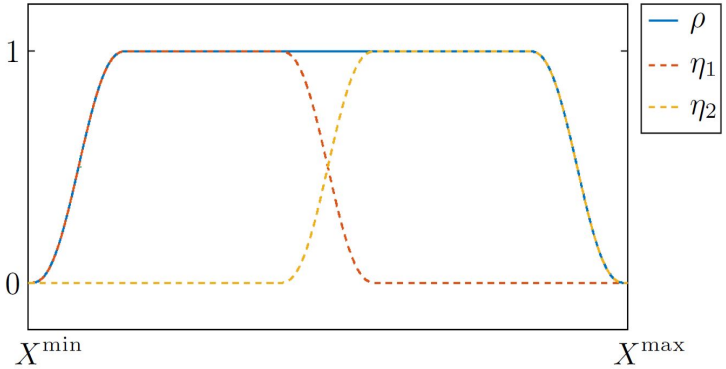


Уравнение Аллена-Кана

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



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



Разностная схема

$$\frac{\rho^{n+1}_{j_1j_2j_3} - \rho^{n}_{j_1j_2j_3}}{\tau} = -\left(\boldsymbol{D}_1^{c_2}[J_1]_{j_1j_2j_3} + \boldsymbol{D}_2^{c_2}[J_2]_{j_1j_2j_3} + \boldsymbol{D}_3^{c_2}[J_3]_{j_1j_2j_3}\right),$$

$$(J_1)^n_{j_1+1/2j_2j_3} = -D^n_{j_1+1/2j_2j_3}\,\boldsymbol{D}_1^{c_1}[\mu]_{j_1+1/2j_2j_3},$$
$$(J_2)^n_{j_1j_2+1/2j_3} = -D^n_{j_1j_2+1/2j_3}\,\boldsymbol{D}_2^{c_1}[\mu]_{j_1j_2+1/2j_3},$$
$$(J_3)^n_{j_1j_2j_3+1/2} = -D^n_{j_1j_2j_3+1/2}\,\boldsymbol{D}_3^{c_1}[\mu]_{j_1j_2j_3+1/2},$$

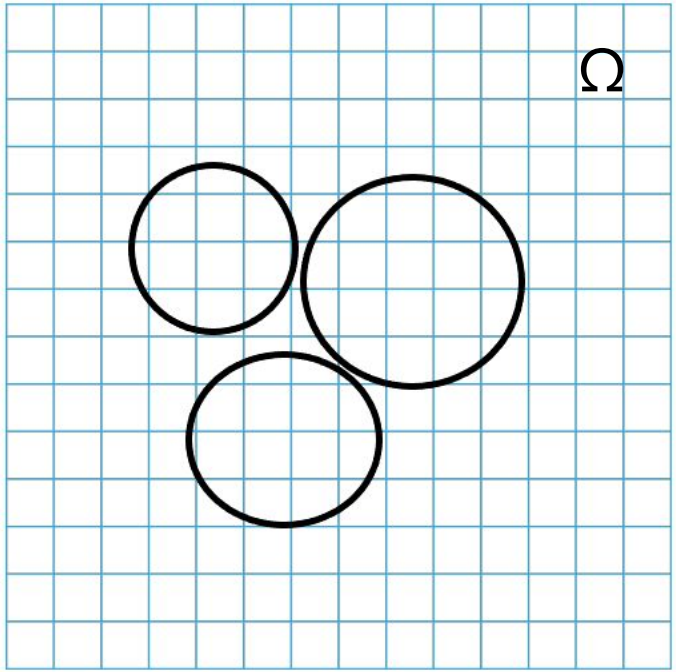
$$\mu^n_{j_1j_2j_3} = \frac{\partial f}{\partial \rho}\left(\rho^n_{j_1j_2j_3}, (\eta_1)^n_{j_1j_2j_3}, \ldots, (\eta_I)^n_{j_1j_2j_3}\right) - \beta_\rho \boldsymbol{L}[\rho]^n_{j_1j_2j_3},$$

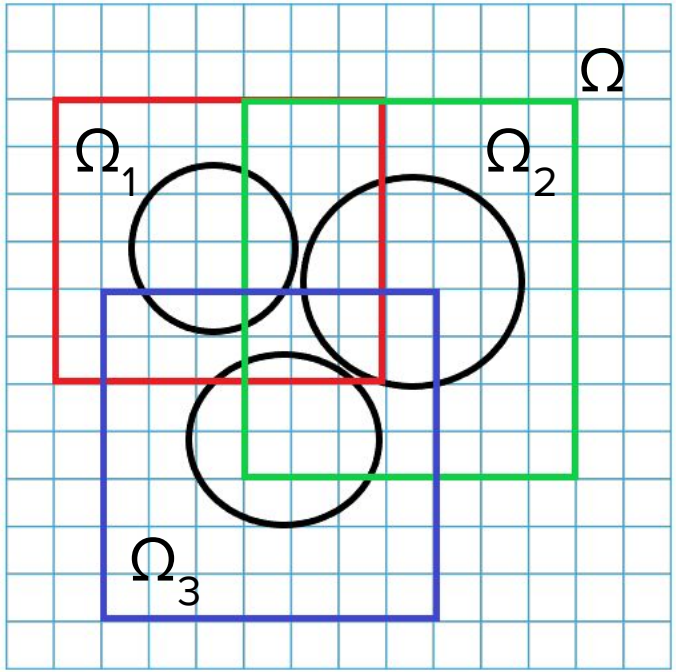
$$\frac{(\eta_i)^{n+1}_{j_1j_2j_3} - (\eta_i)^n_{j_1j_2j_3}}{\tau} = -L\left[\frac{\partial f}{\partial \eta_i}\left(\rho^n_{j_1j_2j_3}, (\eta_1)^n_{j_1j_2j_3}, \ldots, (\eta_I)^n_{j_1j_2j_3}\right) - \beta_\eta \boldsymbol{L}[\eta_i]^n_{j_1j_2j_3}\right],$$

