

На правах рукописи

**Прохоров Дмитрий Игоревич**

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

Специальность 1.2.2 —  
Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте математики им. С. Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: **Базайкин Ярослав Владимирович**,  
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты: **Мулляджанов Рустам Илхамович**,  
доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией суперкомпьютерных вычислений и искусственного интеллекта в энергетических технологиях

**Черных Игорь Геннадьевич**,  
кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией суперкомпьютерного моделирования

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики Дальневосточного отделения Российской академии наук

Защита состоится 05 сентября 2023 г. в 17:00 на заседании диссертационного совета 24.1.074.03 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте математики им. С. Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 630090, г. Новосибирск, просп. Академика Коптюга, 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИМ СО РАН <https://math.nsc.ru>.

Автореферат разослан 27 июля 2023.

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.1.074.03,  
кандидат физико-математических наук

Скворцова  
Мария Александровна

## Общая характеристика работы

**Объект исследования** — 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).

**Актуальность и степень разработанности темы исследования.** Углекислый газ — основной антропогенный парниковый газ, способствующий глобальному потеплению. Большие выбросы  $CO_2$  в атмосферу вызваны растущим потреблением невозобновляемых ископаемых видов топлива. Дополнительными источниками выбросов  $CO_2$  в атмосферу является сельское хозяйство, а также техногенные и стихийные бедствия, в результате которых сгорает большое количество органических веществ. Ограничить эти выбросы и уменьшить их негативное воздействие на окружающую среду позволяют технологии улавливания и хранения  $CO_2$  (CCS).

Один из способов сокращения выбросов  $CO_2$ , поступающего из крупных стационарных источников, — улавливание с помощью твердых сорбентов. В многочисленных исследованиях по этой теме предлагается использовать сорбенты на основе оксида кальция  $CaO$  для эффективного улавливания  $CO_2$  при высоких температурах<sup>1</sup>. Эти исследования основаны на обратимости реакции  $CaO + CO_2 \leftrightarrow CaCO_3$ . Сорбенты на основе  $CaO$  обладают почти стехиометрической сорбционной емкостью по отношению к  $CO_2$ . Однако во время циклической реакции рекарбонизации–разложения, в результате спекания сорбента уменьшается его сорбционная емкость<sup>2</sup>.

Спекание — широко распространенный процесс в промышленном производстве, поскольку позволяет получить материалы (в том числе и сорбенты) с заранее заданными параметрами. Ключевыми свойствами сорбента являются прочность и емкость. Емкость сорбента связана с площадью его поверхности<sup>3</sup>. Измерение этих свойств химическими или физическими методами является весьма ресурсоемкой задачей, особенно если речь идет о большом количестве образцов. Более того, использование некоторых методов приводит к разрушению образцов, что вызывает трудности в исследовании эволюции параметров. Цифровое представление лишено описанных недостатков.

---

<sup>1</sup>Synthetic CaO-based sorbent for high-temperature CO<sub>2</sub> capture in sorption-enhanced hydrogen production / P. Pecharaumporn [et al.] // International Journal of Hydrogen Energy. 2019. Vol. 44, no. 37. P. 20663—20677.

<sup>2</sup>Grasa, G. Effect of Partial Carbonation on the Cyclic CaO Carbonation Reaction / G. Grasa, J. C. Abanades, E. J. Anthony // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2009. Vol. 48, no. 20. P. 9090—9096.

<sup>3</sup>Florin, N. Synthetic CaO-based sorbent for CO<sub>2</sub> capture / N. Florin, P. Fennell. 2011. 10th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies.

Другой способ сокращения выбросов  $CO_2$  — закачка в пласт. Однако из-за миграции шлейфа  $CO_2$ , чтобы обеспечить уплотнение углевода внутри пласта и предотвратить его утечку во вскрышную породу, процесс поглощения углекислого газа требует тщательного контроля изменений физических свойств пласта<sup>4</sup>. Поэтому операциям по секвестрации  $CO_2$  должно предшествовать полномасштабное мультифизическое численное моделирование и исследование возможных сценариев. Доминирующим фактором изменения физических свойств породы во время секвестрации  $CO_2$  является химическое взаимодействие порового флюида с матрицей породы<sup>5</sup>, вызывающее растворение матрицы, осаждение минералов и отложение солей. Химически индуцированные изменения порового пространства могут происходить по совершенно разным сценариям: образование червоточин, гомогенное растворение, формирование фронта растворения. Сценарий зависит от набора различных параметров, таких как кинетика реакции, скорость потока жидкости, концентрация частиц на входе, начальная геометрия и топология порового пространства. Чтобы количественно охарактеризовать изменения в поровом пространстве, представляющие собой информацию об изменениях топологии порового пространства и матрицы породы, используются персистентные диаграммы<sup>6</sup>.

**Целью** исследования является 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:**

1. 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.
2. Разработать и реализовать в виде программного продукта алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зернами произвольной формы для оценки изменения пористости и площади поверхности в процессе высокотемпературных воздействий.

---

<sup>4</sup> Verliac, M. Microseismic monitoring for reliable CO2 injection and storage — Geophysical modeling challenges and opportunities / M. Verliac, J. L. Calvez // The Leading Edge. 2021. Vol. 40, no. 6. P. 418—423.

<sup>5</sup> CO2 messes with rock physics / M. Prasad [et al.] // The Leading Edge. 2021. Vol. 40, no. 6. P. 424—432.

<sup>6</sup> Lisitsa, V. Computational topology-based characterization of pore space changes due to chemical dissolution of rocks / V. Lisitsa, Y. Bazaikin, T. Khachkova // Applied Mathematical Modelling. 2020. Vol. 88. P. 21—37.

3. 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 Эдельсбрунера-Летшера-Зомородяна.

**Теория и методы исследования.** При разработке алгоритма численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен  $CaO$  сферической формы используется геометрическая модель спекания. Адаптация модели заключается в предположении, что сближение частиц происходит из-за воздействия силы поверхностного натяжения, создаваемой слоем  $CaCO_3$ , и зависит от его толщины. Пористость образцов вычисляется с использованием метода Монте-Карло, а площадь поверхности — конечно-разностным методом как производная от объема.

