

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. Ломоносова**

**Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики**

На правах рукописи

**Крылов Андрей Серджевич**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И  
КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ  
ЖИДКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

**диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук**

Москва 2009

Диссертационная работа выполнена на кафедре математической физики факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
чл.-корр. РАН, Тыртышников Евгений  
Евгеньевич  
доктор физико-математических наук,  
Кочкиков Игорь Викторович  
доктор физико-математических наук,  
Кулешов Андрей Александрович

Ведущая организация: Институт металлургии и материаловедения  
им. А.А. Байкова РАН

Защита состоится 9 декабря 2009 г. в 15<sup>30</sup> на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет вычислительной математики и кибернетики, ауд.685.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке факультета ВМК Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан 3 ноября 2009 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук,  
профессор

Захаров Евгений Владимирович

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Жидкие и аморфные металлы и их сплавы давно привлекали внимание исследователей. Однако в последние годы интерес к структуре и физико-химическим свойствам некристаллических систем значительно вырос. Это явилось следствием их широкого применения в новых отраслях науки и техники. Жидкие металлы широко используются в качестве теплоносителей в атомных реакторах и рабочих тел в МГД-преобразователях. Исключительные перспективы практического применения имеют жидкие полупроводники. Их возможности определяются большим температурным диапазоном устойчивости и отличным сочетанием термоэлектрических характеристик, что делает их практически незаменимыми при решении проблемы прямого преобразования тепловой энергии в электрическую с использованием таких источников как атомная и солнечная энергия. Закалкой расплавов получают металлические стекла (аморфные системы) – новый класс перспективных материалов, строение которых близко к строению исходных расплавов, а служебные характеристики (прочность, коррозионная стойкость, магнитные и другие свойства) часто превосходят соответствующие характеристики этих материалов в кристаллическом состоянии.

Разработка новых технологий и материалов требует информации о качественных и количественных характеристиках расплавов в широких температурных и концентрационных интервалах. При этом, весь необходимый объем информации о структуре, термодинамике, поверхностном натяжении, зависимости изменения концентраций различных компонент и других параметрах систем не может быть получен экспериментально. В связи с этим, необходимо развитие методов математического моделирования и компьютерного анализа жидких металлических систем, позволяющих обрабатывать, интерпретировать и объединять разнородные экспериментальные данные, а также осуществлять компьютерное прогнозирование свойств систем для областей параметров, в которых эксперименты являются крайне

ресурсоемкими или неосуществимыми. Важно также отметить, что задачи возникающие при математическом моделировании и компьютерном анализе жидких металлических систем являются некорректными. Для их решения необходимо разрабатывать регуляризирующие методы.

Таким образом, развитие методов математического моделирования и компьютерного анализа для исследования структуры внутренних и поверхностных областей жидких металлических систем, при изучении термодинамики, поверхностного натяжения расплавов и процессов неизотермического восстановления в жидких металлических системах представляет собой важную и актуальную задачу.

**Цель работы.** Целью работы является создание математических моделей и численных методов для исследования и компьютерного анализа структуры и физико-химических свойств жидких металлических систем, их программная реализация и применение разработанного программного обеспечения для исследования металлических расплавов.

**Методы исследования.** В качестве основного аппарата решения поставленных в диссертационной работе задач были использованы аналитические и численные методы теории некорректных задач, теории ортогональных многочленов, обыкновенных дифференциальных уравнений и вычислительные эксперименты с помощью программных средств.

**Научная новизна, основные результаты.** В диссертации впервые получены следующие основные результаты:

1. Предложен и обоснован проекционный метод нахождения функций радиального распределения некристаллических систем по дифракционным данным. На его основе разработан метод компьютерного анализа расплавов и нахождения структурных переходов в жидкой фазе.

2. Создан проекционный метод определения функции цилиндрического распределения атомов поверхностных слоев жидких металлических систем.
3. Созданы бинарные и многокомпонентные математические модели квазиидеальных ассоциированных растворов для описания термодинамики жидких металлических систем с сильным межчастичным взаимодействием.
4. Разработан метод определения поверхностного натяжения расплавов методом лежащей капли, основанный на алгоритмах выделения контуров с помощью метода регуляризации Тихонова и на численном решении уравнения Юнга-Лапласа.
5. Созданы методы обработки результатов фракционного газового анализа жидких металлических систем, базирующиеся на предложенных математических моделях, учитывающих процесс выделения окиси углерода при восстановлении оксидного включения в образце.
6. Разработано программное обеспечение для проведения комплексных исследований структуры и физико-химических свойств металлических расплавов. Программный комплекс применен для анализа широкого круга металлических расплавов и использован для разработки металлургических технологий.

