

На правах рукописи

ПОЛИЩУК

Игорь Николаевич

**ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ  
ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО АУСТЕНИТА В СТАЛИ**

05.13.18 – Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Тюмень – 2010

Работа выполнена на кафедре информационных систем Института математики и компьютерных наук ГОУ ВПО Тюменский государственный университет

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор  
Ивашко Александр Григорьевич

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор  
Инютин Сергей Арнольдович  
доктор химических наук, профессор  
Андреев Олег Валерьевич

Ведущая организация: ГОУ ВПО Тюменский государственный  
нефтегазовый университет

Защита диссертации состоится «25» июня 2010 г. в 14<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета Д 212.274.14 при Тюменском государственном университете по адресу 625003, г. Тюмень, ул. Перекопская, 15А, ауд. 410.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тюменского государственного университета.

Автореферат разослан «24» мая 2010 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Н.Н. Бутакова

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** В современном производстве все чаще требуется изготовление конструкционных деталей используемых при высоких нагрузках, что требует их высоких механических свойств. Для достижения необходимых свойств деталей применяется термическая обработка. Для прогнозирования свойств и структуры стали после термической обработки применяется исследование структурных превращений.

Экспериментальное исследование структурных превращений в результате термической обработки заключается в построении изотермических и термокинетических диаграмм, а также в изучении прокаливаемости стали. В тоже время, экспериментальное изучение структурных превращений имеет ограниченное применение. Изотермические диаграммы используются только для качественной оценки влияния химического состава на процесс распада аустенита. Термокинетические диаграммы не могут дать достоверных сведений о структуре стали, если режим охлаждения отличается от режимов охлаждения в экспериментах. По этой причине термокинетические диаграммы используются только для количественной оценки устойчивости аустенита при непрерывном охлаждении. Прокаливаемость не дает возможность прогнозировать структуру стали после термической обработки на основе ее химического состава, так как является характеристикой только конкретной марки стали.

Ограничения, связанные с методикой представления экспериментальных данных, можно уменьшить за счет создания математических моделей, параметры которых определяются на основе выше перечисленных экспериментов.

В области моделирования кинетики фазовых превращений наиболее фундаментальные исследования были проведены в работах А.Н. Колмогорова и М. Авраами, которые описывают аналитические уравнения, где объем вновь образуемой фазы ставится в зависимость от вероятности зарождения центров, линейной скорости их роста и прошедшего времени.

В отечественной школе фундаментальный обзор математического моделирования процесса фазовых превращений был проведен в работе Б.Я. Любова. Наиболее полная зарубежная работа, освящающая основные направления в моделировании фазовых превращений является работа Дж. Кристиана. В обоих трудах указано, что аналитические модели не учитывают явно процесс нестационарного зарождения, что противоречит физике процесса. Также отмечено, что аналитические модели не позволяют рассматривать процесс образования отдельных зерен и их роста.

Помимо аналитических моделей существует подход, заключающийся в имитации процесса зарождения и роста на основе модели И.Л. Миркина, в

которой предлагается изучать процесс кристаллизации с помощью двухмерных схем. Модель учитывает стохастическую природу процесса, учитывает инкубационный период и позволяет получить размер зерна. В тоже время стохастическая природа образования центров кристаллизации в модели не реализована в полном объеме. В данной модели пространство расплава и кристаллов представляется в виде набора элементарных фрагментов, на подобии растрового изображения в компьютерной графике, что затрудняет реализацию модели в трехмерном пространстве, а также описание процесса в непрерывном пространстве и времени.

В настоящее время проблемами моделирования фазовых превращений в нашей стране занимаются несколько школ, среди которых можно выделить школы под руководством академика В.Н. Анциферова (Пермский государственный технический университет) и профессора Ю.Г. Гуревича (Курганский машиностроительный институт), которые занимаются моделированием фазовых превращений в порошковых сталях. Группа авторов под управлением Д.А. Мирзаева (Южно-Уральский государственный университет) занимается моделированием структурных превращений в сталях. В качестве примера моделирования процесса зарождения и роста в специальных сплавах можно привести работы В.Я. Шура (Уральский государственный университет им. А.М. Горького), посвященные изучению эволюции сегнетоэлектрической доменной структуры в электрическом поле.

Современные исследования, связанные с моделированием фазовых превращений в стали, не дают возможность решить проблему количественного описания фазовых превращений при любых скоростях охлаждения, что в свою очередь не дает возможность прогнозировать структуру детали после термической обработки. Также не решены вопросы моделирования нестационарного зарождения структурных составляющих.

**Целью работы** является создание векторной имитационной модели распада аустенита, реализующей стохастическую природу процесса фазовых превращений, которая позволила бы реализовать симуляцию процесса распада аустенита в стали, при любой кинетике охлаждения.

Для достижения поставленной цели определены следующие **задачи исследования**:

- 1) создание векторного представления структуры стали в трехмерном пространстве, которое даст возможность описать каждую структурную составляющую в любой момент времени и в любой точке пространства термообрабатываемой детали;
- 2) создание стохастической модели зарождения и роста структурных составляющих в результате распада аустенита при термической обработке стали;
- 3) разработка алгоритма определения кинетических параметров векторной имитационной модели распада аустенита по данным кинетических диаграмм полученных в изотермических условиях;

- 4) разработка комплекса программ, реализующих разработанные модели и алгоритмы, доступ к которым осуществляется посредством web-технологий;
- 5) проведение вычислительных экспериментов по имитации распада аустенита с помощью программного комплекса, с целью проверки адекватности разработанных методов и моделей.

**Методы исследований.** При решении поставленных задач используются аппарат теории массового обслуживания, методы оптимизации, математическая статистика, аналитическая геометрия, Web-технологии, GRID-технологии.

**Достоверность и обоснованность результатов** определяется использованием и применением хорошо разработанных математических методов и алгоритмов теории массового обслуживания и математического программирования, а также вычислительным экспериментом, подтвердившим адекватность математических моделей и комплекса программ реализующего их.

**На защиту выносятся:**

- 1) векторная модель структуры стали, полученной в результате распада аустенита при термической обработке стали;
- 2) векторная имитационная модель распада аустенита;
- 3) модифицированный метод Хука-Дживса, нахождения кинетических параметров с учетом статистического критерия;
- 4) архитектура программного комплекса имитационного моделирования распада аустенита.

