

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 536.758; 539.201

О НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ ТЕХНОЛОГИИ ЦЕМЕНТАЦИИ

В. Б. Гласко, Ю. В. Гласко

(кафедра математики)

Предложены и обоснованы корректные постановки задач об определении по косвенным данным параметров газовой атмосферы при цементации и об определении для того же процесса константы равновесия при взаимодействии атмосферы с поверхностью металла. Разработаны и реализованы в Си-программах алгоритмы их решения.

1. Развита в фундаментальных работах А. Н. Тихонова теория регуляризации [1] открывает широкие возможности для корректной постановки обратных задач, в том числе тех, предметом которых является определение функциональных параметров, обеспечивающих заранее заданный результат — обратных задач типа управления [2].

В работе [3] был рассмотрен вариант математически корректной постановки одной из таких задач: об управлении науглероживанием стальных деталей в газовой печи с помощью выбора начального состояния ее квазиравновесной атмосферы. В настоящей статье в качестве управляющих факторов для аналогичного процесса приняты давления газов в равновесном состоянии атмосферы, что приводит к новым критериям выбора управления и раскрывает некоторые новые аспекты корректной постановки задачи.

Как отмечалось в [4, 5], для такого рода задач не всегда известны все физические параметры модели, и для определения последних могут быть поставлены в свою очередь обратные задачи типа интерпретации некоторых косвенных данных. В настоящей статье рассматривается одна из таких задач: об определении константы равновесия для взаимодействия атмосферы с поверхностью металла, где принципиальное значение имеет проблема единственности решения.

2. Будем считать атмосферу печи замкнутой средой постоянного объема при температуре T , содержащей газы H_2 , H_2O , CH_4 , CO , CO_2 , O_2 , которым соответствуют парциальные давления p_i ($i=1-6$). Приняв в качестве независимых параметров давления первых трех газов, равновесное состояние атмосферы будем описывать уравнениями

$$p_4 = K_1 p_2 p_3 / p_1^3; \quad p_5 = (K_1^2 / K_2) p_2^2 p_3 / p_1^4; \quad p_6 = (K_1^2 / K_3) (p_2^2 / p_1^2), \quad (1)$$

где $K_j = K_j(T)$ — константы равновесия трех независимых обратимых реакций между газами [3]. Эффект внедрения атомарного углерода C в металл описывается на основе реакции $2CO \rightleftharpoons C + CO_2$, и тогда система (1) дополняется условием $a_C = K^* p_4 / p_5$, или, согласно (1),

$$a_C = K^* K_2 p_3 / p_1. \quad (2)$$

Здесь $K^*(T)$ — константа равновесия указанной реакции; a_C — так называемая активность углерода [6] в металле, однозначно определяемая, согласно (2), равновесным полем давлений.

В качестве параметра, управляющего процессом диффузии углерода в металле, принимается обычно [7] его граничная концентрация

C , выражаемая либо в массовых процентах, либо в молярных долях ($\eta = 4,65 \cdot 10^{-2} C$). Как показано в [6], связь между a_c и η определяется при достаточно малых, исчерпывающих технические цели значениях η ($\eta \in (0; 0,2)$), уравнением

$$\psi(\eta) = \ln[\eta/(a_c(1-5\eta))] + b\eta/(1-\eta) = 0, \quad (3)$$

где $b=b(T)$ — некоторая эмпирическая константа, положительная при характерных температурах цементации.

Можно заметить, что $\psi'(\eta) = (\eta(1-5\eta))^{-1} + b(1-\eta)^{-2} > 0$, если $\eta \in (0; 0,2)$; $\psi(0) = -\infty$, $\psi(0,2) = \infty$, и потому уравнение (3) имеет единственное решение на интервале $(0, 0,2)$. Таким образом, соотношения (1) — (3) однозначно определяют оператор A со значениями на указанном интервале, разрешающий уравнение (3) при заданной совокупности давлений p .

Интересующая нас обратная задача предполагает, что величина углеродного потенциала $C=\bar{C}$ заранее определена так, чтобы распределение концентрации углерода по окончании процесса диффузии отвечало заданным условиям (например, из [8]). Соответственно определено значение $\hat{\eta}$. Требуется определить соответствующее этому η равновесное состояние атмосферы.

Такая задача может быть сформулирована в виде операторного уравнения

$$Ap = \hat{\eta}, \quad (4)$$

и она оказывается некорректной хотя бы по двум причинам: а) не для всякого η решение существует; б) если решение существует, то оно заведомо неединственно, поскольку значения p_1-p_3 можно менять произвольно, не нарушая условий равновесия (1) — (2) и не меняя величины Ap .

