

УДК 536.758; 539.201

## О ДИАГНОСТИКЕ И УПРАВЛЕНИИ СОСТОЯНИЕМ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ В ТЕХНОЛОГИИ ЦЕМЕНТАЦИИ

В. Б. Гласко, Ю. В. Гласко, М. А. Осипенко

(кафедра математики)

Предложены корректные постановки задачи об определении углеродного потенциала атмосферы газовой печи при цементации сталей и обратной к ней. Разработаны и реализованы в СИ-программе алгоритмы их решения.

1. Проблема автоматизации управления технологическими процессами химико-термической обработки материалов в газовых печах обсуждается достаточно широко [1, 2]. Однако анализ корректности возникающих при этом математических моделей, без чего невозможна разработка эффективных управляющих систем, в литературе отсутствует. Настоящая работа, связанная с одной из технологий поверхностного упрочнения деталей, призвана восполнить этот пробел, что полезно как для понимания особенностей задачи, так и для выработки новых технологических решений.

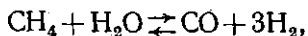
В работе [3] рассмотрен один из возможных алгоритмов автоматизации управления процессом цементации стальных деталей в газовой печи на предмет получения в поверхностном слое параметрически заданного распределения углерода. Наряду с продолжительностью процесса в качестве управляющего параметра был задан, как это обычно делается [1], углеродный потенциал атмосферы  $C$ .

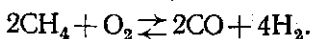
Однако величина углеродного потенциала не может быть задана технологом непосредственно. Она является результатом взаимодействия молекул газов, заполняющих атмосферу печи, и взаимодействия образующегося углерода с поверхностью металла.

В этой связи возникает задача о выборе состава атмосферы, обеспечивающего нужный углеродный потенциал. Эта задача относится к числу обратных, и вопросы корректности ее постановки [4] требуют специального внимания. Представляет интерес и сопутствующая ей задача прямого моделирования состояния атмосферы, решение которой позволяет ответить и на другой вопрос: каков будет углеродный потенциал атмосферы печи при заданном ее начальном состоянии.

Обе эти задачи рассматриваются нами в рамках простейших математических моделей взаимодействия газов при достаточном для управления невысоком уровне углеродного потенциала, исключающем интенсивное сажеобразование ( $C \leq 4\%$  по массе [1]). Предлагаемые для решения алгоритмы реализованы в СИ-программе для ЭВМ. Эта программа служит датчиком состояния атмосферы, а также позволяет оценить точность, с которой должны быть заданы характеристики этого состояния для получения углеродного потенциала с допустимой погрешностью.

2. Обратимся к формулировке математической модели состояния атмосферы, которые будем характеризовать [1] парциальными давлениями  $p_i$  ( $i=1, \dots, 6$ ) следующих ее компонентов:  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$ . Между ними возможны лишь три двусторонние реакции, идущие с образованием водорода, обычно регистрируемого в технологических установках:





Ввиду быстрого по сравнению со скоростью процесса насыщения стали протекания реакций естественно принять равновесную модель состояния с известными константами равновесия:  $K_j = K_j(T)$ , где  $T$  — температура,  $j=1, 2, 3$  [5]. Тогда значения  $p_i$ , как это следует из (1), связаны уравнениями

$$\begin{aligned} p_4 &= K_1 p_2 p_3 / p_1^2, \\ p_5 &= (K_1^2 / K_2) p_2^2 p_3 / p_1^4, \\ p_6 &= (K_1^2 / K_3) p_2^2 / p_1^2, \end{aligned} \quad (2)$$

где в качестве независимых парциальных давлений нами выбраны  $p_1, p_2, p_3$ .

Система (2) не определяет состояние атмосферы однозначно, и мы дополним ее, исходя из закона сохранения масс.

Будем считать атмосферу печи в процессе углеродообразования замкнутой средой неизменного объема. Тогда количество атомов каждого элемента (H, O, C) остается неизменным, и так как по закону Клапейрона—Клаузиуса число это для каждой грамм-молекулы содержащего тот или иной элемент соединения кратно парциальному давлению соответствующего газа, то остаются неизменными следующие линейные комбинации давлений:

$$\begin{aligned} p_2 + p_4 + 2p_5 + 2p_6 &= \alpha, \\ 2p_1 + 2p_2 + 4p_3 &= \beta, \\ p_3 + p_4 + p_5 &= \gamma, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  определяются, например, начальным состоянием атмосферы.