**Достоверность результатов диссертации.** Достоверность теоретических результатов обеспечивается использованием апробированного математического аппарата, проведением аналитического и компьютерного тестирования. Практические результаты, полученные в работе, подтверждены проведенным анализом результатов расчетов для модельных систем и для систем с известными физико-химическими и структурными свойствами. Для проверки достоверности практических результатов также использовано сравнение результатов математического моделирования и компьютерного ана-

лиза экспериментальных данных с данными, получаемыми в других видах экспериментов.

**Практическое значение полученных результатов.** Работа носит фундаментально–прикладной характер. Ее результаты могут быть использованы как в дальнейших исследованиях по математическому моделированию жидких и аморфных металлических систем, так и для решения практических задач разработки и совершенствования металлургических процессов.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на:

Международной конференции «Fourier Analysis and Applications» (Kuwait, 1998 г.); Международных конференциях «Liquid and Amorphous Metals» (Wien, Austria, 1992 г., Metz, France 2004 г., Екатеринбург, 2007 г.); Международной конференции «Тихонов и современная математика» (Москва, 2006 г.); Российских конференциях «Обратные и некорректно поставленные задачи» (Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова, 1995 г., 1996 г., 1998–2001 гг.); Международной конференции «Special Functions 2000» (USA, Arizona State University, 2000 г.); Российских и Всесоюзных конференциях «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов» (Свердловск, 1986 г., Челябинск, 1990 г., Екатеринбург, 1994 г., Екатеринбург, 2001 г.); Международных конференциях «Графикон» (Москва, 2000 г., 2002–2008 гг.); Международной конференции по обработке изображений «ICIP2008» (San-Diego, 2008 г.); Международной конференции по анализу и распознаванию изображений «ICIAR2006» (Porto, 2006 г.); Международном семинаре «Электрофизические свойства веществ (жидкие металлы и сплавы)» (Нальчик, 2001 г.); Всесоюзной конференции «Химия и технология редких, цветных металлов и солей» (Фрунзе, 1986 г.); IV Всесоюзной конференции по тепло- и массообменным процессам в ваннах сталеплавильных агрегатов (Жданов, 1986 г.); III Всесоюзном совещании по химии и технологии халькогенов и халькогенидов (Караганда, 1986 г.); Всесоюзных совеща-

ниях «Металлургия марганца» (Тбилиси, 1986 г., Москва, 1991 г.); Шестой Всесоюзной научной конференции по современным проблемам электрометаллургии стали (Челябинск, 1987 г.); Всесоюзной конференции «Проблемы исследования структуры аморфных металлических сплавов» (Москва, 1988 г.); XII Всесоюзной конференции по химической термодинамике и калориметрии (Горький, 1988 г.); VI Всесоюзной школе-семинаре «Применение математических методов для описания и изучения физико-химических равновесий» (Новосибирск, 1989 г.); I Советско-чехословацком симпозиуме по теории металлургических процессов (Москва, 1989 г.); Втором всесоюзном совещании «Применение ЭВМ в научных исследованиях и разработках» (Москва, 1989 г.); Втором Всесоюзном совещании «Базы физико-химических и технологических данных для оптимизации металлургических технологий» (Курган, 1990 г.); Шестом международном конгрессе «Iron and Steel» (Nagoya, Japan 1990 г.); Всесоюзной конференции «Современные проблемы информатики, вычислительной техники и автоматизации» (Москва, 1991 г.); Десятой Всесоюзной конференции «Физико-химические основы металлургических процессов» (Москва, 1991 г.); Всесоюзном совещании «Моделирование физико-химических систем и технологических процессов в металлургии» (Новокузнецк, 1991 г.); Международной конференции «Некорректно поставленные задачи в естественных науках» (Москва, 1991 г.); 6-й Международной конференции «Structure of Non-Crystalline Materials» (Praha, Czech Republic, 1994 г.); Пятой Международной конференции «Progress in Analytical Chemistry in the Steel and Metals Industry» (ЕС, Luxembourg, 1995 г.); Ежегодном Весеннем Собрании Британской Кристаллографической Ассоциации (Leeds, UK 1997 г.); Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов (Дубна, 1997 г.); Международном Конгрессе по аналитической химии (Москва, 1997 г.); 50th Chemists Conference, British Steel (UK, 1999 г.); Научно-исследовательском семинаре кафедры математической физики факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова, 2009 г.

