

1) составить на основе формулы (11) систему дифференциальных уравнений для основных компонентов смеси: CO , C_n , C_m , NO_x и H_2O .

2) с помощью зависимостей (1)-(6), характеризующих пористость-извилистость СВС-структуры, оценить структурные и гидродинамические параметры пористого фильтроэлемента на основе карбида титана.

3) рассмотреть влияние каждого слагаемого правой части (11) на результаты расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борзых В.Э. Очистка отработанных газов ДВС СВС-элементами / В.Э. Борзых, В.Д. Исаенко, П.В. Исаенко / Транспортные системы Сибири: м-лы Всерос. науч.-технич. конф. Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2003.

2. Васильцов Г.Л., Крюков И.А. Численный метод решения уравнений Навье-Стокса, описывающих течения несжимаемой вязкой жидкости, на криволинейной сетке // Институт проблем механики РАН, Препринт № 594. М., 1997.

3. Мейсон Э., Малинаускас А.. Перенос в пористых средах: модель запыленного газа. М.: Мир, 1986. 200 с.

*Александр Григорьевич ИВАШКО —
зав. кафедрой информационных систем,
доктор технических наук, профессор
ivashco@mail.ru*

*Мария Сергеевна ЦЫГАНОВА —
доцент кафедры информационных систем,
кандидат технических наук
Mademid2@mail.ru*

*Иван Юрьевич КАРЯКИН —
ассистент кафедры информационных систем
Ivan_NYS@mail.ru*

*Институт математики и компьютерных наук
Тюменский государственный университет*

УДК 669.017.03;51-72

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ*

THE MODIFIED METHOD OF HUK-DZHIVS FOR FINDING OF MODEL PARAMETRES OF PHASE TRANSFORMATIONS

АННОТАЦИЯ. В работе предлагается решение задачи нахождения параметров модели фазовых превращений аустенита при термической обработке стали с использованием модифицированного метода Хука-Дживса.

SUMMARY. The article offers the solution to the problem of finding model parameters of austenite phase transformations at thermal processing of steel with the use of Huka-Dzhivsa modified method.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Система массового обслуживания (СМО), аустеним, метод Хука-Дживса.

* Работа выполнена в рамках АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2000-2010 гг.), НИР «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении», № 2.1.2/6498.

KEY WORDS. *Queuing system, austenite, method of Huka-Dzhivsa.*

В работе [1] разработана модель фазовых превращений аустенита при термической обработке стали на основе теории систем массового обслуживания. На базе этой модели реализовано программное приложение, позволяющее получать изотермические кривые при различных параметрах имитационной модели.

Целью данной работы является решение обратной задачи: нахождение параметров модели на основе экспериментально-построенных диаграмм распада аустенита. Решение поставленной задачи позволит определить набор параметров имитационной модели для различных сталей.

Для определения параметров модели используется метод наименьших квадратов:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{i,j=1}^{n,m} \left(Vm(x_1, x_2, \dots, x_k, \tau_{i,j}) - V_k(T_i, \tau_{i,j}) \right)^2 \rightarrow \min, \quad (1)$$

где n — число экспериментальных точек; m — количество температурных режимов; T_i — температура ($^{\circ}\text{C}$); $\tau_{i,j}$ — время после начала выдержки стальной детали (сек); V_k — доля распавшегося аустенита после времени $\tau_{i,j}$, полученная в результате натурного эксперимента (%); x_1, x_2, \dots, x_k — параметры модели, характеризующие $\lambda_{create}(T)$ (интенсивность возникновения зародышей аустенита), $\lambda_{raspada}(T)$ (интенсивность появления событий проверки на свертывание зародышей аустенита), sk_{rosta} (линейная скорость роста зародышей); $Vm(x_1, x_2, \dots, x_k, \tau_{i,j})$ — доля распавшегося аустенита после времени $\tau_{i,j}$, полученная в результате компьютерного эксперимента.

В компьютерном эксперименте время появления зародышей и время свертывания определяются параметрами $\lambda_{create}(T)$, $\lambda_{raspada}(T)$, которые являются параметрами пуассоновского потока, заданного следующей функцией плотности:

$$f(\tau) = \lambda \cdot e^{-\lambda\tau} \quad (2)$$

где λ принимает значения $\lambda_{create}(T)$ или $\lambda_{raspada}(T)$, τ — интервал времени.

Тем самым моделируется стохастическая природа процесса фазовых превращений. Следовательно, значение функции $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ при заданных x_1, x_2, \dots, x_k представляет собой случайную величину в различных машинных экспериментах.