При разработке алгоритма численного моделирования спекания зернистых материалов используется метод фазового поля, в частности, рассматривается система уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана. Метод фазового поля позволяет неявно задавать границу раздела между средами различной природы, такими как твердая фаза и газ, или между зернами с различной кристаллографической ориентацией. Система уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана аппроксимируется явной конечно-разностной схемой. Для верификации алгоритма решения сравниваются по норме  $l_\infty$ , проводится сравнение площадей поверхности.

Для оценки изменения топологии порового пространства используются инструменты вычислительной топологии. Персистентные диаграммы вычисляются алгоритмом Эдельсбрунера-Летшера-Зомородяна, адаптированным для работы с трехмерными цифровыми изображениями. Уменьшить время вычисления персистентных диаграмм позволяет алгоритм редукции. Алгоритм редукции основан на принципе ретракции — удалении свободной грани. Адаптация алгоритма редукции заключается в том, что удаляются не свободные грани, а воксели целиком. Персистентные диаграммы кластеризуются методом  $k$ -средних на четыре кластера.

Программные реализации всех описанных в работе алгоритмов написаны на языке C++ в интегрированной среде разработки Visual Studio. Параллелизация алгоритма численного моделирования спекания зернистых материалов для графических сопроцессоров выполняется с использованием CUDA Toolkit. Визуализация результатов выполняется с использованием пакета прикладных программ MATLAB.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен оксида кальция сферической формы с заданной пористостью и содержанием темплата.
2. Алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зернами произвольной формы для оценки изменения

пористости и площади поверхности в процессе высокотемпературных воздействий.

3. Алгоритм редукции трехмерного цифрового изображения, разработанный на основе метода ретракции, для увеличения эффективности вычисления персистентных диаграмм алгоритмом Эдельсбруннера-Летшера-Зомородяна.

**Научная новизна:**

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 33 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).
2. Разработан и реализован в виде научно-исследовательской версии программного продукта, ориентированного на использование графических сопроцессоров, алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зёрнами 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.
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 симплицальный комплекс,
  - с использованием кластеризации  $k$ -средних определена зависимость между параметрами химического растворения горной

породы (перепад давления, скорость реакции, коэффициент молекулярной диффузии, водородный показатель) и изменениями ее топологии в трехмерном пространстве.

**Личный вклад:**

1. Соискателем 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 для оценки изменения сорбционной емкости в процессе циклов сорбции/регенерации (в соавторстве с Я. В. Базайкиным). Соискателем с помощью алгоритма Любачевского-Стиллинджера подготовлено 32 упаковки сфер, представляющих собой модели пористой среды темплатного  $CaO$  сорбента и выполнено численное моделирование 33 циклов сорбции и регенерации. Оптимизирована пористая структура темплатного сорбента на основе  $CaO$  с целью достижения максимальной эффективности сорбционной емкости (совместно с Я. В. Базайкиным, Е. Г. Мальковичем и В. С. Деревщиковым).
2. Для решения системы уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана соискателем построена явная конечно-разностная схема с аппроксимацией коэффициента диффузии и градиента химического потенциала в полуцелых узлах. На основе данной схемы разработан алгоритм численного моделирования спекания. Для оптимизации вычислений при моделировании спекания образцов с большим числом зерен разработан алгоритм отслеживания областей, который позволяет решать каждое из уравнений Аллена-Кана на небольшой движущейся сетке. Алгоритмы реализованы в научно-исследовательской версии программного обеспечения. Для валидации алгоритма соискателем выполнено численное моделирование спекания различных конфигураций частиц: два касающихся шара, упаковка из 25 шаров, упаковка из 4302 шаров. Соискателем проведена конвертация физических параметров оксида иттрия в модельные. Выполнено численное моделирование спекания случайных регулярных упаковок кубических зерен оксида иттрия в трех конфигурациях: 64 зерна, 4096 зерен и 8000 зерен. Проведен сравнительный анализ решений, а также анализ производительности алгоритма.
3. На основе метода ретракции для симплицальных комплексов соискателем лично разработан алгоритм редукции трехмерных цифровых изображений. Алгоритм вычисления персистентных диаграмм адаптирован для трехмерных цифровых изображений. Выполнено 1600 численных экспериментов равномерного химического растворения породы; образцы получены с помощью

статистического моделирования. Для полученных в процессе растворения фильтраций цифровых изображений вычислены персистентные диаграммы, как до применения алгоритма редукции, так и после. Определена производительность алгоритма редукции. Выполнено 108 численных экспериментов химического растворения ближневосточного карбоната с различными параметрами потока. Построенные для 108 экспериментов персистентные диаграммы кластеризованы методом  $k$ -средних. По полученной кластеризации проведен анализ связи между параметрами растворения и изменениями топологии порового пространства.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Разработанный алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен  $CaO$  сферической формы позволяет точно определить зависимость текстурных изменений и степени рекарбонизации от количества циклов сорбции/регенерации для сорбентов с различной пористостью и размером зерен, что дает возможность сократить затраты на проведение трудоемких химических экспериментов (ртутная порометрия, термогравиметрический эксперимент). Найдена оптимальная структура сорбента для производства наиболее выгодного с точки зрения сорбционной емкости  $CaO$ -сорбента.

Использование программной реализации алгоритма отслеживания областей существенно сокращает время численного моделирования по сравнению с явным подходом, а также сокращает затраты машинной памяти на протяжении большей части вычислений, по сравнению с распространенным подходом LROP. Разработанный алгоритм может быть использован для моделирования спекания сорбента со стопорами спекания.

Стоит отметить, что оба алгоритма спекания обладают еще одним общим достоинством: они позволяют провести оценку параметров образцов (пористость, площадь поверхности) без дорогостоящего лабораторного оборудования, что особенно важно в задачах оптимизации.