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 50 печатных работах. Из них 21 статья опубликована в журналах, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий ВАК РФ.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Список литературы включает 208 наименований.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, ставятся цели диссертационного исследования, а также кратко излагается содержание диссертации по главам.

Целью первых двух глав диссертационной работы является построение и исследование проекционных методов для определения структурных характеристик внутренних (глава 1) и поверхностных (глава 2) слоев жидких металлических систем по экспериментально полученному структурному фактору, программная реализация проекционных методов и применение разработанного программного обеспечения для расчета функций радиального и цилиндрического распределения атомов ряда некристаллических систем.

Первый параграф **главы 1** диссертации посвящен постановке задачи нахождения функции радиального распределения по данным дифракционных экспериментов и обзору методов ее решения. Функция радиального распределения описывает плотность числа частиц, локальную по отношению к некоторому, выбранному в качестве начала координат, атому. Она не измеряется экспериментально, однако может быть найдена из структурного фактора, получаемого в результате дифракционного эксперимента. Связь между функцией радиального распределения и структурным фактором задается уравнением Цернике-Принса. С формальной точки зрения, решение

этого уравнения сводится к задаче обращения синус-преобразования Фурье на полупрямой.

Однако на практике экспериментальный структурный фактор может быть получен только на конечном отрезке и притом с погрешностью. Это приводит к некорректности задачи нахождения функции радиального распределения. Продолжение экспериментального структурного фактора, измеренного на конечном отрезке, на всю полупрямую не позволяет правильно интерпретировать структуру исследуемых систем.

В данном параграфе разрабатывается проекционный регуляризирующий метод задачи нахождения функции радиального распределения. Решение задачи ищется в виде линейной комбинации нечетных функций Эрмита (собственных функций синус-преобразования Фурье), локализованных на отрезке, на котором задана экспериментальная информация. Доказаны свойства функций Эрмита, применяемые далее для обоснования предложенных проекционных методов.

Во втором параграфе главы 1 проводится теоретический анализ применяемых в работе проекционных алгоритмов решения задач, возникающих при анализе структуры жидких металлических систем. Эти алгоритмы базируются на использовании собственных функций синус-преобразования Фурье и преобразования Ганкеля. Доказана сходимость приближенных решений соответствующих интегральных уравнений при стремлении длины отрезка задания структурного фактора к бесконечности и нормы ошибки данных - к нулю.

В третьем параграфе на основе общих результатов второго параграфа разработан метод нахождения функции радиального распределения атомов. Приведены результаты вычислительных экспериментов, показывающие эффективность предложенного метода.

В четвертом параграфе главы 1 предложен и обоснован проекционный метод решения интегрального уравнения Фредгольма I-го рода, возникающего при решении уравнения дифракции некристаллических систем. Соответствующий оператор  $A$  рассматривается действующим из  $L_2[0, a]$  в

$L_2[0, a]$ ,  $a < \infty$ . Применение в этой задаче проекционного метода, основанного на разложении решения по собственным функциям оператора  $A^*A$ , приводит к вычислительным проблемам, связанным с наличием большого числа близких по величине собственных значений. В связи с этим, возникает вычислительная проблема выбора собственных функций. Теоретически обосновано, что эта проблема может быть решена на основе использования в разложении решения функций Эрмита. В ряде вычислительных экспериментов показано, что применение функций Эрмита позволяет значительно сократить количество функций, используемых для достижения заданной точности и получить более гладкое решение.

Пятый параграф главы 1 содержит описания алгоритмов, использованных при реализации проекционных методов, и созданного программного комплекса для исследования структуры некристаллических систем. В нем приведены результаты расчета функции радиального распределения ряда некристаллических систем.

В шестом параграфе главы 1 для задачи расчета характеристик внутренних областей расплава предлагается и исследуется метод анализа структурных зависимостей, использующий дополнительную информацию об области локализации функции радиального распределения атомов системы. Приведены примеры эффективного применения метода для анализа температурной зависимости структуры металлов. С помощью данного метода подтверждено наличие фазового перехода второго рода в жидком цезии при температуре 590 К. Показана перспективность использования метода при обработке данных экспериментов, основанных на обработке протяженной тонкой структуры (Extended X-ray Absorption Fine Structure, сокращенно EXAFS), наблюдаемой в рентгеновских спектрах поглощения. Показана возможность получения оценки снизу нормы структурного фактора. Описан программный пакет, реализующий предложенный метод.

