

## ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΕΙΩΜΕΝΗΣ ΤΑΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΠΟΘΕΣΗΣ ΑΠΟ ΑΤΜΟ

**Π. Α. Γκίνης\***, **Ε. Δ. Κορωνάκη**, **Α. Γ. Μπουντουβής**  
Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα  
(\*[pgkinis@chemeng.ntua.gr](mailto:pgkinis@chemeng.ntua.gr))

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Παρουσιάζεται μια υπολογιστική μεθοδολογία ανάπτυξης μοντέλων μειωμένης τάξης (Reduced Order Model: ROM) με εφαρμογή στη διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό (Chemical Vapor Deposition: CVD)<sup>[1]</sup>. Η περιγραφή και πρόβλεψη της συμπεριφοράς του αντιδραστήρα CVD απαιτεί σύνθετα μοντέλα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics: CFD) εκατομμυρίων αγνώστων, η επίλυση των οποίων απαιτεί σημαντικούς υπολογιστικούς πόρους και χρόνο και καθιστά επιτακτική την ανάγκη ανάπτυξης μοντέλων μειωμένης τάξης. Η μείωση της διάστασης (τάξης) του προβλήματος, βασίζεται στο συνδυασμό της Μεθόδου των Στιγμιότυπων (Method of Snapshots: MoS) που αποτελεί μία παραλλαγή της Ανάλυσης Κυρίων Συνιστωσών (Proper Orthogonal Decomposition: POD) και κατάλληλα εκπαιδευμένων τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Τα στιγμιότυπα είναι οι διαδοχικές καταστάσεις του αντιδραστήρα κατά τη μετάβαση από μια μόνιμη κατάσταση σε μια άλλη και παράγονται από ένα CFD μοντέλο χωρίς χημικές αντιδράσεις, με χρήση ενός αραιότερου του δέοντος πλέγματος διακριτοποίησης. Στόχος είναι η ανάπτυξη ενός μοντέλου μειωμένης τάξης, ικανοποιητικής ακρίβειας, που βασίζεται σε χαμηλής αξιοπιστίας δεδομένα που λαμβάνονται με χαμηλό υπολογιστικό κόστος. Τα στιγμιότυπα χρησιμοποιούνται για την εύρεση μιας ορθοκανονικής βάσης (συνήθως χαμηλής διάστασης) του χώρου που τα περιέχει, καθώς και για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων για την γρήγορη πρόβλεψη των χρονικά εξαρτώμενων συντελεστών του μοντέλου μειωμένης τάξης. Η πρόβλεψη του μοντέλου οπωσδήποτε δεν είναι ικανοποιητική λόγω της χαμηλής αξιοπιστίας δεδομένων από τα οποία κατασκευάστηκε, είναι όμως επαρκής ώστε όταν τροφοδοτείται σε ένα πλήρες, μεγάλης κλίμακας μοντέλο της διεργασίας, η σύγκλιση κατά την επίλυση να προκύπτει σε σημαντικά μικρότερο χρόνο. Με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται αξιοσημείωτη επιτάχυνση υπολογισμών για την παραμετρική ανάλυση της διεργασίας και την εμβάθυνση στα φυσικά φαινόμενα και τις χημικές αντιδράσεις που επικρατούν<sup>[2,3]</sup>.

### ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η CFD έχει εξελιχθεί σε ένα καθιερωμένο εργαλείο για την εις βάθος ανάλυση σύνθετων διεργασιών. Οι σύγχρονοι κώδικες CFD επιτρέπουν την προσομοίωση της μεταφοράς μάζας, ορμής, ενέργειας και χημικών συστατικών σε ρεαλιστικές γεωμετρίες με μεγάλη ακρίβεια. Παρ' όλα αυτά, η προσομοίωση ρεαλιστικών εφαρμογών είναι δύσκολη, όχι μόνο λόγω του μεγέθους του προβλήματος που συνδέεται με τον μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας, αλλά και λόγω των ακόμη ανεξερεύνητων πτυχών της μελετώμενης διεργασίας.