Значения долей распавшегося аустенита, полученные в результате эксперимента, заданы для различных температур и времени. Вследствие того, что целевая функция определена в узлах $(T_i, \tau_{i,j})$ возможно применение методов прямого поиска, из которых наиболее распространенным является метод Хука-Дживса [3].

Прямые методы поиска оптимума широко применяются для детерминированных функций. В силу того, что модель [1] основана на стохастической природе процесса зарождения новой фазы, применение метода Хука-Дживса затруднено.

Для получения корректных результатов оптимизации функции, определяемой в процессе статистического моделирования, необходима модифика-

ция метода Хука-Дживса. Для этого при проверке неравенств вида $f(x_1^1, x_2^1, \dots, x_k^1) < f(x_1^2, x_2^2, \dots, x_k^2)$ требуется использовать статистические критерии.

Производится серия компьютерных экспериментов, моделирующих фазовое превращение, для одних и тех же значений параметров x_1, x_2, \dots, x_k . В результате определяется серия значений $f^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_k)$, $i = 1, 2, \dots, N$, где N — число экспериментов в серии (не менее 100). По данным полученной выборки оценивается среднее значение и среднее квадратическое отклонение. Известно, что t-критерий, используемый при сравнении средних, нечувствителен к отклонениям исследуемой случайной величины от нормального закона, особенно в случае больших выборок [4,5]. Поэтому для использования этого критерия в процессе минимизации функции $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ требуется проверить гипотезу о нормальном распределении случайной величины $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$. Проверка гипотезы о нормальном распределении выполняется с помощью критерия Пирсона при уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Алгоритм состоит в следующем:

1. Выбирается начальная базисная точка $x^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)$ и шаги длиной h_1, h_2, \dots, h_k соответственно.

2. Исследуется локальное поведение функции $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ в точке x^0 :

а) Вычисляется значение функции $f(x^0)$ в базисной точке x^0 .

б) Значение первой переменной увеличивается на длину шага. Проводится новая серия экспериментов и вычисляется значение $\bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)$. Если $\bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0) < \bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)$, то выдвигается гипотеза $H_0: M(\bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)) < M(\bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0))$, для проверки которой используется t-критерий [5] при уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Учитывая, что средние квадратические отклонения $\sigma(\bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0))$ и $\sigma(\bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0))$ неизвестны (имеются только их оценки, найденные по выборке), а также то, что в общем случае нет оснований предполагать $\sigma(\bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)) = \sigma(\bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0))$, для проверки гипотезы используется статистика

$$t' = \frac{(\bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0) - \bar{f}(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0))\sqrt{N}}{\sqrt{s^2(f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)) + s^2(f(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0))}} \quad (3)$$

Наблюдаемое значение t' (вычисленное по данным выборки) сравнивается со значением $t_{1-\alpha}$ с ν степенями свободы, где

$$\nu = \frac{(s^2(f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)) + s^2(f(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)))^2 (N + 1)}{(s^2(f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)))^2 + (s^2(f(x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)))^2} - 2, \quad (4)$$

N — число значений в каждой серии.

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

В случае принятия гипотезы H_0 в качестве новой базисной точки x^1 берется $x^1 = (x_1^0 + h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)$; в противном случае значение первой переменной уменьшается на длину шага, проводится еще одна серия экспериментов и вычисляется значение $\bar{f}(x_1^0 - h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)$. Если $\bar{f}(x_1^0 - h_1, x_2^0, \dots, x_k^0) < \bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)$, то выдвигается гипотеза $H_0: M(\bar{f}(x_1^0 - h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)) < M(\bar{f}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0))$, которая проверяется по t -критерию как описано выше. В случае принятия гипотезы в качестве новой базисной точки x^1 берется $x^1 = (x_1^0 - h_1, x_2^0, \dots, x_k^0)$.

Если ни один из перечисленных шагов не приводит к уменьшению среднего значения функции, то первая переменная остается неизменной, и изменению подвергается значение второй и следующих переменных последовательно. В результате определяется базисная точка x^1 .

с) Если $x^0 = x^1$, то есть уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг той же базисной точки x^0 , но с уменьшенной длиной шага, равной $0,1 \cdot h_i$.

d) Если $x^0 \neq x^1$, то производится «поиск по образцу».

3. «Поиск по образцу» производится следующим образом.