**Научная новизна работы** заключается в следующем:

- 1) создана векторная модель структуры стали, позволяющая описать каждую структурную составляющую в любой момент времени и в любой точке пространства;
- 2) разработана векторная имитационная модель распада аустенита, которая дает возможность реализовать математический аппарат теории массового обслуживания, что позволяет проводить имитационные эксперименты на основе событийного представления кинетики фазового превращения;
- 3) обоснован метод получения термокинетических диаграмм исходя из кинетических параметров модели, полученных на основе экспериментальных изотермических диаграмм.

**Практическая значимость работы.** Создан программный комплекс имитационного моделирования распада аустенита при изотермических и термокинетических условиях, реализующий векторную имитационную модель

распада аустенита, который позволяет прогнозировать кинетику распада аустенита и структуру при любой скорости охлаждения стали.

**Реализация и внедрение результатов работы.** Работа выполнена в рамках грантов правительства РФ в области фундаментальных исследований:

- 1) Научные исследования по тематическому плану научно-исследовательских работ №73-01 от 27.11.2006 «Разработка теоретических основ влияния пористости на кинетические параметры распада переохлажденного аустенита». Регистрационный номер НИР 01.20703455.
- 2) Аналитическая ведомственная целевая программа Министерства образования и науки Российской Федерации «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010)» - «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении». Регистрационный номер НИР 2.1.2/6498;

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы были представлены на четырех всероссийских (Пенза, Новосибирск, Томск) и двух международных конференциях: «Математические методы в технике и технологиях» (Ярославль) и «Информационно–вычислительные технологии и их приложения» (Пенза).

**Публикации.** Основное содержание работы отражено в 13 публикациях, из которых 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ и 2 статьи опубликованы в журнале из списка ВАК.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 130 страниц, содержит 24 рисунка, 2 таблицы, 2 приложения. В библиографии представлено 117 наименований работ российских и зарубежных авторов.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность темы, дается обзор работ, непосредственно примыкающих к теме диссертации, определяются цели исследования, отмечается научная новизна и практическая значимость работы.

**В первой главе** диссертационной работы проводился анализ различных подходов в исследовании кинетики распада переохлажденного аустенита в стали при ее термической обработке.

Рассматривается экспериментальное изучение фазовых превращений, которое заключается в построении изотермических и термокинетических диаграмм, а также в изучении прокаливаемости стали на основе данных эксперимента.

Прокаливаемость дает возможность выбрать сталь для конкретной детали, но не дает возможность прогнозировать структуру стали после термической обработки, так как не позволяет рассматривать кинетику превращения. Термокинетические диаграммы позволяют рассматривать кинетику превращения, но попытки построить термокинетические диаграммы по данным прокаливаемости не привели к успеху.

Существуют способы прогнозирования прокаливаемости стали по данным термокинетических диаграмм. Но при построении термокинетических диаграмм в различных исследованиях используются разные способы для установки желаемого режима охлаждения, в том числе используются различные теплоизоляционные материалы, наносимые на образцы. В результате кинетика охлаждения, а соответственно и кинетика распада в различных экспериментах получается разная. Также при структурных превращениях происходят тепловыделения, в результате чего ошибка при прогнозировании прокаливаемости на основе термокинетических диаграмм может достигать двадцати процентов. Все эти факторы ограничивают применение термокинетических диаграмм качественной оценкой влияния химического состава на процесс распада аустенита при непрерывном охлаждении.

Есть работы в которых ставится задача прогнозирования термокинетической диаграммы на основе изотермической диаграммы, но точность этого прогноза низкая. По этим причинам изотермические диаграммы используются только для оценки влияния химического состава на процесс распада аустенита.

Важно отметить, что изотермические диаграммы не могут быть использованы для прогнозирования кинетики распада аустенита и при изотермической закалке, так как они строятся при условии быстрого охлаждения образца до заданной температуры и выдержке при этой температуре, что для массивной детали будет соблюдаться только на поверхности.

Таким образом, исследование изотермических и термокинетических диаграмм, а также прокаливаемости стали имеет ограниченное применение, которое можно уменьшить за счет создания математических моделей, параметры которых определяются на основе выше перечисленных экспериментов.

Рассмотренное математическое моделирование процесса в свою очередь разделяется на построение аналитических и имитационных моделей. Большинство аналитических моделей строятся на основе модели А.Н. Колмогорова и уравнения М. Авраами, которые на основе двух кинетических параметров, скорости роста и вероятности зарождения, позволяют получать долю вновь образуемой фазы во времени. Также существуют модели, которые описывают процесс превращения дифференциальным уравнением. Но получить кинетические параметры на основе экспериментальных данных в аналитических моделях не представляется

возможным. Более того, в этих моделях нет возможности получить такой параметр как размер зерна, который существенно влияет на характеристики образца после термической обработки.

Хотя модели А.Н. Колмогорова и М. Авраами описывают стохастический процесс, на практике используются модели, в которых вероятность зарождения центров структурных составляющих заменяется ее усредненной характеристикой - скоростью зарождения. Таким образом, стохастическая природа процесса игнорируется. Также аналитические модели не учитывают наличие инкубационного периода, доказанного экспериментально. Согласно этим моделям превращение начинается в нулевой момент времени.

Указано что помимо аналитических моделей существует подход, заключающийся в имитации процесса зарождения и роста на основе модели И.Л. Миркина. Суть модели заключается в том, что исследуемое пространство разбивается на элементарные фрагменты и через фиксированные моменты времени в случайных фрагментах возникает определенное количество зародышей новой фазы. И опять же в фиксированные промежутки времени происходит их рост с определенной скоростью, одинаковой во всех направлениях.

Такой подход учитывает стохастическую природу процесса, позволяет учитывать инкубационный период, позволяет получить размер зерна и позволяет определить кинетические параметры на основе экспериментальных данных. Но появление нового зародыша происходит в фиксированные промежутки времени, процесс детерминирован а, как известно зарождение процесс стохастический. Также увеличение объема зерна идет за счет минимальной единицы объема из-за чего изменение объема происходит ступенчато. Так как модель является растровой и необходимо хранить для каждого зародыша относящиеся к нему пиксели, требуется большое количество аппаратных ресурсов для построения модели большой точности, тем более невозможным представляется реализация трехмерной модели.