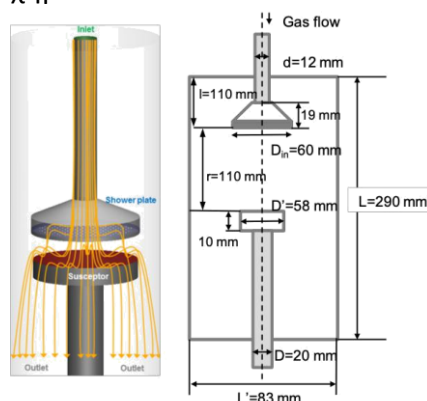
Η CVD είναι μια δημοφιλής μέθοδος για την παραγωγή μεγάλης κλίμακας επιστρώσεων και υμενίων σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών, από σκληρές επικαλύψεις εργαλείων μέχρι τους ημιαγωγούς αιχμής στην τεχνολογία των επεξεργαστών<sup>[4-6]</sup>. Οι διεργασίες CVD μελετώνται με μοντέλα CFD, με τη σημαντικότερη συνεισφορά να αποτελεί η διερεύνηση των κυρίαρχων φυσικών μηχανισμών, των κατανομών των πεδίων ροής και των χημικών οδών που οδηγούν στην απόθεση του επιθυμητού υμενίου από τις επιλεγμένες πρόδρομες ενώσεις<sup>[7,8]</sup>. Αυτό επιτυγχάνεται συνδυάζοντας πειραματικές μετρήσεις και προβλέψεις των μοντέλων CFD στα οποία μπορούν να δοκιμαστούν διάφορα υποψήφια δίκτυα χημικών αντιδράσεων, με σκοπό να βρεθεί το επικρατέστερο<sup>[9]</sup>. Το συγκεκριμένο είδος έρευνας είναι αρκετά χρονοβόρο, ειδικά όταν πρέπει να μελετηθούν νέες πρόδρομες ενώσεις σε αντιδραστήρες που παρουσιάζουν μη

γραμμική συμπεριφορά στο «παράθυρο» παραμέτρων λειτουργίας του αντιδραστήρα που αφορά την απόθεση. Επομένως, δημιουργείται η ανάγκη για γρήγορα και ακριβή ROM των πλήρων CFD μοντέλων της διεργασίας. Στην περίπτωση της CVD, το μίγμα των εισερχόμενων αερίων που περιλαμβάνει τα φέροντα αέρια και την πρόδρομη ένωση είναι τόσο αραιό ώστε το αποτέλεσμα της εξάντλησης της πρόδρομης ένωσης στην αναπτυσσόμενη ροή να είναι αμελητέο, έτσι μπορεί να αγνοηθεί η χημεία στο στάδιο κατασκευής του ROM<sup>[8,10]</sup>.

Η προσέγγιση που παρουσιάζεται εδώ επικεντρώνεται στην κατασκευή ενός ROM που περιγράφει τη μεταφορά μάζας, ορμής και θερμότητας με βάση τη μέθοδο POD που προτάθηκε από τον Sirovich<sup>[12]</sup>. Το σημαντικό είναι ότι η συλλογή των στιγμιότυπων προέρχεται από CFD υπολογισμούς χαμηλής αξιοπιστίας, δηλαδή με χρήση αραιών υπολογιστικών πλεγμάτων χωρίς μοντέλο χημείας, με το σκοπό να μειωθεί ακόμη περισσότερο το συνολικό υπολογιστικό κόστος, μειώνοντας το κόστος κατασκευής του ROM. Μια άλλη σημαντική πτυχή της προτεινόμενης προσέγγισης είναι ότι οι συντελεστές χρονικής εξάρτησης της βάσης POD στο ROM καθορίζονται μέσω Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (Artificial Neural Networks: ANN)<sup>[13]</sup>. Αυτό παρακάμπτει την ανάγκη προβολής τύπου Galerkin των εξισώσεων στη βάση POD για την εύρεση των συντελεστών. Επομένως, η προσέγγιση είναι «ελεύθερη» από εξισώσεις και βασίζεται μόνο σε δεδομένα.

## Η ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ

Μελετάται απόθεση υμενίων αλουμινίου (Al) με χρήση της πρόδρομης ένωσης υδρίδιο αλουμινίου (AlH<sub>3</sub>) σε έναν κατακόρυφο, κυλινδρικό, θερμαινόμενων τοιχωμάτων, ανοξειδωτού μεταλλοργανικού (Metalorganic CVD: MOCVD) αντιδραστήρα CVD ο οποίος έχει περιγραφεί λεπτομερώς σε προηγούμενες εργασίες<sup>[9,14]</sup>. Η γεωμετρία του αντιδραστήρα, μαζί με σχετικές διαστάσεις, παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.