Использование программной реализации алгоритма редукции трехмерных цифровых изображений существенно сокращает время вычисления одномерных персистентных диаграмм для задач химического растворения горной породы. Полученные зависимости между параметрами потока и одномерными персистентными диаграммами позволяют оценить влияние характера химического взаимодействия жидкости с породой на изменения порового пространства.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Высокая степень достоверности новых подходов в разработке алгоритмов подтверждается сопоставлением результатов численных экспериментов с данными лабораторных исследований, с известными теоретическими оценками и с решениями других авторов.

Научная задача в рамках исследования поддерживалась Российским научным фондом:

1. 2020-2021, проект РНФ №19-77-20004 "Проявление связности систем трещин в волновых полях – численные исследования процессов распространения сейсмических и акустических волн в флюидонасыщенных трещиновато-пористых средах".
2. 2021-2022, проект РНФ №21-71-20003 "Изменение макроскопических характеристик пористых материалов в результате взаимодействия с химически активными флюидами – численное моделирование на масштабе пор".

Основные результаты работы докладывались на международных и всероссийских конференциях: XXI всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям (Новосибирск, 07–11 декабря 2020); Международная конференция “Недропользование. Горное дело. Направления и технологии поиска, разведки и разработки месторождений полезных ископаемых. Экономика. Геоэкология” (Новосибирск, 17–21 мая 2021; 16–20 мая 2022 (2 доклада)); Международная конференция по вычислительным наукам (Польша, Краков, 16–18 июня 2021); 21-я Международная конференция по вычислительным наукам и их приложениям (Италия, Кальяри, 13–16 сентября 2021); V Международная конференция “Суперкомпьютерные технологии математического моделирования” (Москва, 27–30 июня 2022); XVIII Международная конференция “Суперкомпьютерные дни в России” (Москва, 26–27 сентября 2022). Шесть докладов сделано лично соискателем.

Результаты работы были отмечены первой премией Лаврентьевского конкурса студенческих и аспирантских работ по математике и механике в 2021 году.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 14 научных публикациях, 2 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК [1; 2], 4 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus [3–6], 8 — в материалах конференций [7–14], 1 из которых индексируем Web of Science и Scopus [10], 2—индексируемы Scopus [9; 14]. Зарегистрирована 1 программа для ЭВМ [15].

**Благодарности.** Автор искренне благодарен научному руководителю д.ф.-м.н. Я.В. Базайкину за постановку перспективных задач, плодотворные обсуждения и поддержку. Отдельную благодарность хочется выразить д.ф.-м.н. В.В. Лисице за всестороннюю поддержку и профессиональные рекомендации при разработке численных алгоритмов. Автор выражает глубокую признательность своим коллегам к.х.н. В.С. Дерещикову, к.ф.-м.н. Е.Г. Мальковичу и к.ф.-м.н. Т.С. Хачковой за профессионализм при совместном решении задач. Успешному написанию текста диссертации способствовали ценные методические рекомендации

В. И. Самойловой и М. А. Новикова, за что автор выражает им свою искреннюю благодарность.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы, списка рисунков, списка таблиц и 1 приложения. Полный объем диссертации составляет 125 страниц, включая 42 рисунка и 10 таблиц. Список литературы содержит 155 наименований.

## Содержание работы

Во **введении** определен объект исследования, обоснована актуальность новых разработок, поставлены цель и научные задачи работы, определены научная новизна и практическая значимость разработок, определен личный вклад соискателя.

**Первая глава** посвящена численному моделированию сорбционных и текстурных свойств сорбентов на основе  $CaO$  с различной структурой пор. В **разделе 1.1** представлен обзор известных геометрических моделей спекания. Используемые в этих моделях идеализированные формы зерен и регулярные структуры не позволяют оценить количественные характеристики спекаемых материалов. Однако для задачи спекания сорбента из оксида кальция в процессе циклов сорбции и регенерации  $CO_2$  существуют модели с нерегулярными упаковками<sup>7,8</sup>, на основе которых далее строится модель спекания темплатного сорбента.

**Раздел 1.2** начинается с постановки задачи спекания темплатного сорбента на основе зерен  $CaO$  сферической формы с заданной пористостью и содержанием темплата [3]. Модель построена по данным эксперимента: сорбент на основе  $CaO$  помещается в термогравиметрический анализатор и подвергается периодической сорбции и регенерации  $CO_2$ . Такое воздействие приводит к сближению зерен  $CaO$ . Предполагается, что сорбент спекается в основном на стадии сорбции, когда толщина карбонатного слоя на поверхности  $CaO$  увеличивается.

Геометрическая модель спекания двух сферических частиц  $CaO$  в процессе циклов сорбции и регенерации  $CO_2$  описывается уравнением  $m \frac{d^2 l}{dt^2} = -(F - F_0) = -\alpha R d(t) + \pi \sigma_0 (x - d(t))^2$ , где  $m$  — масса непрореагировавшего  $CaO$ ,  $\alpha$  — свободный параметр,  $\sigma_0$  — константа критического напряжения,  $R$  — радиус зерен. Сила  $F$ , пропорциональная толщине слоя  $CaCO_3$   $d(t)$ , сближает центры зерен, расстояние между которыми —  $2l$ . Сила напряжения  $F_0$ , пропорциональная площади перешейка, препятствует

---

<sup>7</sup>Evolution of sorptive and textural properties of CaO-based sorbents during repetitive sorption/regeneration cycles / Y. Bazaikin [et al.] // Chemical Engineering Science. 2016. Vol. 152. P. 709—716.

<sup>8</sup>Evolution of sorptive and textural properties of CaO-based sorbents during repetitive sorption/regeneration cycles: Part II. Modeling of sorbent sintering during initial cycles / Y. Bazaikin [et al.] // Chemical Engineering Science. 2019. Vol. 199. P. 156—163.

сближению зерен, которое имеет место при  $F \geq F_0$ . Приближенное решение уравнения с заданными начальными условиями задает рекурсивную формулу коэффициента сжатия  $\mu_k = \frac{l_k}{R}$  упаковки сфер для  $k$ -го цикла, который позволяет вычислить объем упаковки и степень рекарбонизации  $RE$  — количество вещества поглощенного  $CO_2$ .