Для устранения некорректности в указанном смысле выделим два основных параметра, соответствующих «управлению по водороду» при заданном уровне «влажности» атмосферы: $p_1 > 0$ и $\lambda = p_2/p_1 > 0$.

В качестве дополнительной информации о равновесном состоянии атмосферы введем условие

$$\sum_{i=1}^6 p_i = \hat{p}, \quad p_i > 0, \quad (5)$$

где $\hat{p}$ — величина давления во внешней по отношению к печи среде (например, $\hat{p} = 1$ атм). Оказывается верной следующая

Теорема 1. При заданных константах равновесия и давлениях p существует единственное значение $\hat{\lambda} > 0$, такое, что для любого $\eta \in (0, 0,2)$ и при любом фиксированном значении $\lambda \in (0, \hat{\lambda})$ уравнение (4) при условии (5) имеет решение, и притом единственное.

Действительно, существование хотя бы одного решения (независимо от значения λ) следует из того, что $\eta \in (0, 0,2)$ принадлежит области значений оператора Ap . Заметим теперь, что при таком η из (3) однозначно определяется a_c , а тогда из (2) следует связь:

$$p_3 = qp_1^2, \quad (6)$$

где $q = a_c/K \cdot K_2$. Вследствие соотношений (1) и (6) уравнение (5) приводит к выражению

$$p_1 = [(1+\lambda)^2 + 4q(\varphi(\lambda))^{1/2} - (1+\lambda)]/(2q). \quad (7)$$

Здесь $\varphi(\lambda) = \hat{p} - \lambda K_1 q - \lambda^2 K_1 \cdot [(q/K_2) + (1/K_3)]$ — квадратный трехчлен относительно λ , имеющий при любом $\hat{p}$ единственный положительный корень, который обозначим $\hat{\lambda}$.

Для любого $\lambda \in (0, \hat{\lambda})$, и только в этом случае, $\varphi(\lambda) > 0$ и соответственно p_1 и λ положительны. Теорема доказана.

Проведенный анализ содержит алгоритм решения задачи: поскольку $\eta = 4,65 \cdot 10^{-2} C$, а значит, известна величина q , то, задавшись уровнем влажности ($\lambda \in (0, \hat{\lambda})$), находим p_1 из (7), $p_2 = \lambda p_1$, а затем остальные давления из (6), (1). Соответствующие операции обладают свойством устойчивости, поскольку, как нетрудно убедиться (см. (3), (6), (7)), величина $\partial p_1 / \partial C$ равномерно ограничена на любом сегменте $[\lambda_1, \lambda_2] \subset (0, \hat{\lambda})$.

Заметим, что для рассматриваемой обратной задачи выбор параметра λ выполняет функцию регуляризации по Тихонову, поскольку производная $\partial p_1 / \partial C$ не является равномерно ограниченной на $(0, \hat{\lambda})$, где она может оказаться сколь угодно большой (рис. 1).

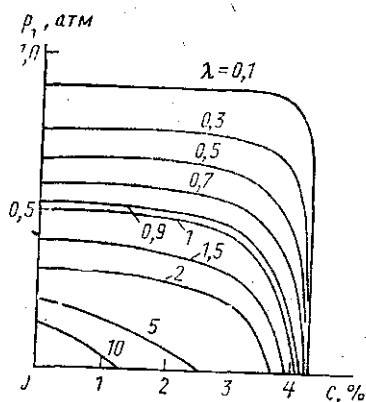


Рис. 1

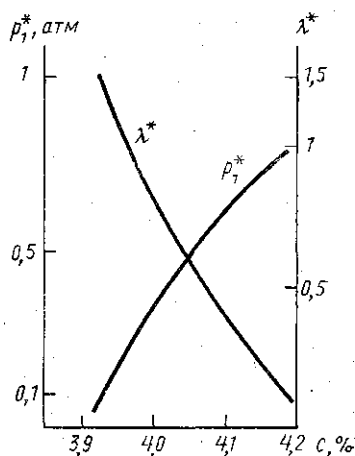


Рис. 2

С другой стороны, выбор λ может оказаться существенным для решения «прямой» задачи об управлении процессом цементации: неприемлем тот случай, когда пренебрежимо малым погрешностям управляющих давлений соответствуют вариации C , не слишком большие, но такие, что результаты цементации оказываются существенно различными [8] с точки зрения практики.