**Σχήμα 1.** Σχηματική αναπαράσταση του πειραματικού αντιδραστήρα CVD.

Οι υπολογισμοί εκτελούνται υπό σταθερές συνθήκες, οι οποίες συνοψίζονται στον Πίνακα 1 και περιγράφονται λεπτομερέστερα σε προηγούμενες εργασίες<sup>[9]</sup>.

**Πίνακας 1.** Πειραματικές συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα.

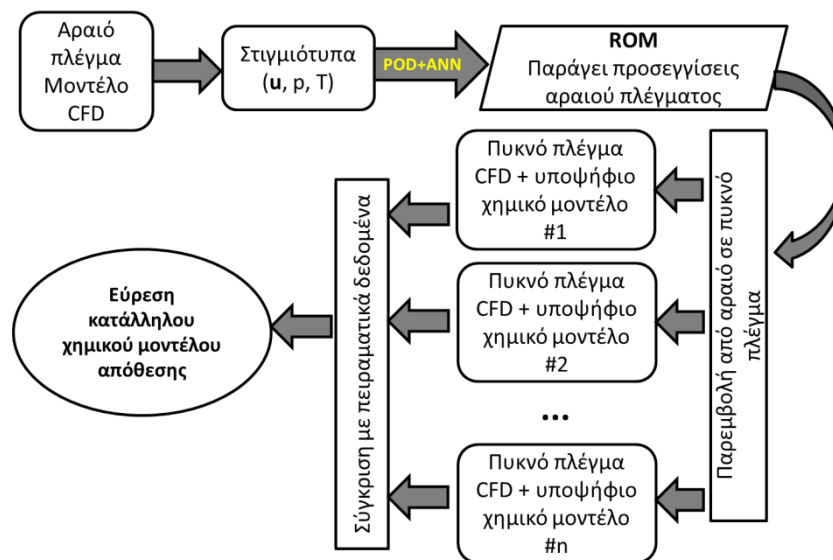
Συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα CVD	
Πίεση, $P_{tot}$ (Torr)	10
Θερμοκρασία τοιχωμάτων (°C)	75
Μέγιστη παροχή AlH <sub>3</sub> (sccm)	1.85
Διάρκεια απόθεσης (h)	1
Θερμοκρασίες απόθεσης (°C)	139-241

Τα μοντέλα CFD που έχουν αναπτυχθεί για το συγκεκριμένο αντιδραστήρα CVD, βασίστηκαν στην υπόθεση ότι η γεωμετρία είναι συμμετρική ως προς τον άξονα συμμετρίας, αγνοώντας το γεγονός

ότι η διάτρητη κεφαλή του καταιωμιστήρα, ο οποίος χρησιμοποιείται για να εξασφαλίσει την ομοιόμορφη κατανομή των εισερχόμενων αερίων πάνω από το υπόστρωμα όπου γίνεται η απόθεση, προκαλεί ασυμμετρία. Η απλούστευση αυτή, η οποία οδηγεί σε ένα δι-διάστατο υπολογιστικό μοντέλο, έγινε για να μειωθούν οι συνολικοί απαιτούμενοι υπολογιστικοί πόροι. Αυτό ήταν απαραίτητο κυρίως επειδή, για την εύρεση του σωστού δικτύου χημικών αντιδράσεων έπρεπε να γίνουν υπολογισμοί CFD για διάφορα υποψήφια δίκτυα χημικής απόθεσης, με τη συμμετοχή πολλών ενδιάμεσων συστατικών. Παρόλα αυτά, συχνά, ακόμη και σε πραγματικά συμμετρικές γεωμετρίες, το τρι-διάστατο υπολογιστικό μοντέλο οδηγεί σε πιο ρεαλιστικές προσομοιώσεις της διεργασίας<sup>[10,11]</sup>. Συνεπώς, δημιουργείται η ανάγκη για τρι-διάστατους υπολογισμούς και το παρόν έργο στοχεύει στη μείωση του υπολογιστικού κόστους αυτών.

## ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ<sup>[2]</sup>

Στη συνέχεια περιγράφεται το προτεινόμενο υπολογιστικό πλαίσιο για τη δημιουργία ROMs. Το πλαίσιο συνοψίζεται στο Σχήμα 2.