Реальные образцы мезопористых и макропористых сорбентов  $CaO$  состоят из регулярных областей, где сосредоточена большая часть площади сорбирующей поверхности. Регулярные области моделируются как плотная упаковка, состоящая из сфер двух типов: полистирола и  $CaO$ . Удаление полистирольных сфер образует макропоры в теле сорбирующей среды. Для получения плотной упаковки, состоящей из  $n$  сфер  $CaO$  и  $N$  сфер полистирола, применяется алгоритм Любачевского-Стиллинжера для  $n + N = 1000$  сфер, после чего  $N$  полистирольных сфер исключается из модели. Всего в рамках численного эксперимента подготавливается 32 образца, имитирующих пористую среду темплатного сорбента, и один образец нетемплатного сорбента.

В разделе 1.3 описан алгоритм вычисления площади поверхности и объема упаковки пересекающихся сфер с использованием метода Монте-Карло и конечно-разностного метода.

Восстановление неизвестных параметров модели по данным термогравиметрического эксперимента серии из 33 циклов сорбции-регенерации и ртутной порометрии описывается в разделе 1.4. Наиболее подходящей упаковкой для темплатного образца является упаковка со значениями  $(n, N) = (500, 500)$ . Значения параметров дают достаточно точный прогноз степени использования сорбента  $SWC = 100(1 + RE \frac{M_{CaCO_3}}{M_{CaO}})$ : модельные данные точно совпадают практически со всеми значениями, полученными в термогравиметрическом эксперименте [3].

В разделе 1.5 описываются результаты численных экспериментов по измерению общей эффективности темплатного сорбента относительно нетемплатного в течение 300 циклов сорбции-регенерации:

$$\frac{\sum_{300cycles} (w_i^{nt} - w_0)}{\sum_{300cycles} (w_i^t - w_0)} \approx 16.109, \quad (1)$$

где  $w_i^t$  и  $w_i^{nt}$  — массы приращения карбоната кальция в течение  $i$ -го цикла для темплатного и нетемплатного сорбента соответственно. Описываются результаты исследования зависимости  $SWC$  темплатного сорбента от размера частиц  $CaO$  и пористости в течение 33 циклов для трех размеров частиц: 500, 800, 1000 нм, пористость колеблется от 0.46 до 0.70 (Рисунок 1). Наибольшая степень использования сорбента достигается для наименьшего размера частиц и наибольшей пористости [3].

**Вторая глава** посвящена разработке алгоритма решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда для моделирования процесса

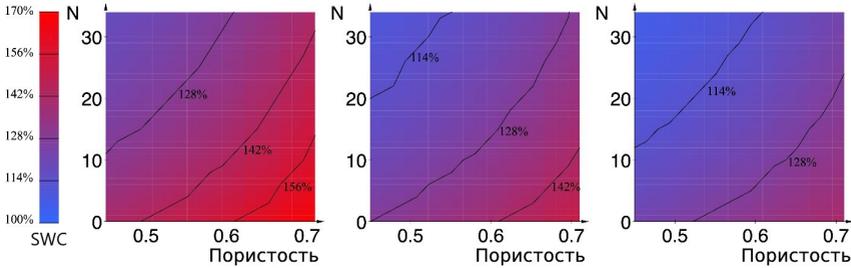


Рис. 1 — Зависимость SWC от пористости и числа циклов  $N$  для трех размеров зерен  $CaO$ : 500 нм (слева), 800 нм (в центре), 1000 нм (справа)

спекания зернистых материалов [2]. В разделе 2.1 представлен обзор известных подходов к решению задач с подвижной границей. Наибольшее внимание уделяется методам, позволяющим задавать границу раздела фаз неявно, таким как метод поверхности уровня<sup>9</sup> и метод фазового поля<sup>10</sup>, поскольку применение методов, явно отслеживающих границу раздела, является трудоемкой задачей, особенно в случае сложных топологий фаз<sup>11</sup>. В случае моделирования спекания необходима аппроксимация потока поверхностной диффузии<sup>12</sup>, что сложно сделать с использованием метода поверхности уровня. Для метода фазового поля существуют различные модели. В части из них уравнения имеют второй порядок<sup>13</sup>, что ставит под сомнение качество аппроксимации потока поверхностной диффузии. Альтернативным вариантом является система уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана, однако сложность решения такой системы зависит от числа зерен в спекаемом материале<sup>14</sup>.

Раздел 2.2 начинается с постановки задачи. Система уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана определяется в прямоугольной области  $\Omega = [X_1^{min}, X_1^{max}] \times [X_2^{min}, X_2^{max}] \times [X_3^{min}, X_3^{max}]$ . Эволюция массовой плотности задается уравнением Кана-Хиллиарда:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot D \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho \right). \quad (2)$$

<sup>9</sup> Osher, S. Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results / S. Osher, R. P. Fedkiw // Journal of Computational Physics. 2001. Vol. 169, no. 2. P. 463—502.

<sup>10</sup> Moelans, N. An Introduction to Phase-Field Modeling of Microstructure Evolution / N. Moelans, B. Blanpain, P. Wollants // Calphad. 2008. June. Vol. 32. P. 268—294.

<sup>11</sup> High-Resolution Simulation of Pore-Scale Reactive Transport Processes Associated with Carbon Sequestration / D. Trebotich [et al.] // Computing in Science & Engineering. 2014. Vol. 16. P. 22—31.

<sup>12</sup> Smereka, P. Semi-Implicit Level Set Methods for Curvature and Surface Diffusion Motion / P. Smereka // Journal of Scientific Computing. 2003. Vol. 19. P. 439—456.

<sup>13</sup> Phase-field simulation of solid state sintering / J. Hötzer [et al.] // Acta Materialia. 2018. Oct. Vol. 164.

<sup>14</sup> Wang, Y. U. Computer modeling and simulation of solid-state sintering: A phase field approach / Y. U. Wang // Acta Materialia. 2006. Vol. 54, no. 4. P. 953—961.