**Вторая глава** посвящена математическому моделированию и компьютерному анализу поверхностных слоев металлических систем, принципиально важных для исследования структуры расплавов. Практический ин-

интерес к изучению поверхностных слоев продиктован тем, что многие металлы получают в расплавленном состоянии. Состав и строение исходных фаз оказывают влияние на свойства и служебные характеристики затвердевшего материала. При этом, наиболее важными для целого ряда технологий являются характеристики поверхности металла.

В первом параграфе главы 2 приводится постановка задачи компьютерного анализа поверхностных слоев металлических систем. Описан электронографический метод структурного анализа, позволяющий выделить составляющую дифракционной картины, относящуюся к поверхностным слоям вещества. Приведено обоснование математической модели, используемой при описании структуры расплавов. Показано, что вблизи поверхности можно ввести функцию цилиндрического распределения атомов и получить аналог уравнения Цернике-Принса в цилиндрической системе координат.

При интерпретации результатов дифракционных экспериментов для исследования поверхностных слоев металлических систем возникает задача расчета функции цилиндрического распределения атомов, которая осложняется тем, что исходные данные известны не на всем отрезке. Существующие методы не учитывают в полной мере специфику задачи, что также приводит к необходимости создания специализированного метода. В качестве такого специального метода предложен проекционный метод, основанный на разложении решения в ряд по функциям Лагерра - собственным функциям преобразования Ганкеля нулевого порядка. Обоснование предложенного проекционного метода численного решения задачи расчета функции цилиндрического распределения атомов на основе общих результатов параграфа 2 главы 1 приведено в параграфе 2 главы 2.

В третьем параграфе главы 2 описана общая схема проекционного алгоритма расчета функции цилиндрического распределения атомов и показана применимость проекционного метода анализа структурных зависимостей, использующего оценку длины интервала локализации функции цилиндрического распределения атомов системы.

Использование проекционного метода в практических задачах исследо-

вания жидких металлических систем и при разработке металлургических процессов требует многократных расчетов функций распределения. Это, в свою очередь, требует разработки быстрого варианта проекционного метода. В параграфе 4 главы 2 предложен и обоснован метод быстрого вычисления интегралов, определяющих коэффициенты разложения проекционного метода, использующего собственные функции преобразования Ганкеля нулевого порядка, на основе квадратуры наивысшей алгебраической степени точности. Исследованы вычислительные проблемы, возникающие при использовании квадратуры Гаусса-Лагерра, и предложен эффективный метод их решения. Проведены оценка ускорения вычисления коэффициентов проекционного метода и расчет реального ускорения для ряда тестовых задач. Предложен и исследован быстрый проекционный метод на основе квадратуры Гаусса-Эрмита для алгоритма, использующего собственные функции синус-преобразования Фурье.

В пятом параграфе главы 2 приведены примеры расчета функции цилиндрического распределения поверхностных слоев медно-германиевых расплавов на основе проекционного метода. Проведено сравнение полученных характеристик структуры поверхностных областей расплавов с характеристиками внутренних областей, рассчитанных по независимо найденным функциям радиального распределения.

Шестой параграф главы 2 содержит описание численной реализации предлагаемого проекционного метода нахождения функции цилиндрического распределения атомов и созданного программного комплекса для исследования структуры некристаллических систем.

Целью третьей и четвертой глав диссертационной работы является разработка математических моделей и методов компьютерного анализа термодинамики и поверхностного натяжения металлических расплавов, а также процессов неизотермического восстановления в жидких металлических системах при фракционном газовом анализе.

В **третьей главе** рассматриваются задачи моделирования термодинамических свойств жидких металлических систем.

В первом параграфе главы 3 разработана математическая модель квази-идеальных ассоциированных растворов для описания термодинамики жидких металлических систем с сильным межчастичным взаимодействием. Показана единственность решения задачи нахождения мольной доли ассоциата в растворе. Описан численный метод решения обратной задачи по нахождению параметров модели.

Во втором параграфе главы 3 рассмотрена задача нахождения термодинамических характеристик многокомпонентных растворов по данным о бинарных системах. Разработан метод ее решения, основанный на использовании модели квазиидеальных ассоциированных растворов. Описано применение метода для анализа термодинамики жидкой полупроводниковой системы In-Sb-Sn.