Поскольку при заданных начальных условиях число атомов углерода определено однозначно, активность атомарного углерода  $a_C$  в равновесии с металлом, играющая роль парциального давления при абсорбции углерода поверхностью металла, может быть определена из любой реакции взаимодействия с металлом, для которой известна константа равновесия  $K^* = K^*(T)$ . Выберем реакцию:



где C — углерод в твердом растворе, равновесное значение концентрации которого, выраженное в массовых процентах, и есть углеродный потенциал.

Тогда

$$a_C = K^* p_4^2 / p_5 \equiv K^* K_2 p_3 / p_1^2, \quad (4)$$

где  $p_1, p_3$  — равновесные значения соответствующих давлений. Отметим, что согласно [1, 2]  $K^* \approx 10^2$ ,  $K_1 \approx K_2 \approx 10^3$ ,  $K_3 \approx 10^{22}$ .

Для определения углеродного потенциала в области используемых на практике его значений имеем уравнение [1]

$$\begin{aligned} \eta &= 4,65 \cdot 10^2 C, \\ \psi(\eta) &= \ln[\eta / (a_C (1 - 5\eta))] + (2105/T - 0,6735 + (317/T) \eta / (1 - \eta)) \ln 10 + \\ &+ \varepsilon = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\eta$  — равновесная концентрация углерода в атомных долях,  $\eta < 0,2$ , а  $\epsilon$  — параметр легирования материала.

Обратимся к возможной формулировке задачи управления.

3. Поскольку значения углеродного потенциала определяются давлениями реагирующих газов, задача управления процессом сводится к определению этих последних по требуемому значению  $C$ . Такая задача, связанная с обращением причинно-следственных связей, относится к числу обратных (см., напр., [7]).

Очевидно, при заданном  $C$  соотношения (5) однозначно определяют  $a_c$ , и тогда оказывается (см. (4)), что для достижения требуемого потенциала равновесные давления  $p_3$  и  $p_1$  должны быть связаны равенством  $p_3 = q p_1^2$ , где  $q = (a_c / K^*) K_2$ .

Учитывая (2) и (3), мы приходим теперь к следующей неопределенной системе трех уравнений с пятью неизвестными ( $p_1, p_2, \alpha, \beta, \gamma$ ):

$$\begin{aligned} p_3 &= \beta/2 - p_1 - 2q p_1^2, \\ \alpha &= q (p_2/p_1) (K_1 + 2A p_2/p_1) + p_2 + 2B p_2^2/p_1^2, \\ \gamma &= q (p_1^2 + K_1 p_2/p_1 + A p_2^2/p_1^2), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $A = K_1^2/K_2$ ,  $B = K_1^2/K_3$ .

Таким образом, данному  $C$  может соответствовать, вообще говоря, бесконечно много равновесных состояний атмосферы, зависящих от двух параметров, и задача оказывается некорректно поставленной.

Примем в качестве базисных следующие два параметра: величину  $\beta$ , характеризующую уровень давлений углеродсодержащих соединений, и значение  $p_1$ , что соответствует «управлению по водороду». При любом  $\beta$  возможное значение  $p_1$  определяется требованием  $p_2 > 0$ , что согласно (6) приводит к условию

$$p_1 \in (0, p_1^{\max}), \quad p_1^{\max} = (\sqrt{1 + 4q\beta} - 1)/(4q). \quad (7)$$

Для любой пары  $(\beta, p_1)$  уравнение  $p_3 = q p_1^2$  и уравнение (2) определяют все остальные давления в равновесном состоянии.

Расчеты обнаруживают устойчивость результата относительно малых вариаций параметра легирования, значения которого определяют специальную подпрограммой по заданному технологическому коду [3].