$$1 \leqslant i \leqslant I,$$

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

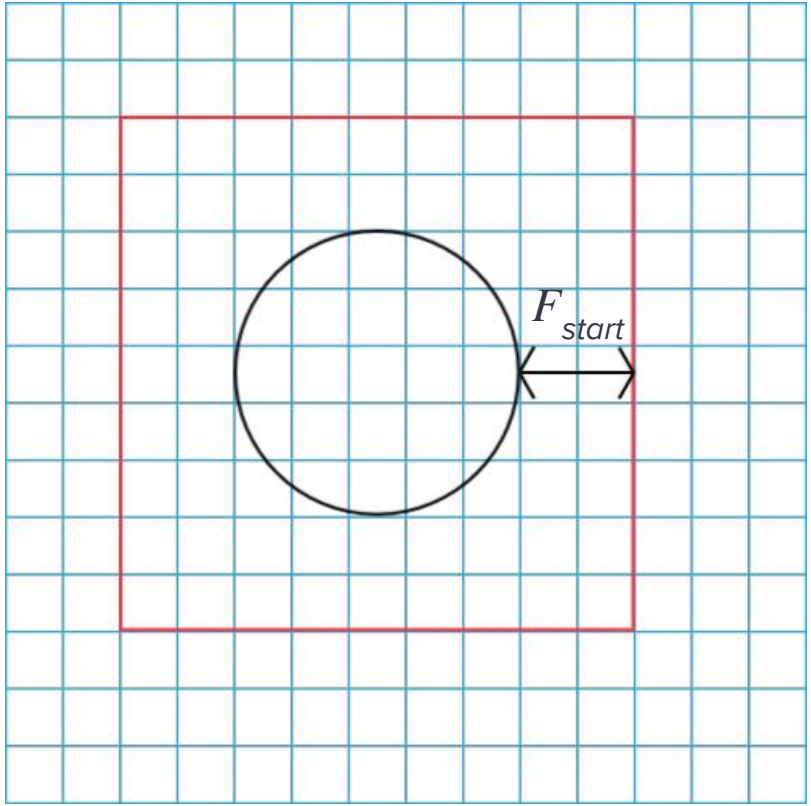
Сетка





Алгоритм изменения областей

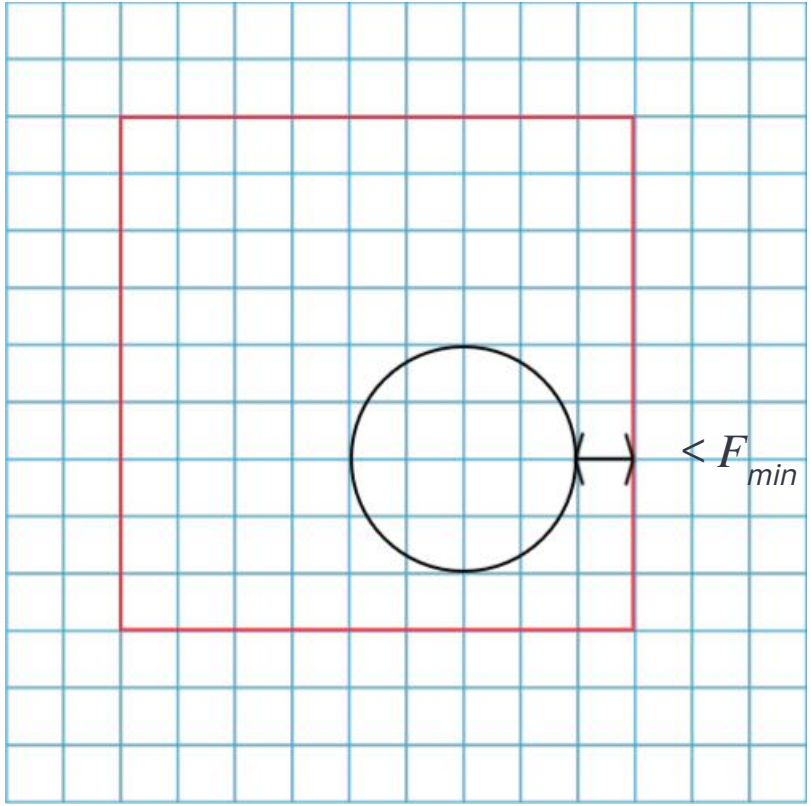
1. Инициализация: области Ω_i выбираются так, чтобы $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$.



Алгоритм изменения областей

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 $mindist_i > F_{min}$.