В третьем параграфе главы 3 даны примеры применения разработанных бинарной и многокомпонентной моделей ассоциированных растворов для компьютерного анализа термодинамических свойств расплавов систем Al-Ni-Cr, Fe-C и систем на основе марганца. Рассмотрено применение модели квазиидеальных ассоциированных растворов для моделирования квазиравновесных процессов в расплавах. Поставлена и исследована обратная задача для модели процесса испарения бинарного расплава. Приведены примеры ее решения для нахождения относительных потерь испарения расплавов. Разработан метод компьютерного анализа процесса рафинирования расплавов железа от меди.

В четвертом параграфе главы 3 описан созданный пакет программ для расчета термодинамики расплавов.

В пятом параграфе главы 3 на основе анализа реакции взаимодействия оксида с углеродом тигля разработана модель для расчета температуры начала восстановления оксидных включений. Проведен анализ процесса восстановления для ряда оксидов, важных с практической точки зрения.

В шестом параграфе главы 3 описаны интерфейс и структура программ-

ного модуля, разработанного для расчета температур восстановления оксидных включений. Его использование позволяет эффективно анализировать результаты обработки данных фракционного газового анализа, описанного в главе 4.

**Глава 4** посвящена компьютерному анализу поверхностного натяжения металлических расплавов и процессов неизотермического восстановления в жидких металлических системах.

Первая часть главы 4 посвящена задаче определения поверхностного натяжения методом "лежащей капли". Поверхностное натяжение является одной из наиболее важных характеристик металлических расплавов, используемой при разработке современных металлургических технологий. Как правило, необходимы экспрессные методы его определения, позволяющие в режиме реального времени влиять на качество выпускаемой продукции. При этом, основным используемым методом является метод "лежащей капли". В данном методе капля помещается на горизонтальную подложку или в специальную чашку с острыми краями, образующую строгую окружность и затем изучается ее меридиональное сечение. Метод "лежащей капли" позволяет определять капиллярную постоянную и плотность расплава. В настоящее время в металлургии особое внимание уделяется использованию современных компьютеров для обработки данных таких экспериментов.

В первом параграфе главы 4 рассмотрена общая задача выделения контуров на изображении. Решение этой задачи необходимо для выделения границ капли металла на фотографии. Проведен анализ существующих алгоритмов выделения границ и методов подавления шума для повышения качества нахождения границ.

Во втором параграфе главы 4 разработаны методы сглаживания одномерных сигналов и подавления шума на фотографиях, ориентированные на выделение контуров объектов. В одномерном случае рассматриваются задачи восстановления неизвестной исходной функции  $\bar{u} \in W_2^n[-1, 1]$ , ( $n = 1, 2$ ) по ее приближению  $u_\delta \in L_2[-1, 1]$ . В качестве решения этой зада-

чи используется функция  $u_{\alpha(\delta)} \in W_2^n[-1, 1]$ , минимизирующая функционал Тихонова:

$$\|u - u_\delta\|_{L_2[-1,1]}^2 + \alpha(\delta) \left\| \frac{d^n}{dx^n} u \right\|_{L_2[-1,1]}^2.$$

Получены аналитические представления для функций, реализующих минимум функционала Тихонова при  $n = 1$  и  $n = 2$ . Эти представления позволяют в явном виде записать производные от сглаженных функций, используемые в дальнейшем для нахождения контуров объектов.

Проведен анализ применения данных регуляризирующих методов для выделения контуров объектов на изображении. Показано, что для задачи выделения контуров метод регуляризации Тихонова с  $n = 2$  дает лучшие результаты, чем метод при  $n = 1$ .

В третьем параграфе главы 4 разработан численный метод решения обратной задачи, состоящей в определении поверхностного натяжения. Метод основан на разработанных алгоритмах выделения контуров изображений и численном решении нелинейного дифференциального уравнения Юнга-Лапласа. Также предложен и реализован численный метод нахождения поверхностного натяжения на основе приближенной формулы Дорсея.

В четвертом параграфе главы 4 дано описание созданного программного комплекса для компьютерной обработки данных метода "лежащей капли". Приведены результаты тестирования программ и результаты компьютерного анализа металлических систем. На примере системы Al-Ni проведен расчет адсорбции системы с использованием разработанного пакета и программ главы 3.

Вторая часть главы 4 посвящена созданию методов обработки результатов фракционного газового анализа жидких металлических систем, основанных на предложенных математических моделях, описывающих процесс выделения окиси углерода при восстановлении оксидного включения в образце.

В пятом параграфе главы 4 рассмотрена постановка задачи неизотермического восстановления в жидких металлических системах, разработана математическая модель процессов, протекающих в аппарате. Разработан

численный метод определения функции изменения концентрации CO до прохождения газодинамической системы аппарата по измеренному сигналу.