**Σχήμα 2.** Σχηματική απεικόνιση του υπολογιστικού πλαισίου δημιουργίας ROM.

Ως πρώτο βήμα, συλλέγονται τα στιγμιότυπα, δηλαδή οι καταστάσεις του συστήματος στο χρόνο, που προέρχονται από ένα μοντέλο τριών διαστάσεων CFD του πειραματικού αντιδραστήρα, το οποίο χρησιμοποιεί ένα, σκοπίμως, αραιό υπολογιστικό πλέγμα. Αυτά τα στιγμιότυπα αποτελούν μέρος της ακολουθούμενης τροχιάς του αντιδραστήρα, καθώς εξελίσσεται από την αρχική σταθερή κατάσταση στην τελική, δεδομένης μιας βηματικής μεταβολής στην παροχή εισόδου. Οι βηματικές επιβολές που εφαρμόζονται, παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.

**Πίνακας 2.** Τιμές της παροχής εισόδου στις βηματικές επιβολές.

<b>Αρχική παροχή εισόδου (sccm)</b>	1.5	1.9	1.5	1.8	1.7	1.9	1.9
<b>Τελική παροχή εισόδου (sccm)</b>	2.0	1.5	1.8	2.0	1.5	2.0	1.7

Οι εξισώσεις που περιγράφουν τη μεταφορά της ορμής, θερμότητας και μάζας μέσα στον αντιδραστήρα διακριτοποιούνται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων σε ένα αραιό υπολογιστικό πλέγμα που αποτελείται από 309155 κελιά και επιλύονται (πυκνό πλέγμα=1232468 κελιά), μαζί με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες, με τον εμπορικό κώδικα CFD ANSYS/Fluent. Το μοντέλο CFD αντιμετωπίζεται ως «μαύρο κουτί» που χρησιμοποιείται από έναν εξωτερικό κώδικα Matlab για την συλλογή των δεδομένων. Κάθε φορά που εκτελείται ο κώδικας CFD,

εκτελείται μία χρονική ολοκλήρωση σε χρονικό ορίζοντα 0.1s, έχοντας ως αρχική συνθήκη το αποτέλεσμα του προηγούμενου βήματος ολοκλήρωσης. Ο εξωτερικός κώδικας αποθηκεύει τα αποτελέσματα κάθε χρονικού βήματος, σε μια βιβλιοθήκη στιγμιότυπων για περαιτέρω επεξεργασία. Εδώ κάθε στιγμιότυπο είναι ένα διάνυσμα μεγέθους  $N=1545775$  στοιχείων που περιέχει τις τιμές της πίεσης, θερμοκρασίας και των τριών συνιστωσών της ταχύτητας σε κάθε σημείο διακριτοποίησης.

Τα παραπάνω δεδομένα επεξεργάζονται με τη MoS<sup>[12]</sup>. Η MoS βρίσκει τη βέλτιστη βάση χαμηλής διάστασης που αντιπροσωπεύει την συλλογή των υψηλής διάστασης διανυσμάτων κατάστασης. Αρχικά κατασκευάζεται ο πίνακας τροχιών  $\mathbf{Y}$  που φαίνεται στην εξίσωση (1),

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_1(t), \dots, \mathbf{x}_k(t)] \in \mathbb{R}^{N \times k} \quad (1)$$

κάθε στήλη  $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^N$  αποτελεί ένα στιγμιότυπο του αντιδραστήρα στο χρόνο  $t$ . Στη συνέχεια υπολογίζονται οι ιδιοτιμές  $\lambda$  και τα ιδιοδιανύσματα  $\mathbf{v}$  του πίνακα συσχέτισης  $\mathbf{K}_1$  και κατασκευάζεται η ορθοκανονική βάση  $\mathbf{Z}$  που αποτελείται από τα  $d$  πρώτα ιδιοδιανύσματα κατά φθίνουσα σειρά ιδιοτιμών, όπως φαίνεται στις εξισώσεις (2).

$$\mathbf{K} = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{Y}^T \mathbf{T} \in \mathbb{R}^{k \times k}, \quad k \ll N \quad (2)$$

$$\mathbf{K}_1 \mathbf{v}_j = \lambda_j \mathbf{v}_j, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

$$\mathbf{Z} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_d] \in \mathbb{R}^{k \times d}$$

