Александр Григорьевич ИВАШКО —
профессор кафедры информационных систем,
доктор технических наук

Мария Сергеевна ЦЫГАНОВА —
доцент кафедры компьютерных технологий,
кандидат технических наук

Игорь Николаевич ПОЛИЩУК —
аспирант кафедры информационных систем

УДК 669.017.03; 51-72

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ ПОРОШКОВЫХ СТАЛЕЙ*

АННОТАЦИЯ. Прогнозирование структуры и свойств порошковых сталей после термической обработки требует построения математической модели процесса распада аустенита. В данной работе предложена имитационная модель фазовых превращений, использующая методы теории массового обслуживания.

Forecasting of structure and properties of powder steels after thermal treatment requires construction of mathematical model of process of austenite transformation. In the given work the imitating model of phase transformations using methods of the theory of mass service is offered.

Для определения научно обоснованных режимов термической обработки порошковых сталей необходимо иметь точные количественные данные о кинетике фазовых превращений. Исследования многих авторов показывают, что основные закономерности превращения переохлажденного аустенита порошковых сталей аналогичны закономерностям, наблюдаемым для кованых и литых сталей соответствующего химического состава [1]. В то же время известно, что поры являются структурной составляющей порошковых сталей, поэтому пористость оказывает существенное влияние на кинетику распада аустенита.

Влияние пористости на кинетику фазовых превращений изучалось различными исследователями путем экспериментального построения изотермических и термокинетических диаграмм порошковых сталей одного химического состава, но различной пористости. Эти исследования позволяют качественно оценить влияние пористости на кинетику процесса [1]. Однако для получения количественных данных о процессах фазовых превращений необходимо построение диаграмм распада аустенита для различных марок сталей, имеющих всевозможные значения пористости, что является сложным и крайне трудоемким процессом. Поэтому очень важной является задача математического моделирования фазовых превращений с целью построения этих диаграмм расчетным путем.

В литературе известны попытки описать кинетику фазовых превращений математически. Большинство предлагаемых моделей описывают превращение в изотермических условиях и построены на основе уравнения кристаллизации А. Н. Колмогорова или уравнения Аврами. Однако, как отмечено в ряде работ, а также подтверждено нашими исследованиями [2], использование указанных

* Работа выполнена в рамках тематического плана НИР, проводимых по заданию Федерального агентства по образованию.

уравнений для моделирования превращения при непрерывном охлаждении позволяет получить лишь качественное соответствие данным эксперимента. Это связано, в частности, с тем, что при резком переводе системы из стабильного состояния в метастабильное существует период нестационарности (инкубационный период), во время которого вероятность образования зародышей новой фазы определяется не только температурой. При непрерывном охлаждении система постоянно находится в нестационарном периоде, причем это обстоятельство не учитывается в уравнениях Колмогорова или Аврами.

Поэтому в данной работе предлагается другой подход к описанию кинетики распада аустенита, основанный на имитационном моделировании процесса.

Метод имитационного моделирования уже применялся нами для решения поставленной задачи. Так, в [2] описана двумерная имитационная модель, построенная на основе схемы процесса кристаллизации, предложенной И. Л. Миркиным [3]. Эта модель применялась для описания фазовых превращений как в изотермических условиях, так и при непрерывном охлаждении.

Как показал анализ реализованных алгоритмов, модель, представленная в [2], имеет ряд недостатков. Первый связан с особенностями используемого компьютерного представления области, в которой происходит превращение. Вся область представляется системой дискретных узлов, каждый из которых может принадлежать любой фазе. Такое представление аналогично попиксельному представлению растрового рисунка, поэтому мы условно назвали данную модель «растровой имитационной моделью». Следствием такого представления являются ресурсные ограничения, связанные с хранением «растрового» пространства. Дискретность пространства порождает второй недостаток данной модели: дискретизацию по времени, которая, в свою очередь, приводит к усложнению алгоритмов.