В шестом параграфе главы 4 предложены и исследованы математические модели выделения CO при восстановлении оксидного включения в образце (выделение кислорода из объема образца; выделение кислорода с поверхности образца с учетом и без учета термодинамики расплава). Проведено качественное сравнение моделей при описании экспериментальных данных.

В седьмом параграфе главы 4 приведены алгоритмы обработки и анализа экспериментальных кривых фракционного газового анализа. Описан разработанный пакет программ, позволяющий производить определение типов оксидных включений и их количественного содержания в образце. Даны примеры практического применения программного комплекса.

В **Заключении** приведены основные результаты, выносимые на защиту.

## Список литературы

- [1] Крылов А. С., Кацнельсон А. М., Кашин В. И. Модель квазиидеальных ассоциированных растворов // Взаимодействие металлических расплавов с газами и шлаками. — М.: Наука, 1986. — С. 57–63.
- [2] Физико-химические закономерности взаимодействия меди и серы в расплавах железа при обработке сульфидным шлаком / А. М. Кацнельсон, Л. М. Соيفер, А. С. Крылов, В. И. Кашин // *Сталь*. — 1986. — № 3. — С. 29–32.
- [3] Термодинамические свойства расплавов системы Na<sub>2</sub>S - Cu<sub>2</sub>S - FeS / А. М. Кацнельсон, А. С. Крылов, Л. М. Соيفер, В. И. Кашин // *Расплавы*. — 1987. — № 1. — С. 48–54.
- [4] Крылов А. С. О численном нахождении функции радиального распределения жидкого Ga по структурному фактору // Некоторые вопросы

вычислительной математики, математической физики и программного обеспечения ЭВМ. — М.: Изд-во МГУ, 1987.

- [5] Термодинамика расплавов сульфидов меди, железа и натрия / А. М. Кацнельсон, А. С. Крылов, Л. М. Сойфер, В. И. Кашин // *Цветные металлы*. — 1988. — № 5. — С. 28–30.
- [6] Термодинамика расплавов и область аморфизации системы марганец-фосфор / В. Дашевский, К. В. Григорович, А. М. Кацнельсон, А. С. Крылов // *Расплавы*. — 1988. — № 4. — С. 3–7.
- [7] О связи строения известково-железистых расплавов и кинетики их восстановления / Л. М. Сойфер, И. Ф. Лопушинский, Н. М. Воронин, А. С. Крылов // *Расплавы*. — 1989. — № 1. — С. 10–15.
- [8] Крылов А. С., Щедрин Б. М. Численный метод нахождения функции радиального распределения // *Кристаллография*. — 1989. — Т. 34, № 5. — С. 1088–1092.
- [9] Кацнельсон А. М., Крылов А. С., Кашин В. И. Модель для прогнозирования термодинамических свойств растворов по данным о бинарных системах // *ДАН СССР*. — 1989. — Т. 308, № 5. — С. 1173–1076.
- [10] Kashin V. I., Katsnelson A. M., Krylov A. S. A Model of Quasi-Ideal Associated Solutions to Describe Thermodynamics of Binary Melts // *International Journal of Materials Research (Zeitschrift fur Metallkunde)*. — 1990. — № 7. — С. 516–520.
- [11] Denisov A. M., Krylov A. S. Numerical solution of integral equations of the first kind // *Computational Mathematics and Modeling*. — 1990. — Vol. 1, no. 2. — Pp. 137–142.
- [12] Применение методов термодинамического анализа и математического моделирования для разработки процесса рафинирования расплавов железа от меди / В. И. Кашин, А. М. Кацнельсон, А. М. Денисов,