Уравнения Аллена-Кана описывают эволюцию параметров порядка  $\eta_i$ , соответствующих зернам с различной кристаллографической ориентацией:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \left( \frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \beta_\eta \Delta \eta_i \right), \quad 1 \leq i \leq I. \quad (3)$$

Функция  $f$  в уравнениях (2)-(3) — плотность локальной свободной химической энергии. Параметры  $\beta_\rho, \beta_\eta$  обозначают поверхностную энергию и энергию границ, параметры  $L, D$  — диффузность различных частей зерен. В области  $\Omega$  задаются начальные условия

$$\eta_i(\mathbf{x}, 0) = \chi_i(\mathbf{x}), \forall i, \rho(\mathbf{x}, 0) = \max_i(\chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_I(\mathbf{x})), \quad (4)$$

а также периодические граничные условия.  $\chi_i$  в (4) — характеристическая функция  $i$ -го зерна.

Для решения системы уравнений разработана конечно-разностная схема. Производные по пространству аппроксимируются конечными разностями второго порядка, причем коэффициент диффузии и градиент химического потенциала аппроксимируются в полущелых узлах. Производные по времени аппроксимируются конечными разностями первого порядка.

В разделе 2.3 описывается адаптация алгоритма решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда для образцов с большим числом зерен [2], которая заключается в том, что 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  $supp(\eta_i) \subseteq \Omega_i \subseteq \Omega$ . Области  $\Omega_i$  должны изменяться со временем, поскольку эволюция  $\eta_i$  сопровождается процессом роста зерен. Для того чтобы изменять  $\Omega_i$ , разработан алгоритм отслеживания областей. Минимальное расстояние от зерна  $i$  до плоскостей, ограничивающих  $\Omega_i$  обозначается как  $mindist_i$ . Аналогично максимальное расстояние —  $maxdist_i$ . Алгоритм отслеживания  $\Omega_i$  включает следующие шаги:

1. Инициализация: области  $\Omega_i$  выбираются таким образом, чтобы  $mindist_i = maxdist_i = F_{start}, \forall i$ .
2. Проверка: каждые  $T_r$  временных итераций проверяются условия  $mindist_i > F_{min}, \forall i$ .
3. Увеличение: размеры доменов, для которых условие  $mindist_i > F_{min}$  не выполнено, увеличиваются таким образом, что  $mindist_i = F_{start}$ .
4. Изменение размеров: каждые  $T_{fr}$  временных итераций все  $\Omega_i$  изменяются так, что  $mindist_i = maxdist_i = F_{start}, \forall i$ .

Приводится описание адаптации разработанного алгоритма для графических ускорителей [14]. На каждой временной итерации параметры  $\mu, D, J, \rho$  вычисляются последовательно. Значения параметров в узлах сетки на  $n + 1$ -м шаге не зависят от значений в других узлах на  $n + 1$ -м шаге (явная схема), поэтому значения в различных узлах сетки могут

быть вычислены независимо в различных потоках GPU. Также в разделе приводится оценка необходимого количества памяти (не считая параметров порядка) для решения системы на сетке размера  $N_1 \times N_2 \times N_3$ . В случае использования чисел двойной точности эта величина составляет  $48 \times N_1 \times N_2 \times N_3$  байт.

**В разделе 2.4** описывается использование формулы Крофтона для вычисления площади поверхности неявно заданного интерфейса. В **разделе 2.5** описываются численные эксперименты по валидации алгоритма решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда на примере моделирования процесса спекания сферических зерен [2]. В численном эксперименте по спеканию двух сферических зерен используются два набора параметров, в одном из которых доминирующим механизмом массопереноса является поверхностная диффузия, а во втором — диффузия на границе зерен. Согласно физике спекания отношение диаметра перешейка между зёрнами к их диаметру имеет степенную зависимость от времени  $\frac{X}{D} = Kt^n$ , где  $n$  варьируется в зависимости от доминирующего механизма диффузии. Полученные значения  $n = 0.22$  и  $n = 0.17$  близки к ожидаемым для соответствующих диффузных механизмов. Решения, полученные с использованием алгоритма отслеживания областей и без, сравниваются по норме  $l_\infty$ . Абсолютная ошибка значения  $\rho$  не превосходит  $10^{-3}$ . Приводится аналогичное сравнение для десяти случайных упаковок из 25 сферических частиц. Относительные ошибки значений площади поверхности не превосходят 0.1%. С использованием алгоритма отслеживания областей с параметрами  $F_{min} = 5h, T_r = 100\tau, F_{start} = 10h, T_{fr} = 1000\tau$  удается достичь шестикратного ускорения вычислений в данном эксперименте [2]. Описывается численный эксперимент по спеканию упаковки из 4302 зерен на сетке размером  $320 \times 320 \times 320$  узлов. Показана возможность вычисления площади поверхности внутренних пор.

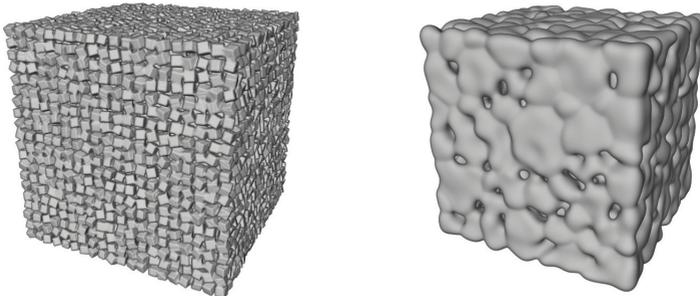


Рис. 2 — Образец  $S_{20}$  при  $t = 0$  (слева) и  $t = 2$  ч. (справа)

В разделе 2.6 описываются численные эксперименты по спеканию зерен оксида иттрия (Рисунок 2) на протяжении двух часов при температуре  $900^{\circ}C$  [6]. Сравнение решений, аналогичное описанному в разделе 2.5, для кубических упаковок оксида иттрия показывает, что абсолютная ошибка  $\rho$  достигает значения 0.1, а относительная ошибка площади поверхности достигает 1%. Тем не менее поверхности  $\rho = 0.5$  находятся близко к друг другу (Рисунок 3).