На рис. 1 результат представлен для  $\beta = 1$ ,  $p_1 = 0,5 p_1^{\max}$  ( $T = 930^\circ \text{C}$ ) для трех различных марок стали: ст. 40ХМФА ( $\epsilon = -0,128$ ), ст. 40 ( $\epsilon = 0$ ), ст. 40ХС ( $\epsilon = 0,108$ ). Поскольку  $K_3 \gg 1$ , при выбранной паре  $(\beta, p_1)$  оказывается, что  $p_3$  (метан)  $\sim 10^{-6}$ , величина  $p_6$  (кислород) пренебрежимо мала, и  $p_2 \approx p_1 \approx 0,5$  атм. Остальные давления углеродсодержащих соединений,  $p_4$  и  $p_5$ , изображенные на рисунке в двух различных масштабах, интенсивно возрастают с ростом задаваемого значения  $C$ .

Поскольку целью управления является получение нужного распределения углерода в приповерхностном слое в металле, а величина  $C$  — результат приближенного решения соответствующей обратной задачи [3], то задается приближенное значение  $C$ . Возникает вопрос о степени устойчивости решения рассматриваемой здесь обратной задачи:  $C \rightarrow \{p_i\}$ , решаемый с помощью математического эксперимента.

Пусть  $\delta_1 = |\Delta C/C|$ , где  $\Delta C = \pm C \delta$  — имитируемая на данном уровне  $\delta$  погрешность в  $C$ ;  $\epsilon_1 = \max |\Delta p_i/p_i|$  — мера относительной погреш-

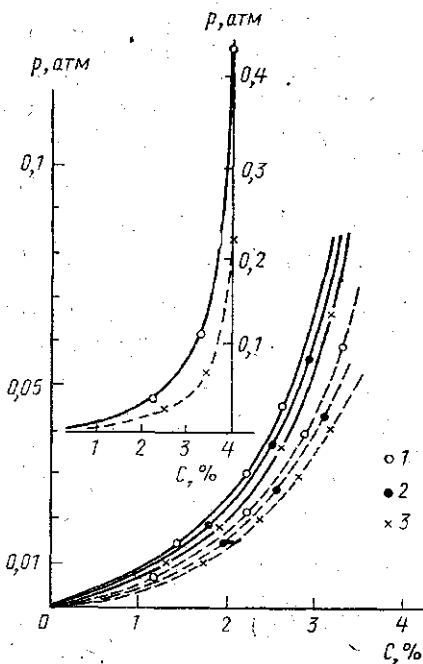


Рис. 1. Равновесные давления газов в зависимости от углеродного потенциала атмосферы для различных сталей:  $\epsilon=0,108$  (1); 0 (2) и  $-0,128$  (3); сплошная линия —  $p_4$ , штриховая —  $p_5$

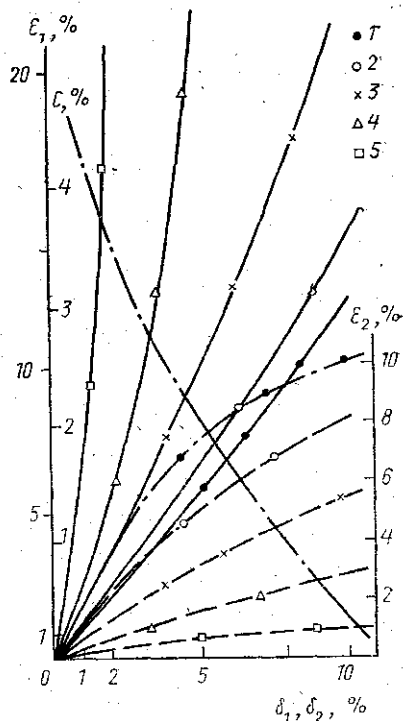


Рис. 2. Зависимость погрешности решения задачи от погрешности входных данных для различных значений углеродного потенциала:  $C=0,5$  (1), 1 (2), 2 (3), 3 (4) и 4 (5); сплошная линия соответствует задаче управления, штриховая — задаче прогнозирования

ности рассчитанных давлений. Зависимость  $\epsilon_1 = \epsilon_1(\delta_1)$  (модуль непрерывности) для различных уровней углеродного потенциала представлена на рис. 2 сплошными кривыми. Неравномерная зависимость модуля непрерывности от уровня  $C$  отражает возможную неустойчивость задачи управления. На рис. 2 штрих-пунктирная кривая ограничивает (справа) значения  $\delta_1$ , при которых погрешность в определении давлений не превосходит 10% независимо от уровня  $C$ .