Рассмотренные возможности различных подходов показывают, что имитационное моделирование лишено недостатков экспериментального изучения и недостатков аналитического моделирования, благодаря чему представляется возможным построение трехмерной непрерывной во времени и в пространстве модели распада аустенита для различной кинетики охлаждения.

**Вторая глава** посвящена разработке векторной имитационной модели структурных превращений.

Предлагается векторная модель структуры стали, в которой образующиеся в результате распада аустенита структурные составляющие описывается в виде объектов, для которых хранится уравнение описывающее поверхность. Так, например, в случае если структурная составляющая изоморфна, формой объекта является шар, который характеризуется координатами центра  $(x_i, y_i, z_i)$  и радиусом  $r_i$ .

Для определения доли объема занятого вновь образующимися объектами применяется метод Монте-Карло. В соответствии с этим методом в область

исследуемого пространства равномерно выбрасываются случайные точки с координатами  $(x, y, z)$ . Если образуются объекты одного вида, то для каждой точки проверяется выполнение неравенства по всем объектам:

$$(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 \leq r_i^2. \quad (1)$$

Отношение количества точек принадлежащих вновь образованным объектам к общему числу точек определяет процентное содержание превращенного аустенита. В модели не строится граница раздела между двумя вновь образованными объектами.

В том случае если образуются объекты различного вида (например, в случае образования феррито-перлитной структуры из аустенита) подсчитываются точки, выбрасываемые в методе Монте-Карло, принадлежащих каждой структурной составляющей по формуле (1). В том случае, если точка принадлежит двум объектам разного вида, идентификация структурной составляющей осуществляется по следующему алгоритму. Вычисляется параметр  $\sigma_i$ , для  $i$ -той структурной составляющей:

$$\sigma_i = \delta(x_*, y_*, z_*) \cdot \delta(x_i, y_i, z_i), \quad (2)$$

где:

$(x_*, y_*, z_*)$  – координаты выброшенной точки;

$(x_i, y_i, z_i)$   $(x_j, y_j, z_j)$  – координаты центров объектов для которых выполняется неравенство (1),

$$\delta(x, y, z) = (x_j - x_i) \cdot (x - x_0) + (y_j - y_i) \cdot (y - y_0) + (z_j - z_i) \cdot (z - z_0), \quad (3)$$

$$x_0 = x_i + \frac{r_b + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (x_j - x_i), \quad (4)$$

$$y_0 = y_i + \frac{r_b + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (y_j - y_i), \quad (5)$$

$$z_0 = z_i + \frac{r_b + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (z_j - z_i). \quad (6)$$

Если  $\sigma_i > 0$ , то точка принадлежит к структурной составляющей соответствующей  $i$ -му объекту.

Имитация процесса распада аустенита в стали производится следующим образом. При понижении температуры образца ниже  $A_{C1}$  (для эвтектоидных сталей) или  $A_{C3}$  (для доэвтектоидных сталей) в случайной области занятой аустенитом зарождаются объекты новой структурной составляющей с координатами  $(x_i, y_i, z_i)$  и размером  $r_b$ . Изменение размера объекта со временем определяется по формуле

$$r_i = r_b + l \tau_i, \quad (7)$$

где:  $r_b$  – начальный размер;  $\tau_i$  – время, прошедшее с момента возникновения  $i$ -го объекта;  $l$  – линейная скорость роста.

Зарождение нового объекта возможно тогда, когда в систему поступает

событие на зарождение. Предполагается, что поток событий зарождений новых структурных составляющих обладает следующими свойствами:

1. стационарность – вероятность зарождения в течение заданного промежутка времени определяется только длиной этого промежутка и не зависит от расположения данного промежутка на временном отрезке процесса превращения;
2. отсутствие последействия – вероятность зарождения в течение заданного промежутка времени не зависит от того, сколько заявок поступило на любом другом промежутке, не пересекающемся с данным промежутком;
3. ординарность – вероятность двух и более зарождений в течение малого промежутка времени пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью одного зарождения.

Из чего следует, что рассматриваемый поток является простейшим, что позволяет применять модель массового обслуживания при описании процесса зарождения структурных составляющих. Существует конечное количество каналов - возможных центров зарождения. Это могут быть области с флуктуациями химического состава, дефекты кристаллической решетки, и т. п. В систему поступает поток заявок на возникновение зародышей. Центр зарождения становится зародышем новой структурной составляющей в момент, когда на свободный канал приходит заявка. При этом число занятых каналов увеличивается на единицу. Канал, обслуживающий поступившую заявку, остается занятым до самого конца фазового превращения, то есть на все время рассматриваемого процесса. Также возможный центр зарождения считается занятым до конца эксперимента, если он принадлежит новой фазе. Заявки приходят с равной вероятностью на любой канал, вне зависимости от его занятости. Таким образом, модель представляет собой многоканальную систему с отказами с непрерывным временем.

Так как поток поступления заявок на зарождение является простейшим, моменты времени  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k, \dots$  поступления заявок в систему определяются следующим уравнением:

$$\tau_n = \sum_{i=1}^n t_i, \quad (8)$$

где:  $t_i = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln(1 - R_i)$ ;  $R_i$  равномерно распределены на интервале (0, 1).

Для моделирования нестационарного зарождения предполагается, что до тех пор, пока центр зарождения не вырос до критического размера  $r_c$  он может быть уничтожен, что соответствует физическому представлению о процессе зарождения новой структурной составляющей, так как до тех пор пока разница энергии Гиббса между новой и старой структурной составляющей будет меньше разницы зернограничной энергии вновь образованных фаз, зародыш новой структурной составляющей имеет нестабильное состояние.

Моделируется процесс нестационарного зарождения следующим образом. Заявки на уничтожение центров приходят с равной вероятностью на любой канал, вне зависимости от его занятости. Заявка на уничтожение, которая приходит на занятый канал объекта достигшего критического размера уничтожается. Заявка на уничтожение, которая приходит на занятый канал объекта, который не достиг критического размера, принимается на обслуживание и канал освобождается – объект уничтожается.