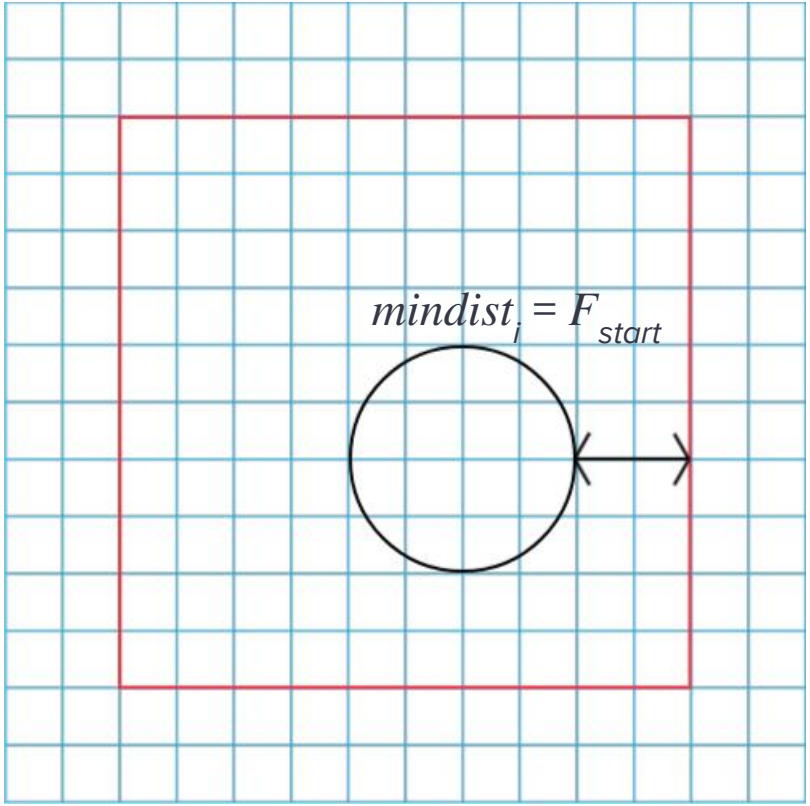


Алгоритм изменения областей

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 $mindist_i = F_{start}$.



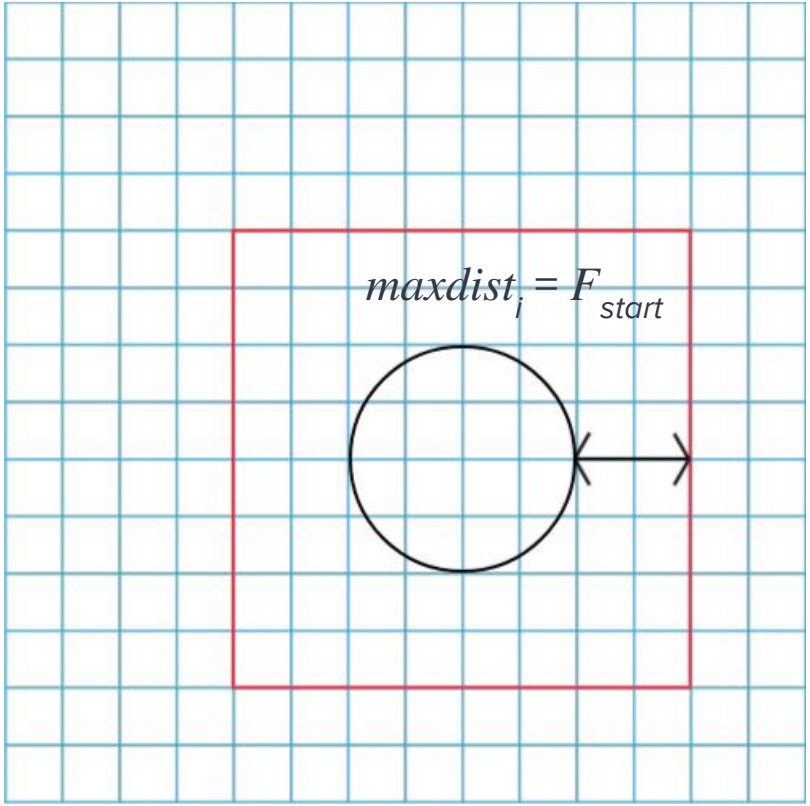
Алгоритм изменения областей

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 $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$.



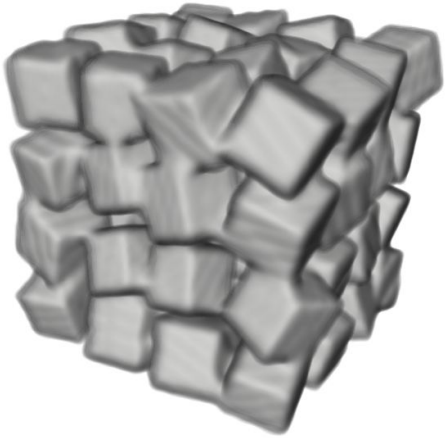
Оценка для сфер

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

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

Параметры модели

Зерна оксида иттрия имеют кубическую форму со стороной 14 нм.



Параметры Y_2O_3

γ_s	Поверхностная энергия	1.82	Дж/м^2
γ_{gb}	Энергия границы зерен	1.43	Дж/м^2
D_{vol}	Коэффициент объемной диффузии	$6.14 * 10^{-22}$	м^2/с
D_{vap}	Коэффициент диффузии испарения	$3.07 * 10^{-22}$	м^2/с
D_{surf}	Коэффициент поверхностной диффузии	$6.14 * 10^{-19}$	м^2/с
D_{gb}	Коэффициент диффузии на границе зерен	$6.14 * 10^{-19}$	м^2/с
D_a	Коэффициент диффузии сквозь границу зерен	$6.14 * 10^{-19}$	м^2/с
T	Температура	1173	К
V_m	Молярный объем	$45.1 * 10^{-6}$	м^3/моль
t	Время спекания	7200	с