3.1. Из базисной точки x^1 делается шаг в направлении $x^1 - x^0$, поскольку поиск в этом направлении уже привел к уменьшению значения функции. Вычисляется значение функции в точке $(x^0 + 2 \cdot (x^1 - x^0))$.

3.2. Исследование продолжается вокруг точки $(x^0 + 2 \cdot (x^1 - x^0))$. Если наименьшее значение функции на шаге 2.2. меньше значения функции в базисной точке x^1 , то получаем новую базисную точку x^2 , после чего повторяется шаг 2.1. В противном случае следует не производить поиск по образцу из точки x^1 , а продолжить исследование из этой точки.

4. Процесс завершается, когда длины шагов будут уменьшены до заданной величины ε .

По разработанному алгоритму создан модуль, реализующий поиск минимума функции модифицированным методом Хука-Дживса. Тестирование модуля проведено на специальных тестовых функциях Розенброка и Растригина, которые умножаются на случайную величину, распределенную по нормальному закону. Такое преобразование позволяет получить стохастические функции для тестирования метода.

Функция Розенброка задается следующей формулой

$$f(x) = \left(\sum_{i=1}^{n-1} \left(100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right) \right), \quad (5)$$

имеет медленно убывающее плато, глобальный минимум достигается в точке $x_i = 1$ и $f(x) = 0$ при $i = 1..n$.

Функция Растригина имеет следующий вид:

$$f(x) = \left(10 \cdot n + \sum_{i=1}^n (100(x_i^2 - 10 \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot x_i))) \right), \quad (6)$$

является мультимодальной и считается сложной для оптимизации из-за сложности рельефа. Глобальный минимум достигается в точке $x_i = 0$ и $f(x) = 0$ при $i = 1..n$.

Результат тестирования показал, что предложенная модификация метода Хука-Дживса адекватна и выдает точные результаты оптимизации для рассмотренных функций.

В качестве исходной точки для трехмерных тестируемых функций была выбрана точка с координатами (100, 100, 100). В табл. 1 показано количество переходов для поиска оптимума в зависимости от числа итераций на анализируемой точке.

Таблица 1

Результаты тестирования метода на функциях Розенброка и Растригина

Количество параметров оптимизируемой функции	Количество итераций на анализируемой точке	Количество переходов для поиска оптимума
Функция Розенброка		
3	10	≈ 193767
	50	≈ 172012
	100	≈ 93231
	500	≈ 89029
	1000	≈ 83102
	5000	≈ 81215
Функция Растригина		
3	10	≈ 2680
	50	≈ 2420
	100	≈ 1843
	500	≈ 1601
	1000	≈ 1522
	5000	≈ 1501

Анализ результатов тестирования, приведенных в табл. 1, показывает, что количество итераций на анализируемой точке не должно быть менее 100, поскольку в этом случае количество переходов значительно превышает аналогичный параметр при значениях количества итераций, больших 100. Дальнейшее увеличение количества итераций не приводит к значительному уменьшению переходов.

Использование модифицированного метода для нахождения параметров модели фазовых превращений требует значительных временных затрат по сравнению с работой метода на тестовых функциях.

Данная проблема возникает из-за того, что требуется проведение большого числа вычислений в методе Монте-Карло для нахождения значений функции (1). Кроме этого, вклад в увеличение времени работы метода Монте-Карло вносит необходимость составления большого числа неравенств, харак-

теризующих границы раздела фаз. Число этих неравенств зависит от количества зародышей и может быть найдено по следующей формуле:

$$N_{\text{нер.}} = \frac{n_{\text{зар.}} (n_{\text{зар.}} - 1)}{2}, \quad (7)$$

где $N_{\text{нер.}}$ — количество неравенств, характеризующих границы раздела фаз; $n_{\text{зар.}}$ — число зародышей.

Для сокращения временных затрат целесообразно применить технологию параллельных вычислений при исследовании локального поведения функции $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ в алгоритме модифицированного метода Хука-Дживса.

Схема параллельных вычислений выглядит следующим образом.

Вычисляется значение функции в базисной точке и составляется список точек, в которых необходимо будет найти значение функции. Количество этих точек равно удвоенному числу параметров модели.

Координаты точек из списка отсылаются вспомогательным процессам, каждый из которых рассчитывает значение функции в полученной точке независимо от других процессов. После вычисления каждый вспомогательный процесс отправляет найденное значение главному процессу для анализа полученных данных и нахождения новой базисной точки.