Показано что поток поступления заявок на уничтожение также является простейшим, соответственно время наступления следующего события – заявки на уничтожение определяется с помощью уравнения (8).

Описанный подход дает возможность применять методы и алгоритмы теории массового обслуживания и проводить имитационный эксперименты на основе событийного представления кинетики фазового превращения.

Ход вычислительного эксперимента для заданной температуры превращения описывается следующим алгоритмом:

ШАГ 1: Задается число итераций эксперимента ( $K$ ); начальный номер итерации  $J=0$ ;

ШАГ 2: Очистка пространства превращения;

ШАГ 3: Генерация событий на зарождение и помещение их в очередь;

ШАГ 4: Генерация событий на уничтожение и помещение их в очередь;

ШАГ 5: Определение  $t_k$  – ближайшего события;

ШАГ 6: Пересчет состояния системы в момент времени  $t_k$  и определение объема новых объектов методом Монте–Карло ( $V_k$ );

ШАГ 7: Переход на ШАГ 3;

ШАГ 8: Если объем новых структурных составляющих соответствует заданному объему аустенита - превращение заканчивается. Для данной итерации вычислительного эксперимента массив ( $V_k, t_k$ ) отображается в массив  $(z, t_z)_J$ , где  $z$  массив фиксированного процентного содержания превращенного аустенита (например, 0,1; 0,2 и т.д.);

ШАГ 9: Если  $J < (K-1)$ , то  $J = J+1$  и идти на ШАГ 2;

ШАГ 10: Усреднение  $t_z$  - времени образования фиксированного процентного состава  $z$  по всем итерациям вычислительного эксперимента  $J$ .

Вычислительный эксперимент для изотермических условий осуществляется в предположении, что все кинетические параметры модели зависят от температуры, но не зависят от времени превращения.

В силу того что описанная имитационная модель использует кинетические параметры, которые трудно определить из термодинамических характеристик фаз, их значения рассчитывались методом наименьших квадратов исходя из экспериментально построенных кинетических диаграмм распада аустенита для каждой температуры при которой осуществлялась изотермическая закалка.

$$\sum_{k=1}^{n_i} (Vm_i(\lambda_z(T_i), l(T_i), r_b(T_i), \lambda_d(T_i), r_c(T_i), t_k) - V_i(t_k))^2 \rightarrow \min, \quad (9)$$

где:  $Vm_i$  и  $V_i$  – доля распавшегося аустенита в момент времени  $t_k$  при температуре  $T_i$ , полученного в имитационной модели из экспериментально построенных кинетических диаграмм;

$n_i$  – число точек экспериментальной кинетической диаграммы при температуре  $T_i$ ;

$\lambda_z(T_i), \lambda_d(T_i)$  – интенсивность потоков зарождения и уничтожения;

$l(T_i)$  – линейная скорость роста;

$r_b(T_i)$  и  $r_c(T_i)$  – начальный критический радиус объектов зарождения.

Для решения задачи был выбран метод Хука-Дживса, который относится к методам прямого поиска и использует только значения функции. Значение функции  $Vm_i$  при заданных  $\lambda_z, l, r_b, \lambda_d, r_c$  в каждый момент времени  $t_k$  представляет собой случайную величину. В вычислительном эксперименте на шаге 10 хотя и проводится усреднение этих случайных величин, но это не дает возможность исключить стохастическую составляющую этого параметра. Для того чтобы при поиске решения в методе Хука-Дживса проверить гипотезу о том, что улучшение значения целевой функции обусловлено изменением кинетических параметров, а не связано со случайными факторами, использовался статистический критерий.

Модифицированный метод Хука-Дживса, нахождения кинетических параметров для каждой температуры  $T_i$ , с учетом статистического критерия описывается следующим образом. Выбирается начальная базисная точка  $a_0 = (\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$  и длина шага  $h_j$  для каждой из переменных. Производится серия компьютерных экспериментов, по результатам которой вычисляется значение  $\Delta Vm_i(a_0)$

$$\Delta Vm_i(a_0) = \sum_{k=1}^{n_i} (Vm_i(\lambda_z(T_i), l(T_i), r_b(T_i), \lambda_d(T_i), r_c(T_i), t_k) - V_i(t_k))^2 \quad (10)$$

Значение первой переменной увеличивается на длину шага. Проводится новая серия экспериментов и вычисляется значение  $\Delta Vm_i(\lambda_{z0}+h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ . Если  $\Delta Vm_i(\lambda_{z0}+h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0}) < \Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ , то выдвигается гипотеза  $H_0: M(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}+h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})) < M(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0}))$ , для проверки которой используется  $t$ -критерий:

$$t' = \frac{(\overline{\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})} - \overline{\Delta Vm_i(\lambda_{z0} + h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})})\sqrt{N}}{\sqrt{s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})) + s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0} + h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0}))}}, \quad (11)$$

где  $N$  – количество итераций вычислительного эксперимента. Наблюдаемое значение  $t'$  сравнивается со значением  $t_{1-\alpha}$  с  $\nu$  степенями свободы при уровне значимости  $\alpha=0,05$ ,

$$\nu = \frac{(s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})) + s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0} + h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})))^2 (N+1)}{(s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})))^2 + (s^2(\Delta Vm_i(\lambda_{z0} + h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})))^2} - 2. \quad (12)$$

При  $t' > t_{1-\alpha}$  гипотеза принимается, в противном случае – отвергается.

В случае принятия гипотезы  $H_0$  в качестве новой базисной точки  $a_1$  берется  $a_1 = (\lambda_{z0}+h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ ; в противном случае значение первой

переменной уменьшается на длину шага, проводится еще одна серия экспериментов и вычисляется значение  $\Delta Vm_i(\lambda_{z0}-h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ . Если  $\Delta Vm_i(\lambda_{z0}-h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0}) < \Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ , то выдвигается гипотеза  $H_0$  :  $M(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}-h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})) < M(\Delta Vm_i(\lambda_{z0}, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0}))$ , которая проверяется по  $t$ -критерию как описано выше. В случае принятия гипотезы в качестве новой базисной точки берется  $a_1 = (\lambda_{z0}-h_1, l_0, r_{b0}, \lambda_{d0}, r_{c0})$ .