Конфигурация вычислительного узла

- Суперкомпьютерный центр «Политехнический»
- Политехник - РСК Торнадо
- Процессор Intel Xeon E5 2697 v3
- Ускоритель NVIDIA K40

Сравнительный эксперимент

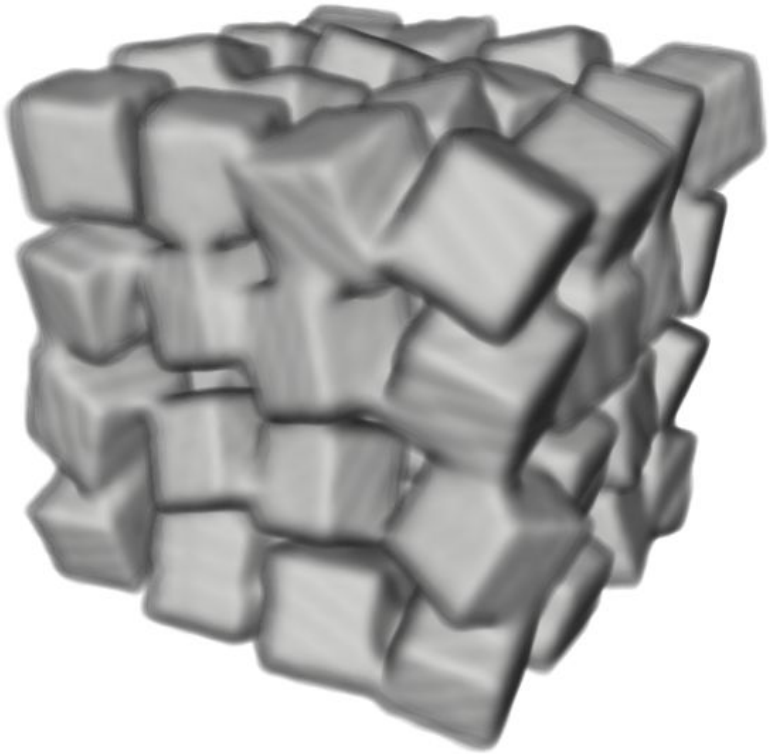
Размер сетки - 83x83x83

Количество итераций - 1 000 000

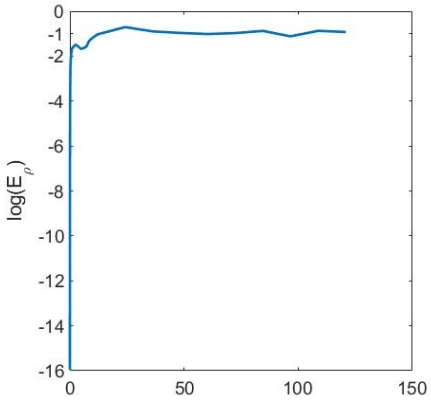
τ - 0.0026

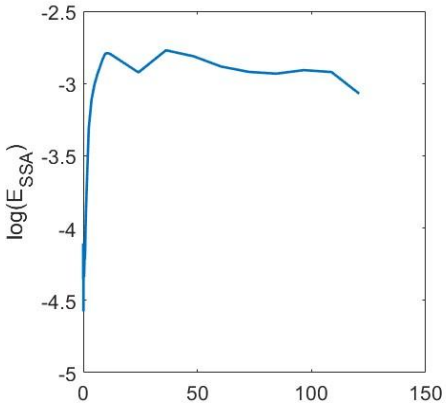
h - 1

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

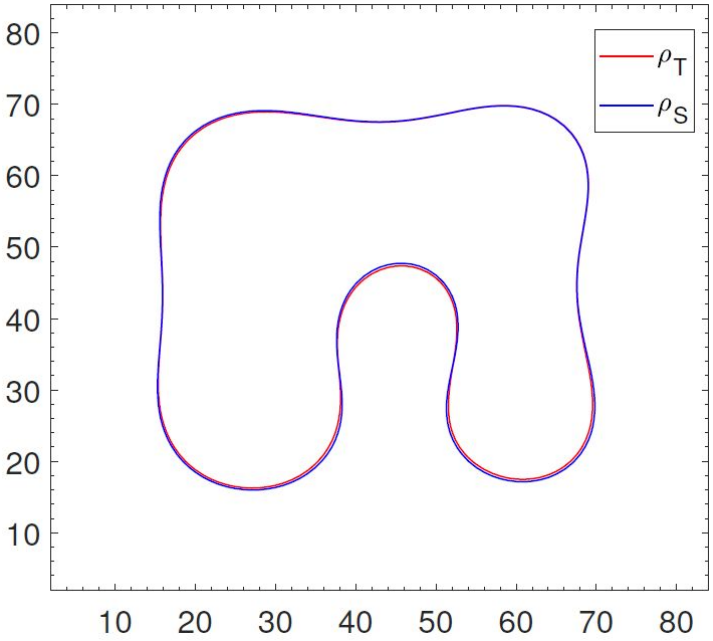


Сравнительный эксперимент





Время, мин.