При нахождении значения функции используется метод Монте-Карло, который распараллеливается стандартным образом. Главный процесс формирует список точек, которые случайным образом выбрасываются в исследуемый объем. Вспомогательные процессы, число которых равно количеству точек, анализируют попадание этих точек в ту или иную фазы и отправляют результат главному процессу.

Модифицированный алгоритм Хука-Дживса разработан для нахождения кинетических параметров модели фазовых превращений с учетом стохастической природы рассматриваемого процесса. Экспериментально оценена его вычислительная сложность и предложены способы распараллеливания данного алгоритма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Карякин И.Ю. Имитационное моделирование фазовых превращений // Математическое и информационное моделирование. Сборник научных трудов. Вып. 10. Тюмень: «Вектор Бук», 2008. С. 106-113.
2. Попов А.А., Попова Л.Е. Справочник термиста. Изотермические и термокинетические диаграммы распада переохлажденного аустенита. М.: Изд. машиностроительной литературы, 1961. 430 с.
3. Банди Б. Методы оптимизации. М.: Радио и связь, 1988.
4. Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшая школа, 1977.
5. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. М.: Мир, 1973.
6. Блантер М.Е. Теория термической обработки. М.: Металлургия 1984. 328 с.
7. Блантер М.Е. Фазовые превращения при термической обработке стали. М.: Изд. Литературы по черной и цветной металлургии, 1962.
8. Гуревич Ю.Г., Цыганова М.С. Построение изотермических и термокинетических диаграмм порошковых сталей различной пористости расчетным путем // Известия вузов. Черная металлургия. 2006. № 1.
9. Гуревич Ю. Г., Ивашко А. Г. Кинетика распада переохлажденного аустенита порошковых сталей. Курган: Изд-во Курган. гос. ун-та, 1998.

10. Попов А.А., Попова Л.Е. Справочник термиста. Изотермические и термокинетические диаграммы распада переохлажденного аустенита. М.: Изд-во машиностроительной литературы, 1961. 430 с.

*Елена Ивановна ЛОБОДЕНКО —
доцент кафедры строительной механики
Тюменского государственного архитектурно-строительного университета,
кандидат физико-математических наук
lobodenko_lena@mail.ru*

УДК 539.194

КВАТЕРНИОННАЯ СТРУКТУРА ОПЕРАТОРОВ, ОПИСЫВАЮЩИХ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

THE QUATERNION'S STRUCTURE OF THE OPERATORS WHICH DESCRIBE A VIBRATIONAL-ROTATIONAL MOLECULAR STATE

АННОТАЦИЯ. Установлено, что безразмерные операторы нормальных координат, соответствующих им импульсов и полного углового момента, входящие в эффективные колебательно-вращательные гамильтонианы аксиальных молекул принадлежат множеству кватернионов.

SUMMARY. The article states that the dimensionless normal coordinates operators, corresponding with moments and total angular momentum, included into the effective vibrational-rotational Hamiltonians of axial molecules, exhibit characteristics of quaternion.

*КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Кватернионы, колебательные и вращательные операторы.
KEY WORDS. Quaternion, vibration and rotation operators.*

В теоретической молекулярной спектроскопии в основном используют методы теории возмущений, т.к. точные решения уравнения Шредингера известны лишь для небольшого числа молекул. Исключительно высокая точность регистрации экспериментальных спектров предъявляет очень высокие требования к точности расчетов. Специфической особенностью данной области является использование при расчетах большого количества квантовых чисел, а также существование различных типов динамических переменных, «отвечающих за свои» диапазоны в энергетическом спектре. В каждом диапазоне применяют разные техники вычислений. Поэтому существует множество формулировок теории возмущений для стационарного уравнения Шредингера, кроме того, известны несколько форм представлений: матричные, операторные, адиабатические.

Чаще всего в теории колебательно-вращательных спектров молекул используется техника контактных преобразований [1]. В этом случае поправки к преобразованному гамильтониану ищутся в виде полиномов по операторам динамических переменных: нормальных координат, импульсов и компонент полного углового момента [2-5]. Если эффективные гамильтонианы не содержат некорректных приближений, то они задают математические модели, которыми пользуются и при обработке экспериментальных спектров, и при решении обратных спектроскопических задач. Нахождение таких моделей далеко не тривиальная процедура, т.к. необходимо учитывать высокие порядки теории возмущений, вырождения, резонансы, эффекты нежесткости, изотопозамещений и т.д. Матричные элементы вычисляются от не коммутирующих между собой операторов. К тому же может проявиться неоднознач-