Если ни один из перечисленных шагов не приводит к уменьшению значения функции, то изменению подвергается значение второй переменной и выполняется проверка соответствующих гипотез по вышеописанному алгоритму. Аналогичные шаги выполняются по всем переменным. В результате перебора по каждой из переменной алгоритм получает следующую базисную точку  $a_1$ .

Если уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг той же базисной точки  $a_0$ , но с уменьшенной длиной шага. Если  $a_0 \neq a_1$ , то из базисной точки  $a_1$  делается шаг в направлении  $a_1 - a_0$ . Процесс завершается, когда длина шага станет меньше заданного значения.

Кинетические параметры структурного превращения, полученные в методе Хука–Дживса, для каждой температуры использовались при построении интерполяционных функций  $\lambda_z(T)$ ,  $l(T)$ ,  $r_b(T)$ ,  $\lambda_d(T)$ ,  $r_c(T)$  с помощью кубических сплайнов. Полученные зависимости кинетических параметров от температуры применялись при прогнозировании кинетики превращения аустенита для заданной кинетики охлаждения.

Алгоритм имитации кинетики распада аустенита при непрерывном охлаждении аналогичен алгоритму вычислительного эксперимента в изотермических условиях, который был описан выше. При этом учитывалась зависимость кинетических параметров от температуры, а также зависимость температуры от времени  $T=f(\tau)$ .

Размер объекта новой фазы определялся по формуле:

$$r_i = r_b + \int_{\tau_i}^t l(f(\tau)) d\tau, \quad (13)$$

Время наступления событий зарождения и уничтожения объектов определяется исходя из уравнения:

$$\sum_{j=1}^k t_j + t_{k+1} \int_{\sum_{j=1}^k t_j}^{\sum_{j=1}^k t_j + t_{k+1}} \lambda(f(\tau)) d\tau = -\ln R_{k+1}, \quad (14)$$

где:  $\lambda$  функции интенсивности зарождения или уничтожения.

Учитывая, что функции  $\lambda(z)$ ,  $l(z)$ , являются полиномиальными, вычисление интеграла проводилось методом Ньютона-Котеса.

**Третья глава** посвящена рассмотрению архитектурного решения и практике создания программного комплекса реализующего разработанную имитационную модель.

Программный комплекс предназначен для предварительной обработки экспериментальных кинетических диаграмм распада аустенита с целью получения кинетических параметров модели, а также прогнозирования фазовых и структурных превращений для заданной скорости охлаждения образцов. Реализация этих функций осуществляется посредством Web-доступа пользователей к следующим сервисам комплекса:

1. Задание экспериментальных диаграмм распада аустенита в изотермических условиях, для марок сталей, которые отсутствуют в базе данных программного комплекса.
2. Расчет кинетических параметров моделей по данным эксперимента и их сохранение в базе данных.
3. Прогнозирование кинетики распада аустенита стали и структурный состав при термической обработке ее с заданной скоростью охлаждения.
4. Прогнозирование изотермических и термокинетических диаграмм марок сталей, для которых известны кинетические параметры моделей.

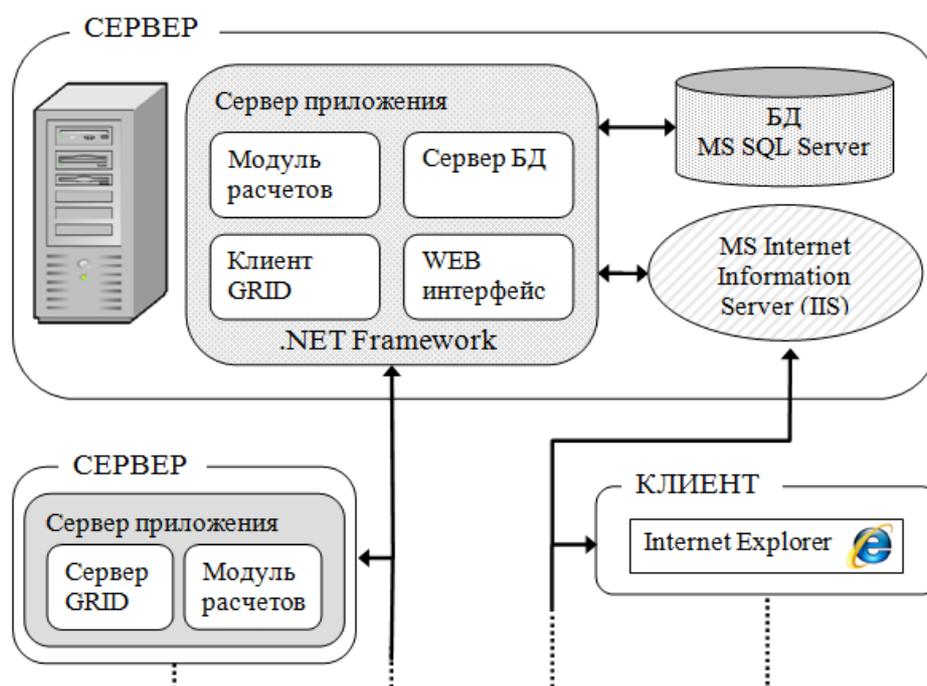
Расчет кинетических параметров производится с помощью модифицированного метода Хука-Дживса на основе экспериментальных диаграмм распада аустенита при изотермических условиях. В алгоритме реализована векторная модель распада аустенита с нестационарным зарождением. Для нахождения кинетических параметров для одной температуры необходимо около ста шагов. При каждом шаге производится усреднение полученных значений по сорока итерациям. В итерации при каждом расчете объема новых объектов методом Монте-Карло в область исследуемого пространства выбрасывается десять тысяч точек. Для каждой точки последовательно проверялась принадлежность каждому из вновь образованных объектов. Таким образом, для нахождения кинетических параметров модели необходимо большое количество вычислительных ресурсов.

Для снижения временных затрат при проведении вычислительного эксперимента нахождения кинетических параметров модели в программном комплексе были реализованы распределенные вычисления. Для реализации распределенных вычислений использовалась Grid-технология, согласно которой программный комплекс был разбит на две части. Первая находится на управляющей машине и предназначена для сбора результатов вычислений и их публикации. Вторая предназначена для проведения вычислений на удаленных компьютерах. Таким образом, архитектура программного комплекса представляет собой следующую схему (рис. 1).