$$SSA = \frac{S_{bb}}{V_{bb}},$$

$$E_\rho(t) = \max_{x\in\Omega} |\rho_T(t,x) - \rho_S(t,x)|,$$

$$E_{SSA}(t) = \frac{|SSA_T(t) - SSA_S(t)|}{|SSA_S(t)|}.$$

Расстояние Хаусдорфа

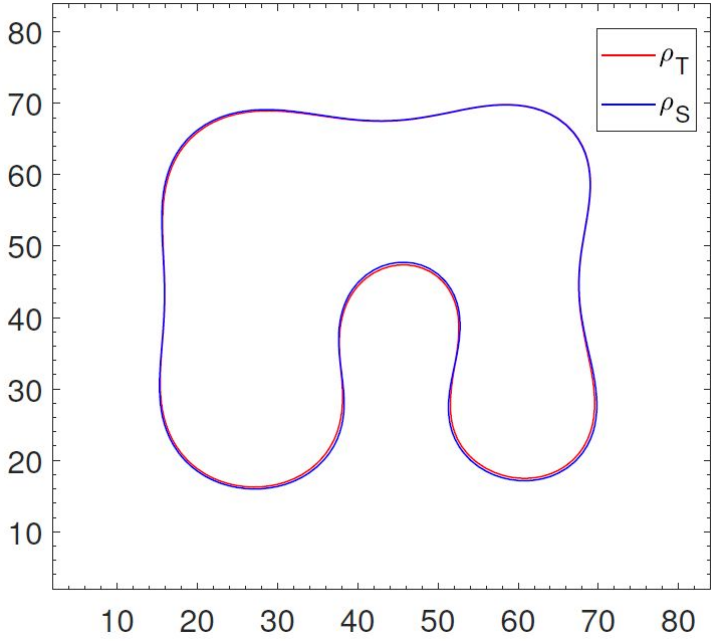
$$d_H(I_S(t), I_T(t)) = max(\sup_{x \in I_S(t)} \inf_{y \in I_T(t)} |xy|, \sup_{y \in I_T(t)} \inf_{x \in I_S(t)} |xy|)$$

$$I_S(t) = \{x \mid \rho_S(x,t) \geq 0.5\}$$

$$I_T(t) = \{x \mid \rho_T(x,t) \geq 0.5\}$$

$$diam(I) = \sup_{x,y \in I} |xy|$$

$$E_H(t) = \frac{d_H(I_S(t), I_T(t))}{diam(I_S(t))}$$



Расстояние Хаусдорфа

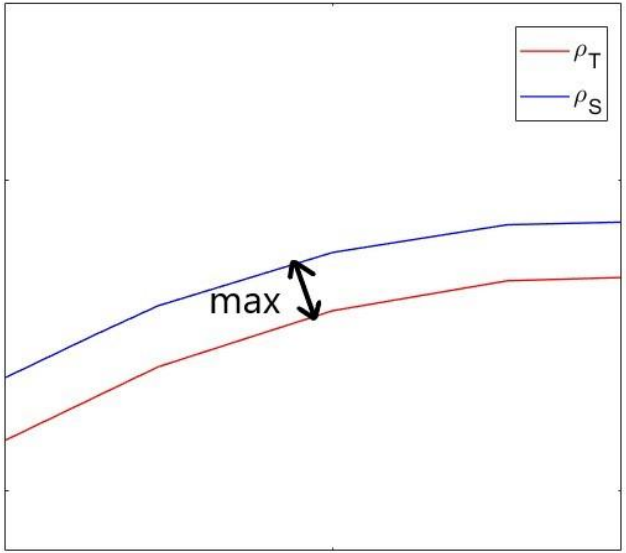
$$d_H(I_S(t), I_T(t)) = max(\sup_{x \in I_S(t)} \inf_{y \in I_T(t)} |xy|, \sup_{y \in I_T(t)} \inf_{x \in I_S(t)} |xy|)$$

$$I_S(t) = \{x \mid \rho_S(x,t) \geq 0.5\}$$

$$I_T(t) = \{x \mid \rho_T(x,t) \geq 0.5\}$$

$$diam(I) = \sup_{x,y \in I} |xy|$$

$$E_H(t) = \frac{d_H(I_S(t), I_T(t))}{diam(I_S(t))}$$



Расстояние Хаусдорфа

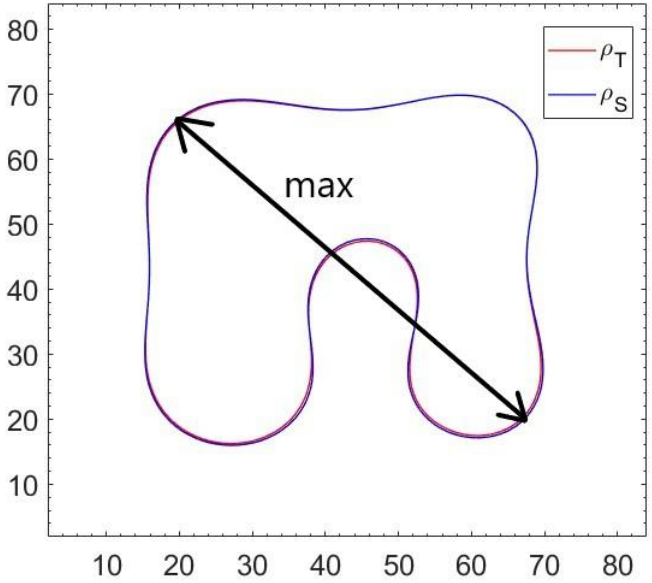
$$d_H(I_S(t), I_T(t)) = max(\sup_{x \in I_S(t)} \inf_{y \in I_T(t)} |xy|, \sup_{y \in I_T(t)} \inf_{x \in I_S(t)} |xy|)$$