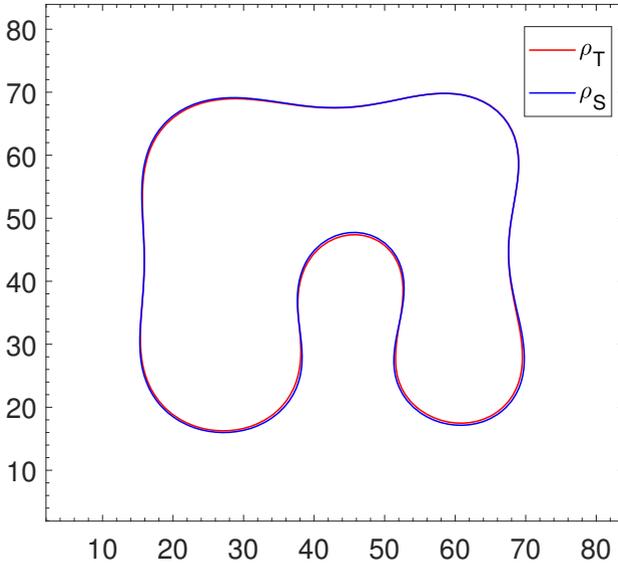


Рис. 3 — Срез образца на последнем временном шаге для одного из экспериментов

По результатам численного эксперимента по спеканию упаковок из 4096 ( $S_{16}$ ) и 8000 ( $S_{20}$ ) кубических зерен оксида иттрия (Рисунок 2) проводится сравнение количества необходимой памяти для хранения параметров порядка с количеством необходимой памяти при использовании алгоритма LR0P<sup>15</sup>. Для алгоритма отслеживания областей требуется на 50-60% больше памяти в начале работы, чем для алгоритма LR0P (Рисунок 4). Однако со временем затраты памяти снижаются до 40% от исходных [14].

**Третья глава** посвящена топологической оценке изменений порового пространства породы, вызванных растворением, с использованием редукции трехмерных цифровых изображений. В разделе 3.1 дается анализ известных подходов к исследованию взаимосвязи между свойствами

<sup>15</sup>Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth / S. G. Kim [et al.] // Phys. Rev. E. 2006. Dec. Vol. 74, issue 6. P. 061605.

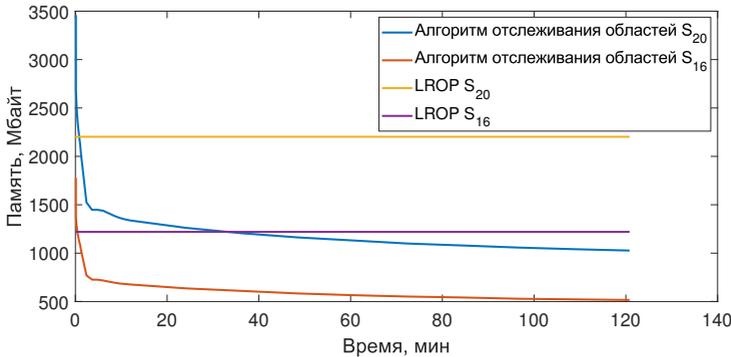


Рис. 4 — Память, необходимая для хранения значений  $\eta_i$

пористой среды и характеристиками порового пространства. Отмечается, что при использовании функционалов Минковского возникают ошибки сегментации, которые не всегда позволяют отделить значимые особенности порового пространства от шума<sup>16</sup>. Персистентные гомологии лишены этого недостатка, однако их вычисление является трудоемкой задачей<sup>17</sup>. Поэтому известен ряд подходов к уменьшению входных данных для алгоритма вычисления персистентных гомологий: метод ациклического подпространства<sup>18</sup>, ко-редукция<sup>19</sup> и редукция<sup>20</sup>. Первые два не сохраняют связность пространства, что не всегда удобно для приложений.

В разделе 3.2 исследуется применение методов вычислительной топологии для оценки изменений порового пространства породы в процессе растворения; приводятся основные используемые понятия вычислительной топологии: трехмерное цифровое изображение — множество вокселей, наделенное связностью, фильтрация — вложенная последовательность цифровых изображений, персистентная  $p$ -мерная группа гомологий — образ гомоморфизма  $f_p^{i,j} : H_p(X_i) \rightarrow H_p(X_j)$ , где  $X_i \subseteq X_j$  — цифровые изображения, ранг такой группы —  $p$ -мерное персистентное число Бетти  $\beta_p^{i,j}$ , персистентная диаграмма — мультимножество точек, в котором точка  $(i,j)$  содержится  $\mu_p^{i,j} = (\beta_p^{i,j-1} - \beta_p^{i,j}) - (\beta_p^{i-1,j-1} - \beta_p^{i-1,j})$

<sup>16</sup> Legland, D. Computation of Minkowski measures on 2D and 3D binary images / D. Legland, K. Kiéu, M.-F. Devaux // Image Anal. Stereol. 2011. Vol. 26, no. 2. P. 83.

<sup>17</sup> Edelsbrunner, H. Topological persistence and simplification / H. Edelsbrunner, D. Letscher, A. Zomorodian // Discrete Comput. Geom. 2002. Vol. 28. P. 511—533.

<sup>18</sup> Mrozek, M. Homology algorithm based on acyclic subspace / M. Mrozek, P. Pilarczyk, N. Żelazna // Computers & Mathematics with Applications. 2008. Vol. 55, no. 11. P. 2395—2412.

<sup>19</sup> Mrozek, M. Coreduction Homology Algorithm / M. Mrozek, B. Batko // Discrete and Computational Geometry. 2009. Vol. 41, no. 1. P. 96—118.

<sup>20</sup> Dlotko, P. Simplification of complexes for persistent homology computations / P. Dlotko, H. Wagner // Homology, Homotopy and Applications. 2014. Vol. 16. P. 49—63.