Έτσι κάθε διάνυσμα του πίνακα στιγμιότυπων  $\mathbf{Y}$  δίνεται από τον γραμμικό συνδυασμό της μορφής  $\hat{\mathbf{x}}_i = \mathbf{Z}\mathbf{a}_i$ , όπου  $\mathbf{a}$  οι χρονικά εξαρτώμενοι συντελεστές. Στην παρούσα εργασία λόγω του ότι αποφεύγεται η επεξεργασία των εξισώσεων που διέπουν τον αντιδραστήρα και αντιμετωπίζονται ως μαύρο κουτί, η εύρεση των συντελεστών  $\mathbf{a}$  γίνεται μέσω ANN. Χρησιμοποιείται το δίκτυο NARX (nonlinear autoregressive network with external inputs) με 1 κρυφό επίπεδο και εκπαιδεύεται με χρήση δεδομένων ίδιας μορφής με αυτά στο στάδιο κατασκευής της βάσης. Οι δύο πιο σημαντικές παράμετροι που πρέπει να προσδιοριστούν κατά τη δημιουργία της βάσης είναι η διάσταση του  $\mathbf{Y}$ , που αποτελεί τον αριθμό των στιγμιότυπων που χρησιμοποιήθηκαν και η διάσταση της βάσης  $\mathbf{Z}$ ,  $d$ , που είναι η τελική διάσταση του ROM. Στην περίπτωση των ANN, η παράμετρος που προσδιορίζεται είναι ο αριθμός των νευρώνων. Οι τρεις αυτές παράμετροι καθορίζονται μέσω μιας διερεύνησης που περιγράφεται συνοπτικά παρακάτω.

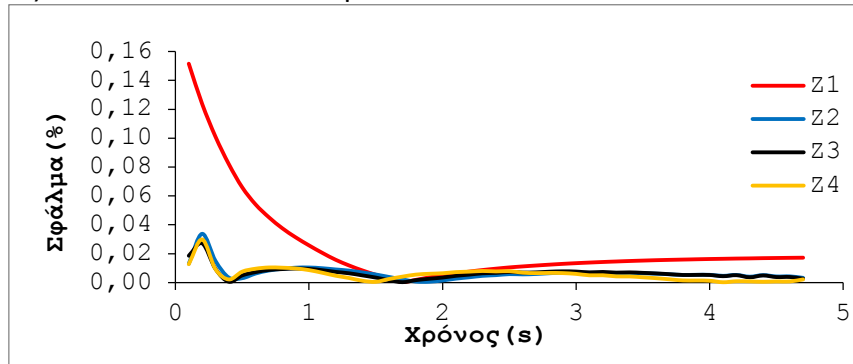
### ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΕΙΣ ΚΑΙ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Αρχικά, χρησιμοποιώντας δεδομένα από τις επιβολές 1 έως 4 του Πίνακα 2 δημιουργούνται ορθοκανονικές βάσεις για διαφορετικό αριθμό ιδιοδιανυσμάτων. Στο Σχήμα 3 φαίνεται το σφάλμα στο χρόνο για κάθε διάσταση της βάσης στην περίπτωση της επιβολής 5 του Πίνακα 2 που αποτελεί επιβολή της οποίας τα δεδομένα δεν χρησιμοποιούνται κατά την κατασκευή της βάσης (εξωτερική επιβολή). Η εύρεση του σφάλματος μεταξύ των διανυσμάτων κατάστασης που προέρχονται από τον CFD υπολογισμό  $\mathbf{x}_i$  και αυτών που προέρχονται από το ROM  $\hat{\mathbf{x}}_i$  γίνεται μέσω της εξίσωσης (3).

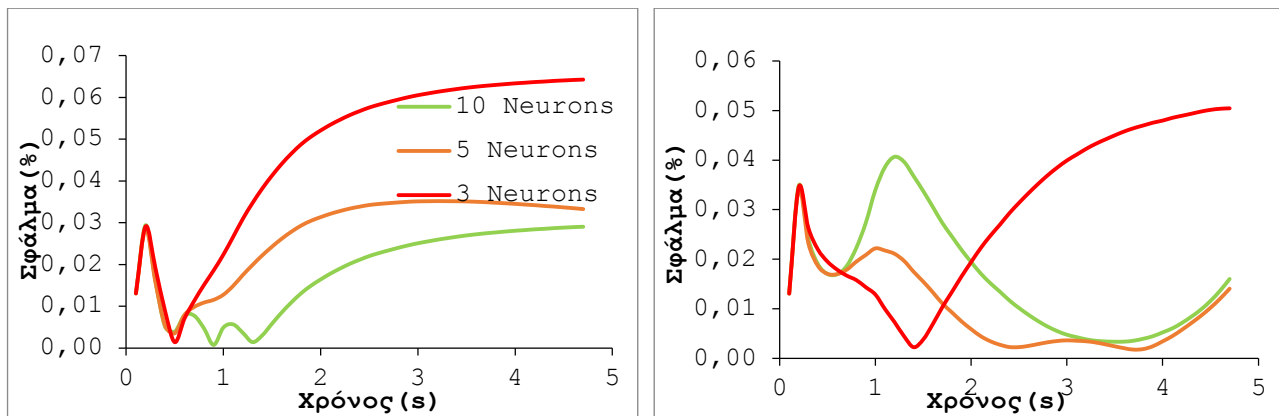
$$e(i) = \left\| \frac{\mathbf{x}_i - \hat{\mathbf{x}}_i}{\|\mathbf{x}_i\|} \right\| \quad (3)$$