Попыткой избежать указанных недостатков является разработка модели, имитирующей процесс фазовых превращений, которая условно названа нами «векторной имитационной моделью». В рамках этой модели предлагается следующая схема.

В случайные моменты времени в случайных областях пространства, не занятого новой фазой, возникают объекты — центры зарождения новой фазы. Каждый объект может занимать область произвольной формы. Для простоты рассмотрения использовался шар заданного радиуса r_0. В дальнейшем могут быть использованы любые графические примитивы. После возникновения нового объекта происходит его рост, при этом радиус шара линейно увеличивается со временем. Предлагаемая модель позволяет рассмотреть два варианта развития процесса на начальном этапе превращения. Первый вариант (стационарное зарождение) предполагает, что вновь образованный зародыш новой фазы непрерывно растет до тех пор, пока не произойдет столкновение с другим зародышем или не будет достигнута граница области. При нестационарном зарождении допускается, что зародыш, не достигший заданного критического размера $r_{кр}$, может исчезнуть с определенной вероятностью.

Для математического описания этих процессов можно использовать терминологию теории массового обслуживания. Рассмотрим систему с конечным числом каналов — возможных центров зарождения новой фазы. Это могут быть области с флуктуациями химического состава, дефекты кристаллической решетки и т. п. В систему поступает поток заявок на возникновение зародышей. Если в системе в данный момент имеются свободные каналы, то очередная заявка принимается. При этом число занятых каналов увеличивается на единицу. В модели, предусматривающей стационарное зарождение, следует считать, что канал, обслуживающий поступившую заявку, остается занятым до самого конца фазового превращения. В модели нестационарного зарождения следует учитывать, что до тех пор, пока зародыш новой фазы имеет размер меньше критического, канал, обслуживающий данную заявку, может освободиться с определенной вероятностью. Канал может оказаться занятым как вследствие того, что на этот канал поступила новая заявка, так и вследствие роста ранее образованных зародышей, которые поглощают соответствующую область в пространстве.

Каждая заявка характеризуется моментом поступления t_j и координатами центра вновь образующегося объекта (x_j, y_j, z_j), т.е. может быть описана вектором вида $v_j = v(t_j, x_j, y_j, z_j)$.

В общем случае оперирование случайными потоками многомерных векторов очень сложно, в частности, с точки зрения моделирования реализаций этих потоков. Поэтому воспользуемся общепринятой при моделировании сложных систем практикой и примем ряд упрощающих предположений [4]. Для решения рассматриваемой задачи нам кажутся приемлемыми следующие упрощения.

Будем считать, что поток моментов поступления заявок в систему t_j и поток векторов (x_j, y_j, z_j) могут быть описаны отдельно как независимые случайные объекты соответствующими законами распределения. Будем рассматривать последовательность t_j как поток однородных событий. Исходя из физических закономерностей процесса фазового превращения, можно считать, что этот поток обладает следующими свойствами:

1. Стационарность — вероятность поступления заявки 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 поступления заявки в течение заданного промежутка времени не зависит от того, сколько заявок поступило на любом другом промежутке, не пересекающемся с данным промежутком.

3. Ординарность — вероятность поступления двух и более заявок в течение малого промежутка времени пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью поступления одной заявки.

Таким образом, можно утверждать, что рассматриваемый поток является простейшим (стационарным пуассоновским) потоком. Тогда, в соответствии с положениями теории вероятностей, время между поступлениями двух заявок имеет показательное распределение с параметром λ, где λ — интенсивность потока. Если интенсивность потока задана, то можно получить последовательность $t_1, t_2, \dots, t_k, \dots$, где t_1 — время поступления первой заявки, t_k, $k = 2, 3, \dots$ — время между поступлениями (k-1)-й и k-й заявки. Для генерации этой последовательности на основе последовательности равномерно распределенных случайных чисел можно использовать известную методику, рассмотренную, например, в [4]:

$$t_k = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln R_k, \quad k = 1, 2, \dots, \tag{1}$$

где R_k — случайные числа, равномерно распределенные на интервале (0, 1).