- А. С. Крылов // *Фундаментальные науки - народному хозяйству.* — М.: Наука, 1990. — С. 208–211.
- [13] Термодинамические свойства расплавов марганец-фосфор и марганец-кремний / В. Дашевский, А. М. Кацнельсон, А. С. Крылов и др. // *Теория и практика металлургии марганца.* — М.: Наука, 1990. — С. 9–18.
- [14] Совершенствование методики расчета плотности и поверхностного натяжения металлических расплавов по данным, полученным методом лежащей капли / А. В. Введенский, А. С. Крылов, А. М. Кацнельсон, В. И. Кашин // *Современные проблемы порошковой металлургии, керамики и композиционных материалов.* — Киев: Инст. пробл. материаловедения АН УССР, 1990. — С. 19–22.
- [15] О вычислении термодинамических характеристик четырехкомпонентных расплавов по данным о бинарных системах / А. С. Крылов, В. Мирюк, А. М. Кацнельсон, В. И. Кашин // *Тезисы докладов второго Всесоюзного совещания Базы физико-химических и технологических данных для оптимизации металлургических технологий.* — Курган: Полиграфист, 1990. — С. 179.
- [16] *Глазов М. В., Палий Н. А., Крылов А. С.* Использование различных модификаций метода регуляризации при обработке данных дифракционного эксперимента // *Физика металлов и металловедение.* — 1991. — № 2. — С. 134–140.
- [17] *Крылов А. С.* Численный метод определения функций радиального и цилиндрического распределения жидких и аморфных металлов // *Некорректно поставленные задачи в естественных науках. Тезисы докладов Международной конференции.* — М.: Изд-во ИПМ АН СССР, 1991. — С. 178.

- [18] Denisov A. M., Dolotov A. Y., Krylov A. S. Inverse problem for the model of evaporation of a binary alloy // *Computational Mathematics and Modeling*. — 1992. — Vol. 3, no. 2. — Pp. 128–131.
- [19] Krylov A. S. On a new approach to calculation of liquid and amorphous metals structure // *Abstracts of the 8 International Conference on Liquid and Amorphous Metals*. — 1992. — P. 94.
- [20] Крылов А. С., Спиридонов М. А. Компактное представление структурных зависимостей поверхностного слоя жидкой меди // *Расплавы*. — 1993. — № 4. — С. 81–84.
- [21] Software package for determination of surface tension of liquid metals / A. S. Krylov, A. V. Vvedensky, A. M. Katsnelson, A. E. Tugovikov // *J. Non-Cryst. Solids*. — 1993. — Vol. 156-158. — Pp. 845–848.
- [22] Krylov A. S., Katsnelson A. M. The Application of the Model of Quasi-ideal Associated Solutions to the Calculation of the Thermodynamics of Ternary Melts // *International Journal of Materials Research ( Zeitschrift fur Metallkunde )*. — 1993. — Vol. 84, no. 3. — Pp. 641–644.
- [23] Krylov A. S., Vvedenskii A. V. Software Package for Radial Distribution Function Calculation // *Journal of Non-Crystalline Solids*. — 1995. — Vol. 192–193. — Pp. 683–687.
- [24] Крылов А. С. Об одном проекционном методе обращения интегральных преобразований // Тезисы докладов конференции Обратные и некорректно поставленные задачи. — МГУ: 1995. — С. 29.
- [25] New Approach to the Fractional Gas Analysis Application in Metallurgy and Material Control Using Oxide Separation Software Developed / K. V. Grigorovitch, A. M. Katsnelson, A. S. Krylov, A. V. Vvedenskii // *Proceedings of the Fifth International Conference on Progress in Analytical Chemistry in the Steel and Metals Industry*. — 1995. — Pp. 527–532.

- [26] *Krylov A. S.* Projectional method for inverse Fourier type transforms: application for diffraction data treatment // Тезисы докладов международной конференции Обратные и некорректно поставленные задачи. — М.: Диалог-МГУ, 1996. — С. 111.
- [27] *Крылов А. С., Ишмаев С. Н.* Метод расчета парциальных корреляционных функций по данным комбинации дифракционных экспериментов // Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов. — Дубна: 1997. — С. 95.
- [28] *Grigorovitch K. V., Krylov A. S.* Thermodynamics of liquid Al-Ni alloys // *Thermochimica Acta.* — 1998. — Vol. 314. — Pp. 255–263.
- [29] *Григорович К. В., Красовский П. В., Крылов А. С.* Экспериментальное исследование и математическое моделирование термодинамических свойств расплавов систем Ni-Cr и Ni-Cr-O // Институту металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова 60 лет. — М.: Элиз, 1998. — С. 147–159.
- [30] *Крылов А. С., Лякишев А. В.* Неравенство для норм функций Эрмита на конечном интервале // *Вестн. Моск. Ун-та, сер. 15, вычисл. матем. и киберн.* — 1999. — № 1. — С. 17–19.
- [31] Phase transition in liquid cesium near 590K / L. A. Blagonravov, S. N. Skovorod'ko, A. S. Krylov et al. // *Journal of Non-Crystalline Solids.* — 2000. — Vol. 277, no. 2/3. — Pp. 182–187.
- [32] *Krylov A. S., Liakishev A. V.* Numerical Projection Method for Inverse Fourier Transform and Its Application // *Numerical Functional Analysis and Optimization.* — 2000. — Vol. 21, no. 1–2. — Pp. 205–216.
- [33] *Krylov A. S., Poliakoff J. F., Stockenhuber M.* An Hermite expansion method for EXAFS data treatment and its application to Fe K-edge spectra // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2000. — Vol. 2, no. 24. — Pp. 5743–5749.