$$I_S(t) = \{x \mid \rho_S(x,t) \geq 0.5\}$$

$$I_T(t) = \{x \mid \rho_T(x,t) \geq 0.5\}$$

$$diam(I) = \sup_{x,y \in I} |xy|$$

$$E_H(t) = \frac{d_H(I_S(t), I_T(t))}{diam(I_S(t))}$$



Расстояние Хаусдорфа

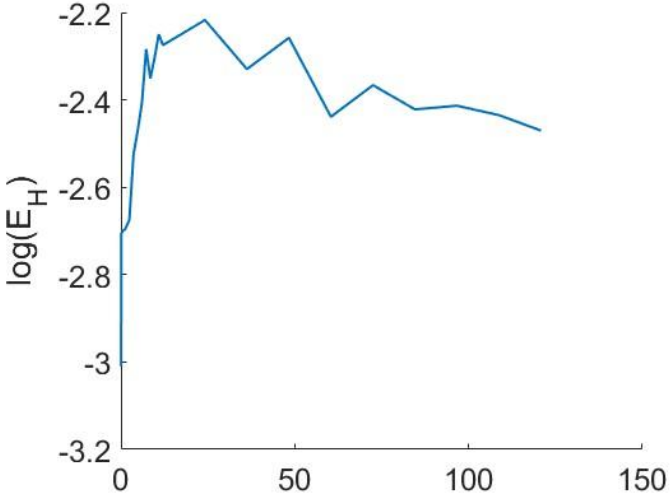
$$d_H(I_S(t), I_T(t)) = max(\sup_{x \in I_S(t)} \inf_{y \in I_T(t)} |xy|, \sup_{y \in I_T(t)} \inf_{x \in I_S(t)} |xy|)$$

$$I_S(t) = \{x \mid \rho_S(x,t) \geq 0.5\}$$

$$I_T(t) = \{x \mid \rho_T(x,t) \geq 0.5\}$$

$$diam(I) = \sup_{x,y \in I} |xy|$$

$$E_H(t) = \frac{d_H(I_S(t), I_T(t))}{diam(I_S(t))}$$

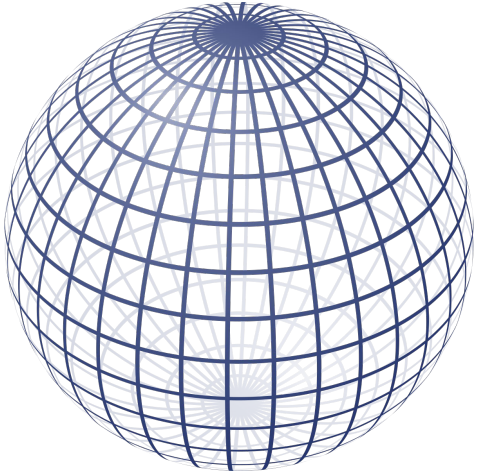


Время, мин.

Числа Бетти

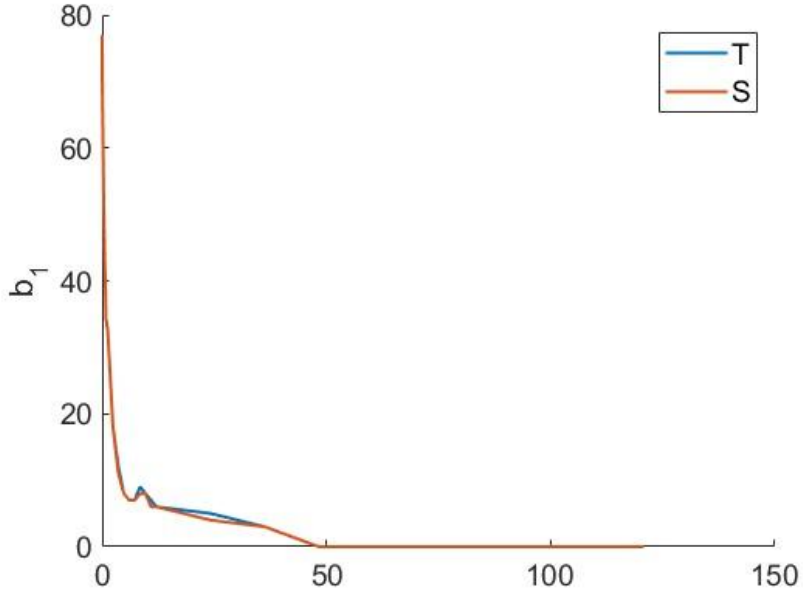
b_0 - число компонент связности

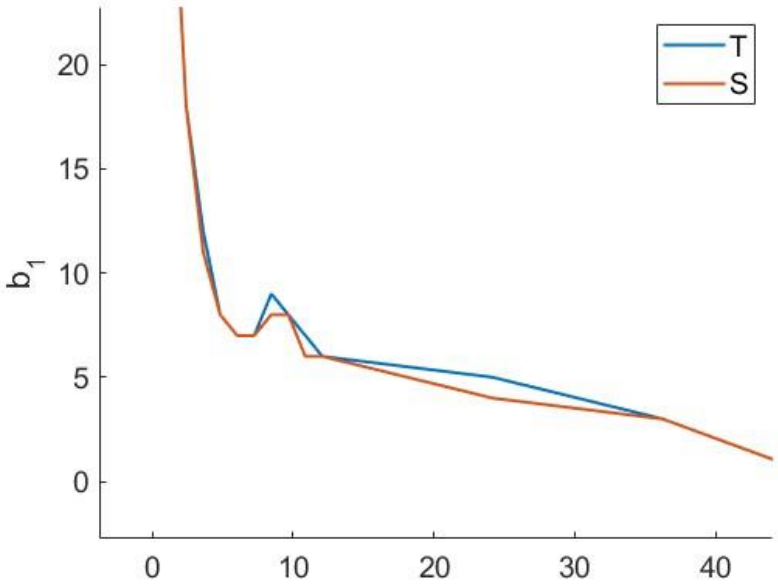
b_1 - число туннелей



b_2 - число полостей

Первое число Бетти





Время, мин.