Координаты центров вновь образующихся объектов будем считать независимыми случайными величинами, равномерно распределенными на интервале, определяемом размерами рассматриваемой области.

В момент времени t_j генерируется вектор (x_j, y_j, z_j), и, если в системе имеется свободный канал, то образуется новый объект с центром (x_j, y_j, z_j). В противном случае заявка отклоняется.

Состояние системы, наряду с потоком заявок, определяется также еще одним потоком событий — потоком столкновений двух (или более) растущих объектов. Если в некоторый момент времени i-й и j-й объект занимают в пространстве непересекающиеся области и имеют радиусы r_i и r_j соответственно, то время до их столкновения может быть определено следующим образом:

$$t_{ij} = \frac{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} - r_i - r_j}{2l}, \qquad (2)$$

где $r_i = r_0 + l \cdot \tau_i$, $r_j = r_0 + l \cdot \tau_j$,
τ_i и τ_j — время, прошедшее с момента возникновения i-го и j-го объектов соответственно, l — линейная скорость их роста.

Таким образом, в системе выстраивается цепочка событий, каждое из которых состоит либо в возникновении нового объекта, либо в столкновении объектов. Если в момент времени t в системе уже было образовано k объектов, то время до наступления следующего события определяется как

$$t_e = \min\left\{t_{k+1}, \min_{i<j\le k} t_{ij}\right\}. \qquad (3)$$

При рассмотрении нестационарного зарождения следует также учитывать моменты возможного исчезновения объектов. Физическая природа рассматриваемого процесса позволяет считать, что поток заявок на исчезновение объектов также является простейшим, и, следовательно, время между двумя последовательными уничтожениями имеет показательное распределение с некоторым параметром μ. При поступлении заявки на уничтожение объекта она принимается только в том случае, если в системе имеются объекты, не достигшие критического размера. В противном случае заявка отклоняется.

В момент наступления очередного события рассчитывается объем области, занятой новой фазой. Для расчета используется метод Монте-Карло. В соответствии с этим методом в область исследуемого пространства выбрасываются случайные точки с координатами (x, y, z), где случайные величины X, Y и Z имеют равномерное распределение на интервале, определяемом размерами области. Для каждой такой точки и для каждого шара с центром (x_i, y_i, z_i) и радиусом r_i проверяется выполнение неравенства

$$(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 \le r_i^2, \qquad (4)$$

т. е. принадлежность точки данному шару.

Если обозначить через N — общее число выброшенных точек, а через N_p — число точек, попавших в какой-либо объект, то доля области, занятой новой фазой, составит

$$V = \frac{N_p}{N} \cdot 100\%. \quad (5)$$

В приведенных выше рассуждениях предполагалось, что все вновь возникающие объекты принадлежат одной и той же новой фазе (двухфазная модель). Рассмотренную схему можно обобщить, предположив, что в области, занятой старой фазой, могут возникать новые объекты двух типов, и получить, таким образом, трехфазную модель. Для этого следует повторить все построения, представленные выше, сохраняя для каждого вновь образованного объекта информацию о том, к какой именно из двух новых фаз принадлежит этот объект.

Если поставленная задача требует не просто вычисления объема старой фазы, подвергшейся превращению, а определения объемов, занятых каждой из двух новых фаз, то формулу (5) следует скорректировать. Может оказаться, что в числе N_p точек, случайно выброшенных в рассматриваемую область и попавших в какой-либо из объектов, окажется ряд точек, координаты которых будут удовлетворять сразу нескольким неравенствам вида (4). Это точки, принадлежащие области пространства, полученной пересечением соответствующих шаров. Для таких точек возникает вопрос: к какому из объектов их отнести. Если данные объекты одного и того же типа, как это было в случае двухфазной модели, то ответ на поставленный вопрос не имеет принципиального значения. В противном случае тот или иной ответ повлияет на результат вычислений.