Στη συνέχεια επιλέγεται η βάση με 2 ιδιοδιανύσματα επειδή δεν εμφανίζεται μείωση του σφάλματος για περαιτέρω αύξηση της διάστασης της βάσης και διερευνάται ο αριθμός των νευρώνων που χρησιμοποιούνται στα ANN κατά την εκπαίδευσή τους. Στο Σχήμα 4 φαίνεται το σφάλμα μεταξύ της αναπαράστασης των διανυσμάτων κατάστασης από το τελικό ROM και αυτών από τους CFD υπολογισμούς για μία εσωτερική και μία εξωτερική επιβολή αντίστοιχα. Προκύπτει

ότι, το νευρωνικό δίκτυο με τους 5 νευρώνες αναπαριστά ικανοποιητικά τις καταστάσεις του αντιδραστήρα και επιλέγεται ως ο τελικός αριθμός νευρώνων. Αξίζει να σημειωθεί ότι, συνήθως αποφεύγεται η χρήση περισσότερων νευρώνων στα ANN από όσους χρειάζονται ώστε να μην εμφανίζεται το φαινόμενο υπερ-προσαρμογής, όπου το δίκτυο επικεντρώνεται κυρίως στις εσωτερικές επιβολές και αδυνατεί να γενικεύσει, οπότε αποτυγχάνει να αναπαραστήσει καταστάσεις εκτός του συνόλου των δεδομένων του.



**Σχήμα 3.** Εξέλιξη σφαλμάτων για διάφορες διαστάσεις της βάσης POD, κατά μήκος μιας τροχιάς που δεν περιλαμβάνεται στην αρχική συλλογή στιγμιότυπων



**Σχήμα 4.** Σφάλμα προσέγγισης του ROM για τροχιά που χρησιμοποιείται (αριστερά) και που δεν χρησιμοποιείται (δεξιά) για την εκπαίδευση των ANN.

Οι προκύπτουσες προσεγγίσεις του ROM που προέρχονται όπως προαναφέρθηκε από δεδομένα χαμηλής αξιοπιστίας, τροφοδοτούνται μέσω παρεμβολής ως αρχική κατάσταση κάθε φορά στο λεπτομερές μοντέλο υψηλής αξιοπιστίας με πυκνό υπολογιστικό πλέγμα και χημικές αντιδράσεις και το τελευταίο επιλύεται για ελάχιστα βήματα του επιλύτη δίνοντας το τελικό αποτέλεσμα υψηλής αξιοπιστίας σε λιγότερο χρόνο, μειώνοντας σημαντικά το υπολογιστικό κόστος. Συγκεκριμένα οι συγκρίσεις της υπολογιστικής διάρκειας/κόστους για κάθε περίπτωση εμφανίζονται στον Πίνακα 3 και φαίνεται ξεκάθαρα η συμβολή του ROM στη μείωση του υπολογιστικού κόστους με υπολογιστικές επιταχύνσεις που ξεπερνούν ακόμη και τις 300 φορές.