Для выделения единственного решения задачи управления следует учесть в ее постановке информацию о возможностях конкретного технологического устройства. Мы сделаем это в виде ограничений на суммарные давления газов, содержащих один из трех элементов:  $0 < \max(\alpha, \beta, \gamma) \leq p^*$ , при заданном  $p^*$ .

Соответствующий алгоритм строится следующим образом. Пусть  $\beta = p^*$ ; тогда  $p_1^{\max}(\beta)$  определено однозначно. Значение  $p_1 \in (0, p_1^{\max})$  будем выбирать по условию:  $\kappa = \max(\alpha, \gamma) = p^*$ .

Как можно наблюдать в специальном математическом эксперименте, в характерной области изменений  $C$  и  $T$   $\kappa = \kappa(p_1, \beta)$  — монотонно убывающая функция  $p_1$  при фиксированном  $\beta$ , для которой  $\lim_{p_1 \rightarrow 0} \kappa(p_1) = \infty$  и  $\lim_{p_1 \rightarrow \infty} \kappa(p_1) = 0$ ; при этом для любого  $p_1$   $\partial \kappa / \partial \beta > 0$ . Характерное по-

ведение  $\kappa(p, \beta)$  при  $C=1$ ,  $\varepsilon=0$  представлено на рис. 3. Видно, что задача, определенная указанными требованиями, имеет единственное решение в интересующей нас области.

Выбор  $p_1$  иллюстрируется на рис. 3 штриховой линией для  $\beta=0,8$ . Очевидно, предполагаемая процедура, зависящая от двух «технологических» параметров  $p^*$  и  $\varepsilon_1$ , играет роль регуляризирующего (по Тихонову) оператора для задач управления [5].

Обратимся к задаче прогнозирования углеродного потенциала по заданному начальному состоянию атмосферы.

4. В этом случае исходными данными являются «начальные» давления:  $p_i^0$  ( $i=1, 2, \dots, 6$ ), по которым в соответствии с (3) вычисляются  $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ . Уравнения (2), (3), решаемые при этих вычисленных параметрах, определяют равновесное состояние атмосферы.

Может оказаться, что при заданных  $p_i^0$  система (2) — (3) несовместна, и тогда программа выдает диагноз: «равновесие невозможно». Но если решение существует и найдено, то из (4) — (5) определяется углеродный потенциал.

С другой стороны, математический эксперимент, основанный на алгоритме решения такой задачи, позволяет ответить на вопрос о том, с какой погрешностью будет получен углеродный потенциал атмосферы при случайной погрешности «физического» задания давлений, рассчитанных предварительно путем решения обратной задачи. В этом случае в качестве начальных можно взять эти известные равновесные давления. Нетрудно заметить, что таким путем решается и вопрос об устойчивости по отношению к предшествующей постановке.

Наконец, наличие предлагаемого ниже экономичного алгоритма для прямого моделирования позволяет решать обратную задачу ( $C \rightarrow p_i$ ) автоматизированным методом подбора [4] как альтернативу предложенному выше.

Можно заметить, что в силу соотношений (2) в левой части уравнений (3) оказываются функции от трех переменных  $x=p_1, y=p_2, z=p_3$ , а сами уравнения можно переписать в виде

$$\begin{aligned} (zy/x^3) (K_1 + 2Ay/x) + y + 2By^2/x^2 - \alpha_0 &= 0, \\ z(1 + K_1y/x^3 + Ay^2/x^4) - \gamma_0 &= 0, \\ z &= (1/2) [(\beta_0/2) - x - y]. \end{aligned} \quad (8)$$

Первые уравнения этой системы кубичны относительно  $y$ , и потому, исключая  $y^3$ , можно одно из них заменить результатом обоих. В итоге приходим к следующей системе:

$$\begin{aligned} y_s &= p(x) + (-1)^{s+1} \sqrt{D(x)} \quad (s=1, 2), \\ \varphi_s(x) &= (1/2) (\beta_0/2 - x - y_s(x)) (x^4 + K_1y_s(x)x + Ay_s^3(x)) - \gamma_0x^4 = 0, \end{aligned} \quad (9)$$