Рассмотрим, как получить ответ на поставленный вопрос для точки, попавшей в область пересечения двух шаров (для большего числа шаров рассуждения выстраиваются аналогично). Естественно увязать решение этого вопроса с расположением «проблемной» точки относительно плоскости, проходящей через точку столкновения сфер (x_0, y_0, z_0) перпендикулярно отрезку, соединяющему центры этих сфер (эту плоскость удобно считать плоскостью раздела двух фаз). Простейшие выкладки с применением методов векторной алгебры показывают, что координаты точки столкновения можно определить по формулам

$$x_0 = x_i + \frac{r_0 + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (x_j - x_i),$$

$$y_0 = y_i + \frac{r_0 + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (y_j - y_i), \quad (6)$$

$$z_0 = z_i + \frac{r_0 + l \cdot \tau_i}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \cdot (z_j - z_i).$$

Тогда уравнение плоскости раздела фаз имеет вид

$$(x_j - x_i)\cdot(x - x_0) + (y_j - y_i)\cdot(y - y_0) + (z_j - z_i)\cdot(z - z_0) = 0. \quad (7)$$

Обозначим

(x_*, y_*, z_*) — координаты исследуемой точки,

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

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

Тогда, если $\sigma_i > 0$, то точка (x_*, y_*, z_*) лежит с той же стороны от плоскости раздела фаз, что и центр i-го шара (x_i, y_i, z_i), и, следовательно, принадлежит соответствующей фазе. В случае $\sigma_i < 0$ эта точка принадлежит другой фазе. При $\sigma_i = 0$ данную точку можно отнести произвольно к любой из двух фаз.

Векторная имитационная модель дает возможность существенно снизить требования к вычислительным ресурсам системы за счет:

1. Векторного представления геометрических объектов, которое позволяет хранить в памяти только уравнения поверхностей, ограничивающих эти объекты.
2. Использования модели массового обслуживания, которая дает возможность перейти от дискретизации по времени к дискретизации по событиям, что уменьшает количество пересчетов состояния системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ермаков С. С., Вязников Н. Ф. Порошковые стали и изделия. Л.: Машиностроение, Ленинградское отделение, 1990. С. 319.
2. Гуревич Ю. Г., Ивашко А. Г., Цыганова М. С. Математическое моделирование распада аустенита с целью построения термокинетической диаграммы расчетным путем // Известия вузов. Черная металлургия. 2004. № 9. С. 45-48.
3. Гуляев А. П. Металловедение. М.: Металлургия, 1977. С. 647.
4. Бусленко Н. П. Моделирование сложных систем. М.: Наука, 1978. С. 400.

Александр Григорьевич ИВАШКО —
профессор кафедры информационных систем,
доктор технических наук

Юлия Владимировна БИДУЛЯ —
старший преподаватель
кафедры компьютерных технологий

УДК 004.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЫСЛОВОГО ОПИСАНИЯ КОНТЕНТА

АННОТАЦИЯ. В статье излагаются принципы построения модели понятийного описания контента в целях программной реализации смыслового анализа материала. Предложен алгоритм преобразования текста в семантическую сеть объектов и критерии сравнения полученных объектов для нескольких видов учебного материала.

This article states a construction principles of content term describing model with the purpose of text meaning program realization. A script of text transforming to an object semantic net as well as objects comparing criterions for some kinds of educational materials are offered.

Процесс подготовки учебного контента состоит из довольно большого числа итераций, в которых автор вынужден многократно обращаться к одному и тому же материалу. Учебный контент представляет многоликое отражение материалов, описывающих предметную область, таких, как конспекты лекций, словарь терминов, часто задаваемые вопросы, тесты и т.д. Согласованность в отображении информации требует обработки больших объемов информации,