- [34] *Krylov A. S., Liakishev A. V.* A Modification of the Projection Method for Integral Equation of the First Kind // *Computational Mathematics and Modeling*. — 2001. — Vol. 12, no. 3. — Pp. 271–278.
- [35] *Krylov A. S., Kortchagine D. N.* Projection filtering in image processing // *Proceedings Int. Conference Graphicon 2000*. — 2000. — Pp. 42–45.
- [36] Обработка и интерпретация результатов фракционного газового анализа / К. В. Григорович, П. В. Красовский, С. А. Исаков, А. С. Крылов // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. — 2002. — Т. 68, № 9. — С. 3–9.
- [37] *Григорович К. В., Крылов А. С.* Экспериментальные исследования и согласованное описание термодинамических свойств металлических расплавов на основе никеля // *Фундаментальные исследования физико-химии металлических расплавов*. — М.: ИКЦ Академкнига, 2002. — С. 78–97.
- [38] Computational Diagnosis of Temperature Dependence of the Structure of Liquid Metals / A. A. Gorokhov, A. S. Krylov, L. A. Blagonravov, S. N. Skovorod'ko // *Computational Mathematics and Modeling*. — 2003. — Vol. 14, no. 4. — Pp. 360–368.
- [39] *Kortchagine D. N., Krylov A. S.* Image database retrieval by fast Hermite projection method // *Proceedings of Graphicon*. — 2005. — Pp. 137–140.
- [40] Fractional gas analysis method for non-metallic inclusion control / K. V. Grigorovitch, P. V. Krasovskii, S. S. Shibaev, A. S. Krylov // *Journal Guangdong Non-Ferrous Metals*. — 2005. — Vol. 15, no. 2. — Pp. 213–215.
- [41] *Krylov A. S., Korchagin D. N.* Fast Hermite Projection Method // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2006. — Vol. 4141. — Pp. 329–338.
- [42] *Krylov A. S., Mizotin M. M., Glazoff M. V.* Numerical differentiation by Hermite projection method // *International Conference "Tikhonov and Contemporary Mathematics"*. — 2006. — P. 106.

- [43] Крылов А. С., Нафжафи М. A Projection Method for Edge Detection in Images // *Computational Mathematics and Modeling*. — 2007. — no. 1. — Pp. 87–94.
- [44] The short-range order in the surface layers of melts Cu-Au (Ge) by electron diffraction / M. A. Spiridonov, S. I. Popel, A. S. Krylov, M. M. Mizotin // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2008. — Vol. 98. — Pp. 53–56 (012014). — part 1.
- [45] Krylov A. S., Tsibanov V. N., Denisov A. M. Image Enhancement by Total Variation Quasi Solution Method // *Pattern Recognition and Image Analysis*. — 2008. — Vol. 18, no. 2. — Pp. 285–288.
- [46] Цибанов В. Н., Крылов А. С. Применение метода регуляризации Тихонова для выделения контуров изображений // *Вестн. Моск. Ун-та, сер. 15, вычисл. матем. и киберн.* — 2008. — № 2. — С. 11–16.
- [47] Сглаживание данных атомно-эмиссионной спектроскопии / Г. С. Спрыгин, К. В. Григорович, М. М. Мизотин, А. С. Крылов // *Заводская лаборатория*. — 2008. — Т. 74, № 2. — С. 3–7.
- [48] Влияние структурного фазового перехода на электросопротивление жидкого цезия / Л. А. Благоднаров, А. С. Крылов, М. М. Мизотин и др. // *Теплофизика высоких температур*. — 2008. — Т. 46, № 2. — С. 225–229.
- [49] Борисенко Г. В., Денисов А. М., Крылов А. С. Об одном диффузионном методе фильтрации и повышения резкости изображений // *Программирование*. — 2008. — Т. 34, № 5. — С. 32–36.
- [50] Grigorovich K. V., Krylov A. S. Experimental investigation and joint description of the thermodynamic properties of Ni-Cr-Al melts // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2008. — Vol. 98. — Pp. 45–48 (032011). — part 3.