раз. Описывается применение алгоритма Эдельсбруннера-Летшера-Зомородяна для вычисления персистентных диаграмм трехмерных цифровых изображений. Приводится пример: персистентные диаграммы одношаговых фильтраций куба и точки совпадают, но для куба выполняется значительно больше вычислений. Для снижения размера входа алгоритма Эдельсбруннера-Летшера-Зомородяна разработан алгоритм редукции трехмерных цифровых изображений [1], основная идея которого заключается в том, что удаляются не свободные грани, а воксели целиком. В процессе работы алгоритм последовательно проверяет воксели в порядке уменьшения их номера в фильтрации. Для вокселя  $x$  со значением  $i$  в его окрестности  $N$  размера  $3 \times 3 \times 3$  проверяются следующие условия:

1. Количество компонент связности в  $X_i \cap N$  и  $(X_i \cap N) \setminus x$  совпадает.
2. Число компонент связности в  $X_i \cap N$  равно единице.
3. Эйлерова характеристика  $X_i \cap N$  равна эйлеровой характеристике  $(X_i \cap N) \setminus x$ .
4.  $x$  не принадлежит ни одному параллелепипеду размера  $1 \times 1 \times 2$ ,  $1 \times 2 \times 2$  или  $2 \times 2 \times 2$  из  $X_n$ , которому также принадлежит воксель со значением, превосходящим  $i$ .

В случае выполнения всех условий  $x$  удаляется из изображения, т.е. его значение принимается равным нулю. Затем происходит проверка всех соседних вокселей.

В разделе 3.3 представлено численное моделирование реактивного переноса в масштабе пор [10]. Постановка задачи: область, в которой определены уравнения, — прямоугольный параллелепипед  $\Omega = [X_1^{min}, X_1^{max}] \times [X_2^{min}, X_2^{max}] \times [X_3^{min}, X_3^{max}]$ . Эта область разделена на две непересекающиеся подобласти  $\Omega_p$  и  $\Omega_m$ , которые соответствуют поровому пространству и матрице породы. Одна из границ области  $\Omega$  обозначается как вход  $\Gamma_{inlet} = \{(X_1^{min}, x_2, x_3)\}$ , а другая — как выход  $\Gamma_{outlet} = \{(X_1^{max}, x_2, x_3)\}$ . На остальных четырех сторонах параллелепипеда задается условие непротекания, они обозначаются как  $\Gamma_{nf}$ . Дополнительно задается граница  $\Gamma(t)$ , определяющая зависящую от времени поверхность раздела порового пространства и матрицы породы. Поток жидкости в пространстве пор описывается стационарным уравнением Стокса. На границах  $\Gamma_{inlet}$  и  $\Gamma_{outlet}$  задается перепад давления. Перенос химически активных частиц определяется уравнением адвекции-диффузии. На границе  $\Gamma_{inlet}$  задается постоянная концентрация. Изменение границы раздела фаз в процессе химического растворения определяется уравнением движения  $\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = v_n(\vec{x}, t) = \frac{K_c k_r}{\rho} (C - C_s)$ , где  $C$  — массовая доля частиц,  $k_r$  — скорость гетерогенной реакции,  $C_s$  — равновесная концентрация,  $K_c$  — стехиометрический коэффициент, а  $\rho$  — плотность материала матрицы породы. Для решения системы уравнений используется метод поверхности уровня, который позволяет задать границу раздела порового пространства и матрицы породы неявно, как функцию расстояния со знаком, и конечно-разностный метод.

В разделе 3.4 описываются численные эксперименты по верификации алгоритма редукции трехмерных цифровых изображений на примере равномерного химического растворения образцов, полученных методом усеченного гауссова поля. В данной серии экспериментов сгенерированы изображения с пористостью  $\{0.05, 0.1, 0.15, 0.2\}$  и длиной корреляции —  $\{5, 10, 15, 20\}$ , 100 изображений размером  $250^3$  вокселей для каждой пары параметров, всего 1600 изображений. Построение фильтрации для каждого эксперимента проводится на 100 снимках, полученных в процессе численного моделирования равномерного химического растворения ( $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$ ). Рассчитывается время работы алгоритма Эдельсбруннера-Летшера-Зомородяна для исходной фильтрации и для фильтрации после редукции. Отношение этих времен обозначается  $c_S$ . Наибольшее значение ( $c_S = 14$ ) получено для образцов с более простой топологией: с маленькой пористостью и большой длиной корреляции, то есть для образцов с небольшим количеством крупных пор. И наоборот, наименьшее значение отношения времен ( $c_S = 1.2$ ) достигается для образцов с большим числом мелких пор [4].

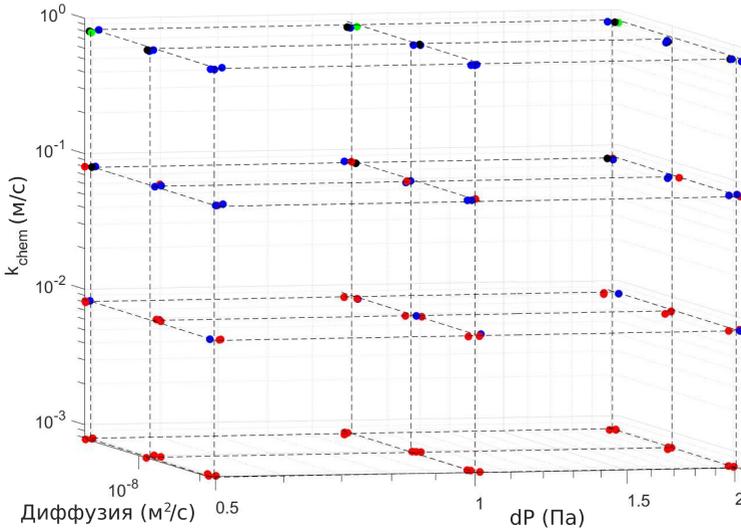


Рис. 5 — Соответствие между входными параметрами модели  $dP$ ,  $D$ ,  $k_{chem}$  и кластеризацией по персистентным диаграммам. Расположение точки соответствует координатам в пространстве входных параметров, а цвет — кластеру.