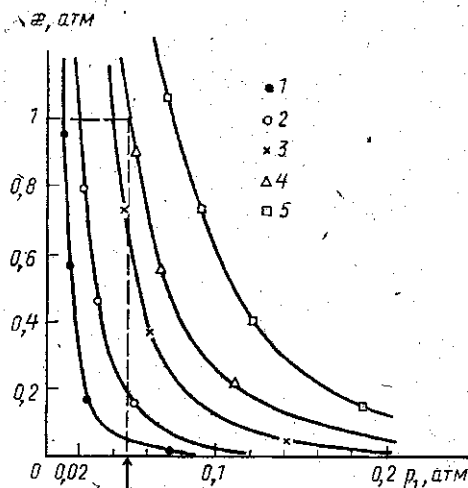


Рис. 3. Выбор значения управляющего давления  $p_1$  при различных характеристиках начального состояния газовой атмосферы:  $\beta=0,2$  (1); 0,4 (2); 0,8 (3); 1 (4) и 1,6 (5)

где  $p(x) \equiv (1/2)(K_1(\beta_0/2 - x) - 2x^3)/(K_1 + 4Bx)$ ;  $D \equiv p^2 - q(x)$ ;  $q(x) \equiv 2(\lambda + x)x^3/(K_1 + 4Bx)$ ,  $\lambda \equiv 2\gamma_0 - a_0 - \beta_0/2$ .

Поскольку заведомо  $x, y, z > 0$ , то нас интересуют лишь решения, удовлетворяющие условию  $0 < x + y < \beta_0/2$ , и в частности  $x < \beta_0/2$ .

Обозначим через  $x^*$  ближайший к нулю корень уравнения  $D(x) = 0$ , если он меньше  $\beta_0/2$ , полагая, что в противном случае  $x^* = \beta_0/2$ . Так как, очевидно,  $D(0) > 0$ , то решение уравнения  $\varphi_s(x) = 0$  (при ал-

горитмически определенном  $y_s(x)$ ) будем искать на интервале  $(0, x^*)$ , а отсутствие решения свидетельствует о некорректности задачи при соответствующих начальных данных.

Результаты решения обратной задачи были использованы нами для выяснения вопроса о единственности состояния равновесия в случае априорного его существования. Соответствующий математический эксперимент обнаруживает, что лишь одна из функций  $\varphi_s(x)$  (либо при  $s=1$ , либо при  $s=2$ ) может иметь корень на сегменте  $[0, x^*]$ , и притом только один. Этот вывод иллюстрируется рисунком 4, где для варианта, когда  $x^* = \beta_0/2$  ( $C=1$ ,  $\epsilon=0$ ), характерное поведение функций  $\varphi_s(x)$  представлено для трех обычно используемых при цементации [1] значений температуры; на рисунке более крупным масштабом выделена область корня.

Корневое значение  $x = \hat{x}$  определяется на  $(0, x^*)$  методом вилки с рационально органи-

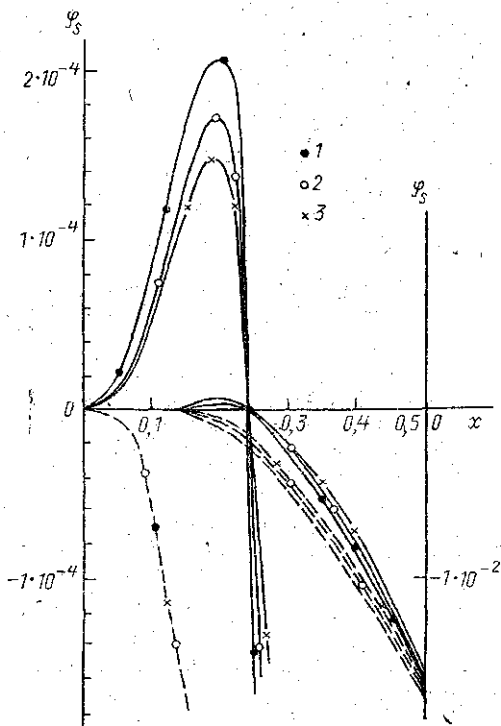


Рис. 4. Иллюстрация единственности решения задачи прогнозирования в заданном температурном диапазоне:  $T=850$  (1),  $930$  (2) и  $1025^\circ\text{C}$  (3); сплошная линия —  $\varphi_1(x)$ , штриховая —  $\varphi_2(x)$

зованным предварительным «прошупыванием», а  $\hat{y} = \hat{y}(\hat{x})$  вычисляется с повторным использованием соответствующей формулы (9).