Программная часть, разворачиваемая на управляющей машине, состоит из следующих модулей: Web-интерфейс, сервер базы данных, модуль расчетов и клиент Grid.

Модуль Web-интерфейса – это классы и Web-страницы для взаимодействия с пользователем, ввода им данных и отображения результатов экспериментов в табличном виде и в виде графиков. Классы Web-интерфейса и хранимые в нем http-страницы, публикуются через MS Internet Information Server, что дает возможность пользователям получать Web-доступ к возможностям программного комплекса. Модуль сервера базы данных служит для взаимодействия пользователя через Web-интерфейс с хранимой в базе данных информацией. С его помощью сохраняются все введенные экспериментальные кинетические диаграммы, рассчитанные кинетические параметры, а также рассчитанные на их основе термокинетические и изотермические диаграммы.

В модуле расчетов производится нахождение кинетических параметров на основе введенных с помощью Web-интерфейса экспериментальных диаграмм распада аустенита при изотермических условиях. Для этого вычислительная задача разбивается на итерации. Данные для проведения каждой итераций с помощью модуля клиента Grid распределяются среди удаленных машин.



**Рис.1.** Архитектура программного комплекса

На каждой удаленной машине разворачивается программный комплекс в виде двух модулей, это сервер Grid и модуль расчетов. Сервер Grid получает команды и параметры для расчета от управляющей машины, и передает их в модуль расчетов. Модуль расчетов проводит итерацию и возвращает результат серверу Grid, который в свою очередь отсылает результат на управляющую машину в модуль клиента Grid.

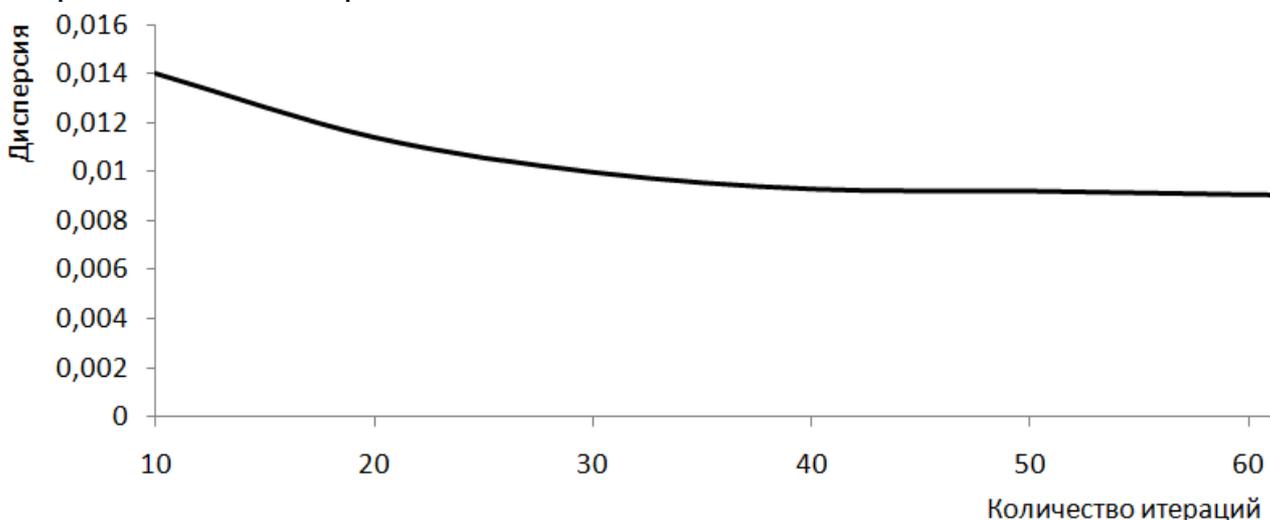
Собрав с помощью клиента Grid воедино результаты итераций, модуль расчета управляющей машины вычисляет кинетические параметры. После этого на основе полученных кинетических параметров в модуле расчетов

управляющей машины может проводиться моделирование распада аустенита как при изотермических так и при термокинетических условиях для произвольной кинетики охлаждения.

**В четвертой главе** описывается проведение вычислительного эксперимента, позволяющего оценить функциональные возможности программного комплекса и адекватность математических моделей, реализующих предложенный метод моделирования.

Расписывается методика и последовательность действий в ходе экспериментов по изучению кинетики распада аустенита с помощью магнитометра. Показаны данные, полученные в результате изучения распада аустенита в стали ПК40Н2М с помощью магнитометра в изотермических и термокинетических условиях, которые легли в основу при проведении компьютерного моделирования в программном комплексе для проверки адекватности разработанных моделей.

При нахождении кинетических параметров в компьютерном эксперименте по окончании итерации оценивается значение целевой функции. Как указано выше значение целевой функции имеет стохастическую составляющую. В связи с этим был проведен расчет дисперсии значения целевой функции в зависимости от количества итераций (рис. 2), в результате которого было показано, что для минимизации влияния стохастической составляющей целевой функции необходимо и достаточно усреднять полученные значения по сорока итерациям. Дальнейшее увеличение количества итераций нецелесообразно.

