

# **ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ**

**Валеева Я.Е. , Кочержинская Ю.В.**

***ФГБОУ ВПО "Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова", г. Магнитогорск, Россия***

Для получения материалов с наилучшими характеристиками при наименьших издержках производства требуется хорошая изученность структурных и динамических параметров этих материалов. Однако практическое изучение некоторых материалов, например, высокотемпературных металлургических расплавов, может быть затруднено в связи со сложностью воспроизведения условий протекания процессов. Текущий уровень развития информационных технологий позволяет проводить компьютерное моделирование процессов, протекающих в расплаве, с достаточной точностью за конечное время. Самыми распространенными способами компьютерного моделирования металлургических расплавов являются методики имитационного моделирования – метод молекулярной динамики (ММД) и метод Монте-Карло (ММК). ММД основан на применении классической динамики Ньютона и включает 3 основных этапа: инициализацию, достижение равновесия, расчет характеристик. Сначала система частиц инициализируется случайно распределенными в определенном промежутке скоростями и координатами, затем на основании второго закона Ньютона осуществляется пересчет ускорений, скоростей и координат до тех пор, пока система не достигнет равновесия, определяемого средними значениями энергии. После этого можно переходить к расчету характеристик расплава исходя из структурного расположения частиц. ММК схож с ММД с той разницей, что равновесие там достигается на основе применения вероятностных законов. В этом методе сначала система также инициализируется случайным образом, затем рассчитывается вероятность перехода в новое состояние, и, если эта вероятность окажется больше случайно сгенерированного числа, то осуществляется переход.

Точность вычислений методов ограничивается, в основном, вычислительной мощностью ЭВМ. После достижения равновесного состояния производится расчет парных парциальных корреляционных функций (ППКФ). Полученные в результате моделирования структурные характеристики могут использоваться для дальнейшего анализа, с помощью которого можно оценивать различные характеристики расплавов, а значит определять влияние, оказываемое тем или иным видом примесей на конечный расплав.