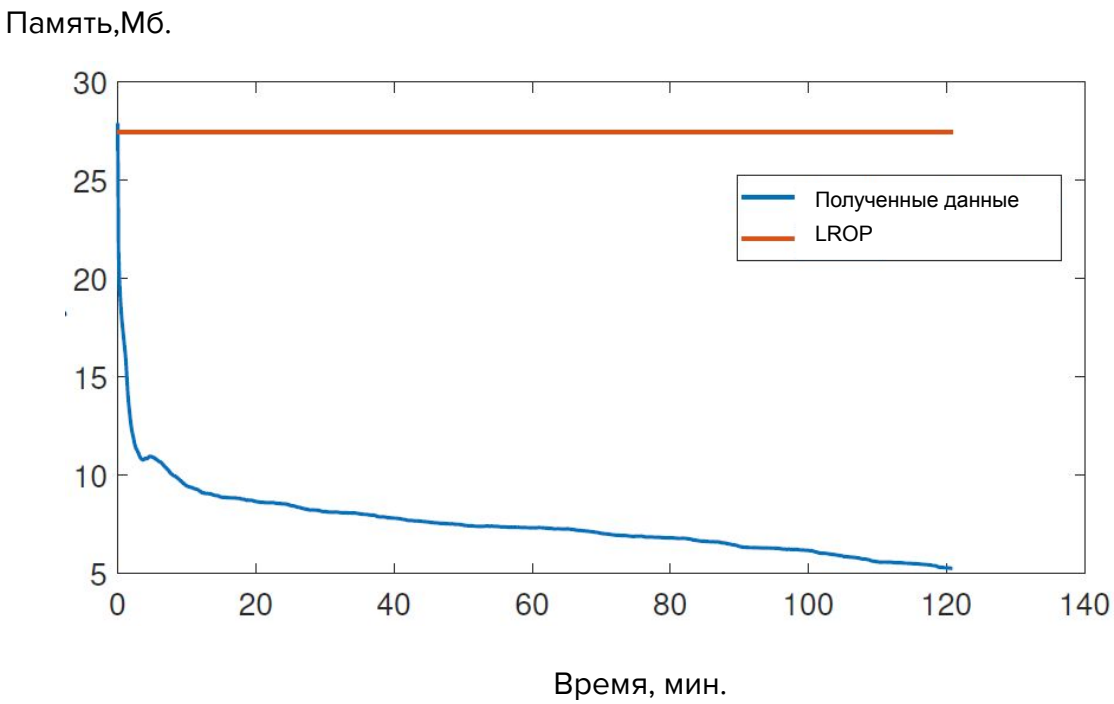
Производительность

Время вычислений:

17.5 ➡ 1.2 часа

Память для хранения значений η_i:

292 Мб ➡



Эксперименты с большим числом зерен

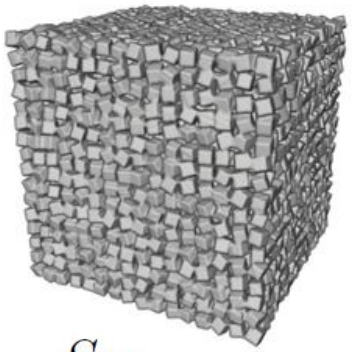
Количество итераций - 1 000 000

τ - 0.0026

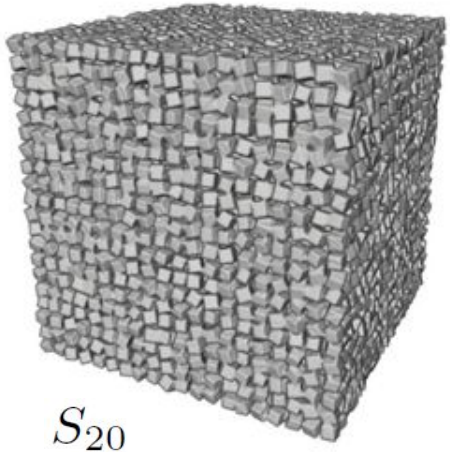
h - 1

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

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

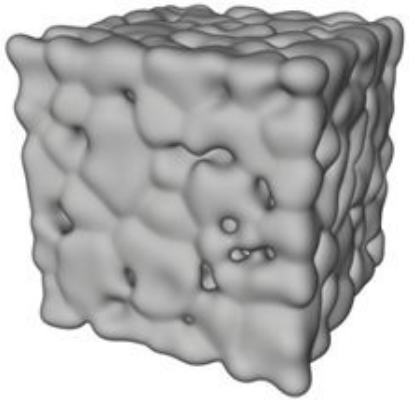


S_{16}

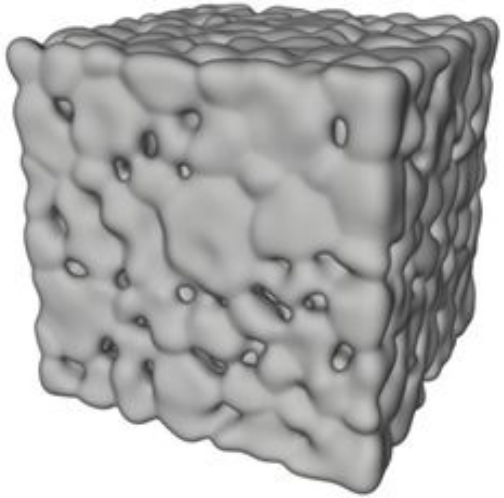


S_{20}

Эксперименты с большим числом зерен



S_{16}



S_{20}

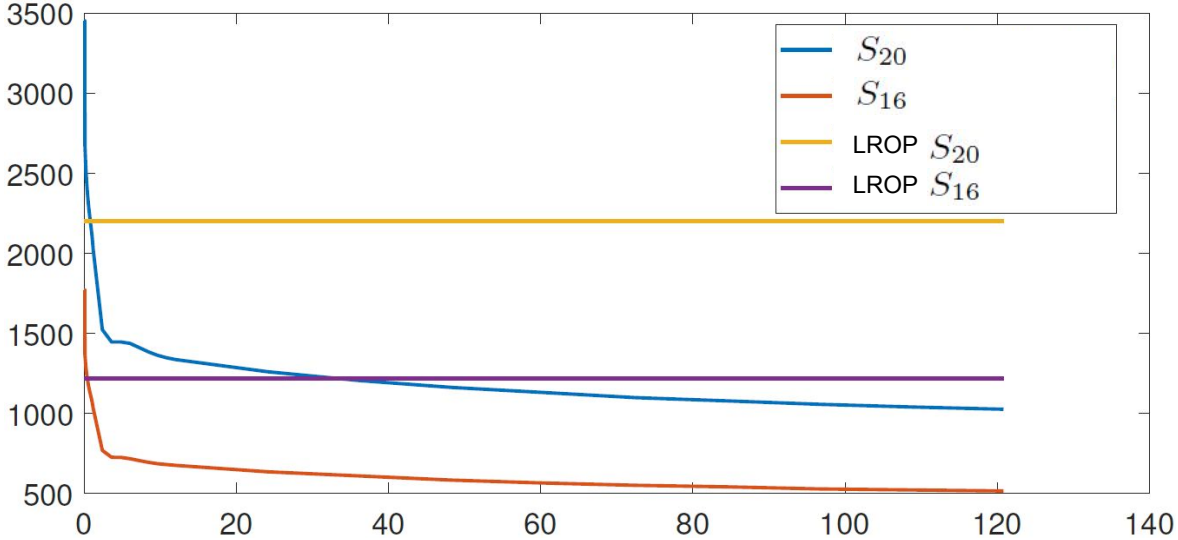
Эксперименты с большим числом зерен

Общий объем памяти:

S_{16} - 4.8 Гб

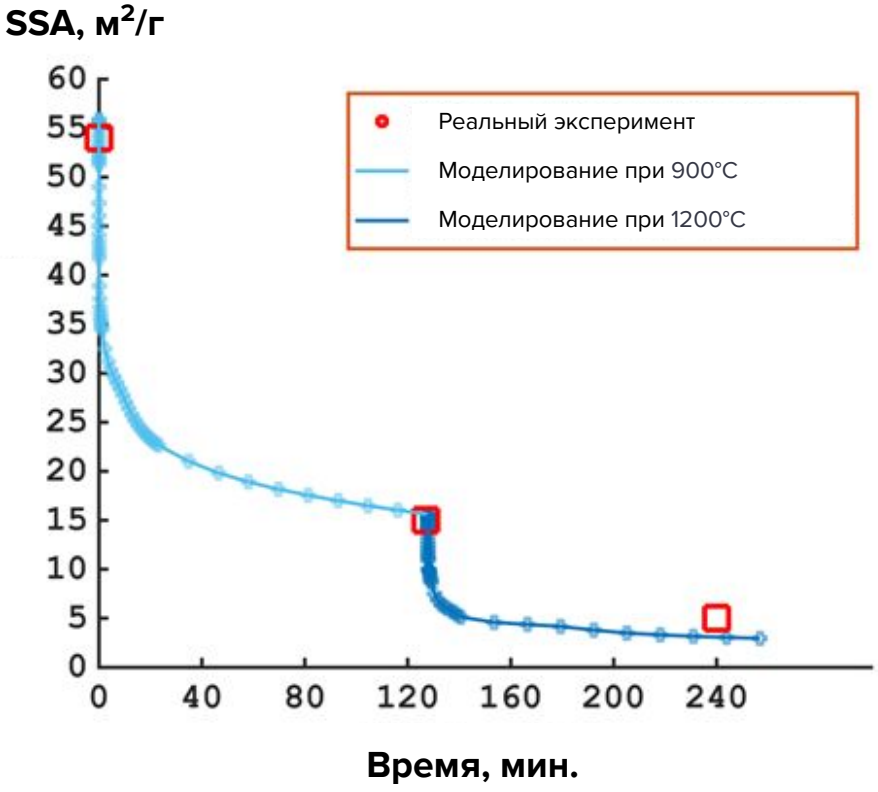
S_{20} - 9.2 Гб

Память для хранения значений η_i (Мб):



Время, мин.

Сравнение с результатами ртутной порометрии



Заключение

- Разработан алгоритм для моделирования спекания оксида иттрия
- Алгоритм позволяет провести расчеты с помощью одного ускорителя NVIDIA K40 для образцов состоящих из 8000 зерен на сетке 358x358x358.
- Значение SSA, полученное в результате численного моделирования спекания при температуре 900°C хорошо согласуется с данными ртутной порометрии.

Спасибо за внимание!