Отметим, что предложенный алгоритм исключает необходимость использования якобиана системы (3) в стандартных процедурах, который при больших, как у нас, значениях  $K_j$  может быть близким к нулю.

Обращаясь к уравнению (5), определяющему по найденному равновесному давлению углеродный потенциал  $C$ , нетрудно заметить, что  $\psi'(\eta) > 0$ , причем  $\psi(\eta) \rightarrow -\infty$  при  $\eta \rightarrow 0$  и  $\psi(\eta) \rightarrow +\infty$  при  $\eta \rightarrow 0,2$ . Следовательно, заданному начальному состоянию может отвечать лишь один углеродный потенциал.

Следует ожидать, что рассматриваемая задача диагностики обладает большей устойчивостью, чем обратная ей задача управления. Именно это обнаруживает специальный математический эксперимент, некоторые результаты которого представлены на рис. 2 штриховыми кривыми. Последние выражают зависимость  $\epsilon_2 = |\Delta C/C|$  от нормы от-

носительной погрешности исходных данных:  $\delta_2 = \max_{2 \leq i \leq 6} |\Delta p_i / p_i|$ . Видно, что в интересующем нас диапазоне  $S$  эти погрешности имеют одинаковый порядок.

Это существенно для реального управления процессом, поскольку управляющие им равновесные давления не могут быть заданы точно.

Авторы благодарны В. М. Репину и П. К. Сенаторову за организационную поддержку работы, а также Ю. К. Евсееву и В. Д. Кальнеру за предоставление экспериментальной информации.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Леонидова М. Н., Шварцман Л. А., Шульц Л. А. Физико-химические основы взаимодействия металлов с контролируруемыми атмосферами. М., 1980.
2. Моделирование и автоматизация на базе ЭВМ процессов химико-термической обработки автомобильных двигателей/ЦНИИТ ЭИАВТОПРОМ. Министерство автомобильной промышленности СССР: Обзорная информация. Сер. «Технология автомобилестроения». М., 1987.
3. Гласко В. Б., Гласко Ю. В., Ключев К. В., Осипенко М. А. // ЖВМ и МФ. 1994. 34, № 1. С. 155.
4. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М., 1979.
5. Гласко В. Б. Обратные задачи математической физики. М., 1984.

Поступила в редакцию  
15.04.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 2

УДК 517.958:621.37

### КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА В ОБЛАСТИ С БЕСКОНЕЧНОЙ КУСОЧНО-ГЛАДКОЙ ГРАНИЦЕЙ

С. И. Абгалдаев, В. П. Моденов  
(кафедра математики)

Доказаны теоремы существования и единственности обобщенного решения краевой задачи для неоднородного уравнения Гельмгольца в неограниченной многосвязной области с негладкой границей.

Рассматриваемая математическая задача относится к специальному классу краевых задач математической физики, возникающих при математическом моделировании явлений волноводного распространения и дифракции электромагнитных волн на диэлектрических неоднородностях в областях с бесконечными кусочно-гладкими границами. Характерной особенностью таких задач является необходимость рассмотрения обобщенного решения, учитывающего условия в точках негладкости границы, и постановка условий излучения на бесконечности. Для построения единственного решения в работе применяется принцип предельного поглощения [1].

#### 1. Постановка краевой задачи

Рассматривается область  $\Omega$ , являющаяся подмножеством двумерного евклидова пространства  $\mathcal{R}^2$  и имеющая неограниченное дополнение. Вне круга достаточно большого радиуса  $R_0$  область представляет собой совокупность конечного числа  $K$  цилиндрических («волновод-