**Πίνακας 3.** Σύγκριση των απαιτούμενων υπολογιστικών χρόνων για την επίλυση του μοντέλου με και χωρίς αντιδράσεις.

	Χωρίς αντιδράσεις	Με αντιδράσεις
Λεπτομερές μοντέλο	6.5 CPU h x 12 πυρήνες = 78 core hours	7.5 CPU h x 12 πυρήνες = 90 core hours
ROM βασισμένο σε χαμηλής αξιοπιστίας δεδομένα	17 CPU min (~0,25 h) σε ένα πυρήνα	3 CPU h x 12 πυρήνες = 36 core hours
Υπολογιστική επιτάχυνση	x 312	x 2,5

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Παρουσιάζεται ένα υπολογιστικό πλαίσιο που συνδυάζει τη μέθοδο των στιγμιότυπων (MoS) με τεχνητά νευρωνικά δίκτυα για τη δημιουργία ενός μοντέλου μειωμένης τάξης για μία διεργασία CVD μεγάλης κλίμακας. Τα στιγμιότυπα που απαιτούνται για τη μέθοδο POD προέρχονται από ένα μοντέλο CFD της διεργασίας που χρησιμοποιεί ένα αραιό υπολογιστικό πλέγμα. Αυτά τα στιγμιότυπα δεν αποτελούν ικανοποιητικές προσεγγίσεις της πραγματικής κατάστασης του αντιδραστήρα, αλλά το υπολογιστικό κόστος της συλλογής τους είναι σχετικά μικρό, μειώνοντας έτσι το κόστος κατασκευής του ROM. Μόλις κατασκευαστεί, το ROM χρησιμοποιείται για την παραγωγή γρήγορων προσεγγίσεων των καταστάσεων του αντιδραστήρα σε νέες τιμές παραμέτρων οι οποίες στη συνέχεια χρησιμοποιούνται ως αρχικές εκτιμήσεις στο λεπτομερές μοντέλο με χημικές αντιδράσεις για την λήψη του τελικού αποτελέσματος. Το αποτέλεσμα λαμβάνεται σε σημαντικά μειωμένο υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με την απευθείας επίλυση του υψηλής αξιοπιστίας μοντέλου. Τέλος, τα αποτελέσματα δείχνουν υπολογιστική επιτάχυνση κατά 2.5 φορές όταν μοντελοποιούνται οι αντιδράσεις και παραπάνω από 300 φορές χωρίς αντιδράσεις.

## ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η Επιτροπή Ερευνών ΕΜΠ υποστήριξε την εργασία μέσω υποτροφίας στον υποψήφιο διδάκτορα Π. Γκίνη.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] W. H. Schilders, H. A. Van der Vorst, J. Rommes. Vol. 13 Springer, Berlin. (2008)
- [2] P. A. Gkinis, E. D. Koronaki, A. Skouteris, I. G. Aviziotis, A. G. Boudouvis. Chemical Engineering Science 199 (2019) 371-380.
- [3] E. D. Koronaki, P. A. Gkinis, L. Beex, S. P. A. Bordas, C. Theodoropoulos, A. G. Boudouvis. Comput. & Chem. Eng. 121 (2019) 148-157.
- [4] R. P. Pawlowski, A. G. Salinger, L. A. Romero, J. N. Shadid. Journal de Physique IV 11 (2001) Pr3-197-Pr3-204.
- [5] C. Theodoropoulos, N. K. Ingle, T. J. Mountziaris. Journal of Crystal Growth 170 (1997) 72-76.
- [6] C. Theodoropoulos, T. J. Mountziaris, H. K. Moffat, J. Han. Journal of Crystal Growth 267 (2000) 65-81.
- [7] P. A. Gkinis, E. D. Koronaki, G. P. Gakis, A. G. Boudouvis. Journal of Crystal Growth 458 (2017) 140-148.
- [8] N. Cheimarios, E. D. Koronaki, A. G. Boudouvis. Comput. & Chem. Eng. 35 (2011) 2632-2645.
- [9] G. M. Psarelis, I. G. Aviziotis, T. Duguet, C. Vahlas, E. D. Koronaki, A. G. Boudouvis. Chem. Eng. Sci. 177 (2018) 464-470.
- [10] E. D. Koronaki, N. Cheimarios, H. Laux, A. G. Boudouvis. ECS Solid State Lett 3 (2014) 37.
- [11] N. Cheimarios, M. E. Kavousanakis, G. Kokkoris, A. G. Boudouvis. Comput. & Chem. Eng. 124 (2019) 124-132.
- [12] L. Sirovich. I-III Q. Appl. Math. 45 (1987) 561-590.
- [13] W. Xie, I. Bonis, C. Theodoropoulos. J. Process Control 35 (2015) 50-58.
- [14] T. C. Xenidou, A. G. Boudouvis, N. C. Markatos, D. Samélor, F. Senocq, N. Prud'Homme, C. Vahlas. Surf. Coat. Technol. 201 (2007) 8868-8872.