Исследование топологических изменений порового пространства породы, вызванных растворением с различными параметрами потока, представлено в разделе 3.5; в серии экспериментов рассматривается

КТ-изображение водоносной породы ближневосточного карбоната<sup>21</sup>. Из изображения вырезается подкуб размером  $200^3$  вокселей, что соответствует  $1 \text{ мм}^3$ . Варьируются четыре входных параметра модели:  $k_{chem} \in \{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0\}$  м/с,  $D \in \{10^{-9}, 10^{-8}, 10^{-7}\}$  м<sup>2</sup>/с,  $dP \in \{0.5, 1, 2\}$  Па,  $pH \in \{3, 4, 5\}$ . Для полученных фильтраций цифровых изображений, охватывающих 1000 секунд растворения, вычисляются персистентные диаграммы. Чтобы сгруппировать различные сценарии изменения топологии, проводится процедура кластеризации персистентных диаграмм методом  $k$ -средних. Значение  $k$  принимается равным четырем. В первом кластере растворение не начинается. Количество изменений топологии возрастает от кластера 2 к кластеру 4. Разная скорость изменения топологии в кластерах подтверждается рассчитанными значениями пористости и проницаемости и характером их взаимной зависимости. В частности, чем медленнее растворяется матрица, тем быстрее по отношению к пористости растет проницаемость. На рисунке 5 представлено соответствие между входными параметрами модели  $dP$ ,  $D$ ,  $k_{chem}$  и кластеризацией по персистентным диаграммам. Доминирующим параметром является скорость реакции. При этом, при низкой скорости реакции результаты не зависят от перепада давления и молекулярной диффузии. Однако при высоких скоростях реакции, где  $k_{chem} > 10^{-2}$ , на изменения в топологии порового пространства влияет диффузия, а не скорость потока [5].

## Заключение

В результате численных исследований, использования известных математических моделей и применения современного протестированного программного обеспечения разработано три алгоритма: алгоритм численного моделирования спекания темплатного сорбента на основе зерен  $CaO$  сферической формы, алгоритм численного моделирования спекания зернистых материалов с зёрнами произвольной формы и алгоритм редукции трехмерного цифрового изображения. Предложенные новые подходы имеют ряд преимуществ по сравнению с известными.

Во-первых, использование геометрической модели при разработке алгоритма спекания темплатного сорбента на основе зерен  $CaO$  сферической формы позволяет существенно снизить как сложность реализации алгоритма, так и вычислительное время. Учет геометрии дает возможность:

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

---

<sup>21</sup>Pore-Scale Dissolution by CO<sub>2</sub> Saturated Brine in a Multimineral Carbonate at Reservoir Conditions: Impact of Physical and Chemical Heterogeneity / Y. Al-Khulaifi [et al.] // Water Resources Research. 2019. Vol. 55, no. 4. P. 3171—3193.

— установить, что образец с пористостью  $0.21 \text{ см}^3/\text{г}$ , размером зерна  $500 \text{ нм}$  и средним размером пор  $500 \text{ нм}$  показывает максимальную эффективность сорбционной емкости и стабильность сорбции в течение 33 циклов.

Во-вторых, использование ограниченных областей для расчета параметров порядка вместе с перераспределением памяти в алгоритме численного моделирования спекания зернистых материалов с зернами произвольной формы позволяет проводить моделирование спекания образцов, состоящих из 8000 зерен, на сетке  $358^3$  с использованием одного графического ускорителя, объем памяти которого составляет 12 Гб. Описанный подход существенно снижает время вычислений и объем необходимой памяти, а именно:

— 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, при условии хранения в одном узле не более шести значений параметров порядка, 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). В проведенных численных экспериментах снижение до уровня LROP происходит после выполнения не более чем 3% от общего числа итераций.

Полученные в результате численного моделирования значения ошибки и параметра *SSA* позволяют сделать вывод, что ошибка, вносимая ограничением областей, незначительно влияет на величину площади поверхности образца и его структуру в целом.

В-третьих. Поскольку в основе алгоритма редукции трехмерных цифровых изображений лежит метод ретракции, выход алгоритма гарантированно содержит меньшее количество вокселей, чем входные данные. Что позволяет ускорить вычисления персистентных диаграмм в 15 раз. Однако, коэффициент ускорения зависит от сложности порового пространства, его структуры и динамики процесса растворения горной породы.

Кластеризация полученных в результате численных экспериментов зависимостей 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.

Дальнейшее развитие алгоритмов численного моделирования пористых сред может быть продолжено по следующим направлениям:

— анализ прочностных характеристик сорбентов на основе *CaO* путем численного моделирования разрушения сорбента методом дискретных элементов. Такой анализ необходим, поскольку внесение крупных пор

понижает прочность сорбента, а следовательно, и его практическую применимость;

— оптимизация сорбционных характеристик для сорбентов путем введения инертных частиц (стопоров спекания), которые могут физически предотвращать спекание и стабилизировать большую площадь поверхности сорбентов;

— параллелизация алгоритма численного моделирования спекания зернистых материалов с зёрнами произвольной формы для устройств с раздельной памятью с использованием MPI и CUDA.

## Публикации автора по теме диссертации

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. — URL: <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/1068>.
2. *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. — апр. — Т. 23, № 72. — С. 75–94. — URL: <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/1201>.
3. 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. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1383586620322206>.
4. *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.
5. 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. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877750321002052>.
6. Phenomenology and modeling of Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> porous grain sintering / V. Derevschikov [et al.] // Ceramics International. — 2023. — Vol. 49, no. 6. — P. 9452–9464. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884222041323>.

7. *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.
8. *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.
9. *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.
10. 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.
11. *Прохоров, Д. И.* Моделирование спекания оксида иттрия методом фазового поля с учетом большого количества зерен / Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, В. В. Лисица // Интерэкспо ГЕО-Сибирь. — 2022. — Т. 2. — С. 202—208.
12. 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.
13. *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.
14. *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.
15. *Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ.* CubicTopology\_Reduction / Д. И. Прохоров. — № 2022669497 ; заявл. 20.10.2022 ; опубл. 20.10.2022, 2022669497 (Рос. Федерация).