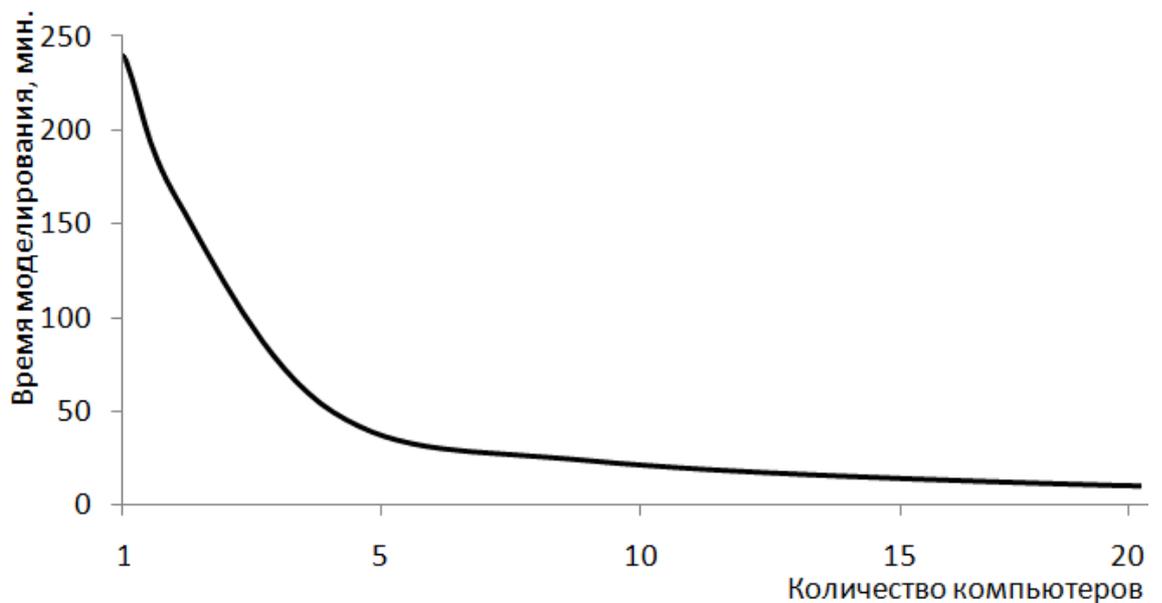


**Рис. 2.** Дисперсия целевой функции ( $\Delta V m_i$ ) в зависимости от количества итераций вычислительного эксперимента  $K$

Проводился расчет кинетических параметров с применением распределенных вычислений для различного числа компьютеров, участвующих в вычислениях (рис. 3). Показано что применение распределенных вычислений позволяет значительно снизить затрачиваемые временные ресурсы, но применение более пяти компьютеров нецелесообразно, так как значительно

возрастают накладные расходы на управление процессом и передачу данных. В связи с этим, при проведении компьютерного моделирования было использовано ограничение в десять компьютеров.

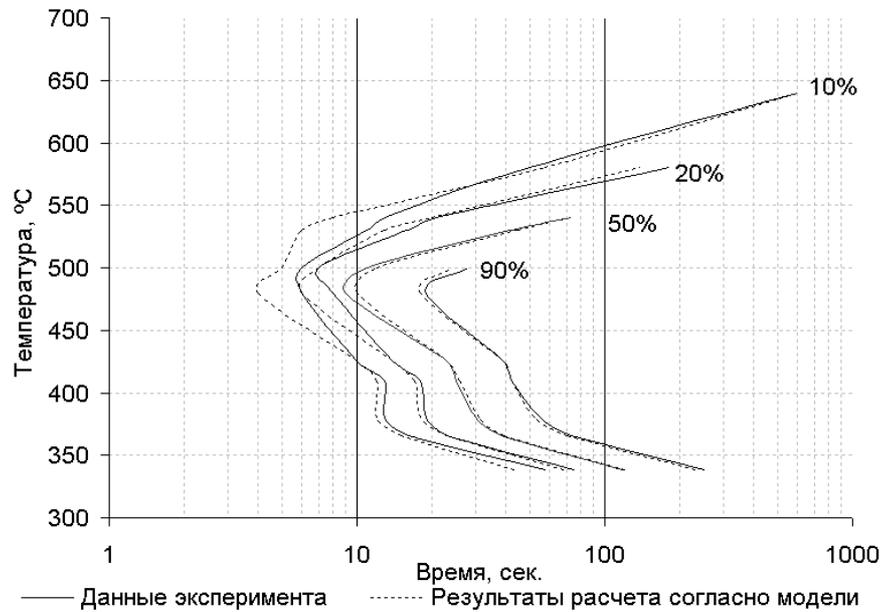
В ходе проведения эксперимента на основе экспериментальных диаграмм распада аустенита при изотермических условиях для стали ПК40Н2М был проведен расчет кинетических параметров для одиннадцати температур выдержки. На основе полученных кинетических параметров было проведено компьютерное моделирование распада аустенита при постоянной выдержке для тех температур, что были использованы при построении экспериментальной изотермической диаграммы. Данные полученной изотермической диаграммы были сопоставлены с экспериментальными (рис. 4). Приведенные графики и расчеты показали, что полученные в результате моделирования изотермические диаграммы идентичны диаграммам, полученным в ходе реальных экспериментов.



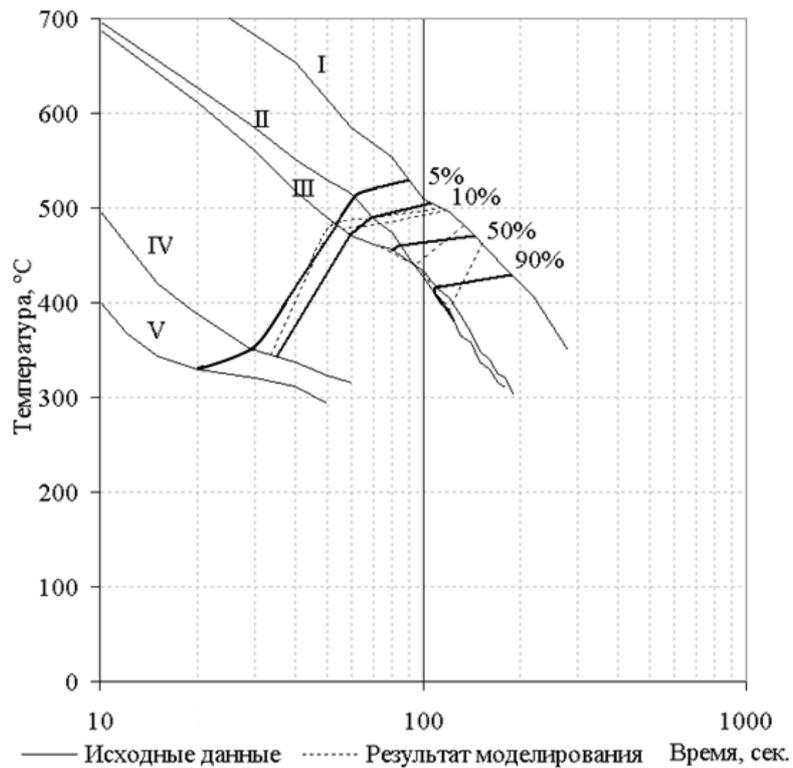
**Рис. 3.** Время вычислительного эксперимента для одной марки стали в зависимости от количества компьютеров, участвующих в вычислении

На основе полученных кинетических параметров производилось моделирование распада аустенита при термокинетических условиях на основе пяти заданных режимов охлаждения. Графики полученной термокинетической диаграммы были сопоставлены с экспериментальными данными, которые были получены при тех же режимах охлаждения (рис. 5).

Результаты моделирования при термокинетических условиях показали хорошее соответствие экспериментальным данным, что позволяет говорить о правильности разработанной математической модели и о корректной работе комплекса программ.



**Рис.4.** Изотермическая диаграмма распада аустенита для стали ПК40Н2М



**Рис.5.** Термокинетическая диаграмма распада аустенита для стали ПК40Н2М

Таким образом, было показано, что разработанная векторная имитационная модель может быть использованы для прогнозирования структуры стали для любой кинетики охлаждения.

По результатам исследований могут быть сделаны **выводы**

1. Предложено векторное представление структурных составляющих стали в трехмерном пространстве. Такое представление дает возможность

описать каждую структурную составляющую в любой момент времени и в любой точке пространства, а также существенно снизить требования к объему памяти, необходимой для хранения данных о структуре стали в процессе фазовых превращений.

2. Разработана имитационная модель структурного превращения, на основе предложенного векторного представления. Она дает возможность реализовать математический аппарат теории массового обслуживания и проводить имитационные эксперименты на основе событийного представления кинетики фазового превращения.
3. Имитационная модель массового обслуживания дает возможность моделировать стохастическую природу зарождения новой структурной составляющей. Модель позволяет имитировать инкубационный период зарождения новой фазы.
4. Модифицирован алгоритм Хука-Дживса для получения кинетических параметров имитационной модели фазовых превращений на основе экспериментально построенных изотермических и термокинетических диаграмм.
5. Предложен алгоритм вычисления кинетических параметров распада аустенита в изотермических условиях, который позволяет распараллелить вычисления, что позволило использовать технологии Raid-вычислений в разработанном программном комплексе.
6. Разработана архитектура программного комплекса на основе Web-технологий, которая обеспечивает представление результатов машинного моделирования, а также предоставляет пользователям доступ к сервисам программного комплекса. Пользователи могут проводить моделирование фазовых и структурных превращений через сеть интернет.
7. Создан программный комплекс имитационного моделирования распада аустенита при изотермических и термокинетических условиях, реализующий векторную модель распада с нестационарным зарождением.
8. Проведенные компьютерные эксперименты показали, что изотермическая и термокинетическая диаграммы, полученные на основе разработанной векторной имитационной модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Ивашко А.Г., Полищук И.Н.* Имитационное моделирование фазового превращения переохлажденного аустенита в стали // Современные математические методы и информационные технологии в образовании. Тезисы докладов. – Тюмень: Тюменский Государственный Университет, 2005. – С. 28– 29.
2. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Описание модели массового обслуживания для процесса зарождения зерен при переохлаждении аустенита // Проблемы информатики в образовании, управлении, экономике и технике: сборник статей VI Всероссийской научно– технической конференции. – Пенза, 2006. – С. 126– 129.
3. *Ивашко А.Г., Полищук И.Н.* Имитационное моделирование фазового превращения переохлажденного аустенита в стали // Математическое и информационное моделирование: Сборник научных трудов. Вып. 8. Тюмень: Издательство «Вектор Бук», 2006. – С. 92– 96.
4. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Описание модели массового обслуживания для процесса зарождения зерен при переохлаждении аустенита // Наука технологии инновации // Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых в 7– ми частях. Новосибирск: Изд– во НГТУ, 2006. Часть. 1. – С. 25– 27.
5. *Ивашко А.Г., Цыганова М. С., Полищук И. Н.* Применение теории массового обслуживания при моделировании фазовых превращений // Математические методы в технике и технологиях – ММТТ– 20. [Текст]: сб. трудов XX Междунар. науч. конф. В 10 т. Т. 6. Секция 12 / под общ. ред. В. С. Балакирева. – Ярославль: Изд– во Яросл. гос. техн. ун– та, 2007. – С. 233– 236.
6. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Имитационная модель распада аустенита // Информационные технологии и телекоммуникации в образовании, экономике и управлении регионом: Материалы межрегиональной научно– практической конференции. 1–30 ноября 2006 г. Тюмень: Издательство Тюменского государственного университета, 2007. – С. 23– 25.
7. *Полищук И. Н.* Применение теории массового обслуживания при моделировании распада аустенита // Информационно–вычислительные технологии и их приложения: сборник статей VI Международной научно– технической конференции. – Пенза: РИО ПГСХА, 2007. – С. 145– 147.

8. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Имитационная модель двухфазного превращения // Молодежь и современные информационные технологии. Сборник трудов V Всероссийской научно– практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 27 февраля – 1 марта 2007 г. – Томск: Изд– во ТПУ, 2007. – С. 111– 112.
9. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Имитационное моделирование фазовых превращений при термической обработке порошковых сталей // Вестник Тюменского государственного университета. №5 2007 г. Тюмень: Издательство Тюменского государственного университета. 2007 г. – С. 75– 80.
10. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Компьютерное моделирование превращения фаз в процессе термической обработки // Вестник Тюменского государственного университета. №6. 2008 г. Тюмень: Издательство Тюменского государственного университета. 2008 г. – С. 129– 140.
11. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Полищук И.Н.* Модель нестационарного процесса распада переохлажденного аустенита // Молодежь и современные информационные технологии. Сборник трудов VII Всероссийской научно– практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Молодежь и современные информационные технологии". Томск, 25– 27 февраля 2009 г., ч.1. Томск: Изд– во СПБ Графикс. – С. 169– 171.
12. *Ивашко А.Г., Полищук И.Н.* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2009616252 «GRID – система прогнозирования распада переохлажденного аустенита» от 11.11.2009.
13. *Ивашко А.Г., Полищук И.Н.* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2009616253 «Подсистема имитационного моделирования распада переохлажденного аустенита при изотермических условиях» от 11.11.2009.