Такая ситуация возможна при достаточно малых λ («сухая» атмосфера) в области, где $\partial p_1 / \partial C \sim 0$ (см. рис. 1). Регуляризация управления может быть основана на том, что на каждой кривой при таких λ существует единственная точка, где монотонно убывающая функция C : $\partial p_1 / \partial C$ равна -1 . Значение пары (λ^*, p_1^*) , соответствующее этой точке при заданном C , и можно принять в качестве управляющего. Процедура такого выбора алгоритмизируема. Действительно, из (3), (6), (7) получается явное выражение для производной, а для уравнения $\chi(\lambda, C) = \partial p_1 / \partial C + 1 = 0$ с учетом того, что $\chi(0, C) > 0$ при любом C , имеется следующая альтернатива: а) если $\chi(\hat{\lambda}, C) < 0$, то оно имеет единственное решение вследствие монотонности χ , и в этом случае $\lambda^* = \lambda^*(C)$ выбирается как его корень; б) если $\chi(\hat{\lambda}, C) > 0$, решений нет,

но одновременно отпадает необходимость в регуляризации и λ может быть задано по технологическим условиям.

Поведение функций $\lambda^*(C)$, $p^*(C)$ в области «критических» значений C представлено на рис. 2.

3. Рассчитывая значения углеродного потенциала по заданным равновесным давлениям [3], можно убедиться, что его величина достаточно критически зависит от константы равновесия K^* : погрешность определения C может быть вчетверо больше погрешности вычисления $\lg K^*$. Эта величина как функция T определяется на практике некоторой полуэмпирической формулой [7], а коэффициенты последней — методом наименьших квадратов. Связанный с их определением физический эксперимент несет погрешность большую, чем при определении констант равновесия K_j для реакций между газовыми компонентами.

Таким образом, оператор прямого отображения (4) может содержать заметную погрешность, соответствующую неопределенности математической модели (1)–(3) относительно K^* . В такой ситуации может быть поставлена задача о предварительном определении K^* на основе косвенной информации о поле концентрации в металле по окончании процесса ($t=\hat{t}$).

В этой обратной задаче входной информацией может быть единственное числовое значение: концентрация углерода на поверхности металла при $t=\hat{t}$: $\hat{u}(0, \hat{t})$. Эта величина может быть измерена с достаточно малой относительной погрешностью δ :

$$|(\hat{u}(0, \hat{t}) - u(0, \hat{t}))/\hat{u}(0, \hat{t})| \leq \delta.$$

Сопоставляемое с $\hat{u}(0, \hat{t})$ расчетное значение концентрации $u[K^*, 0, \hat{t}]$ при любом фиксированном $K^*=K^*(T)$ определяется как решение прямой задачи: $p_0 \Rightarrow u$ при некотором начальном состоянии атмосферы p_0 . В работе [3] предложен экономичный алгоритм расчета по заданному $p_0=\{p_{i0}\}$, $i=1, 2, \dots, 6$, равновесного состояния атмосферы p , после чего величина углеродного потенциала C однозначно определяется на основе соотношений (2), (3). Обозначим этот алгоритм B_1 , и пусть B_2 — алгоритм вычисления концентрации $u((0, \hat{t})$ из решения каким-либо достаточно точным методом нелинейной задачи диффузии:

$$\begin{aligned} \partial(D(u) du/dx)/\partial x &= du/dt, \quad x \in (0, l), \quad t \in (0, \hat{t}), \quad u|_{t=0} = u_0, \\ D(u) du/dx|_{x=0} &= \beta(u|_{x=0} - C), \quad du/dx|_{x=l} = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

где $D(u)$ и β — заданные коэффициенты диффузии и массообмена [13], причем $\beta = \text{const}$, $D(u) > 0$ и существует неотрицательная производная $D'(u)$.

Очевидно, суперпозиция указанных операторов $B=B_2B_1$ при фиксированном p_0 является функцией вещественной переменной K^* : $u[K^*, 0, \hat{t}] = B(K^*)$. Этот оператор имеет то преимущество, что он содержит лишь погрешность вычислений, которая может быть сделана пренебрежимо малой, в отличие от неустраняемой погрешности эксперимента.

Таким образом, значение K^* определяется операторным уравнением

$$f(\xi) = B(\xi) - u = 0 \quad (9)$$

с алгоритмически определенной левой частью. То, что это обычное конечное уравнение вида $f(\xi)=0$, определенное на некотором множе-

стве значений вещественной переменной, не снимает вопросов корректности постановки задачи (9), которые и рассмотрим.

Отметим, что известные из литературы [6, 7] эмпирические выражения для K^* позволяют ограничить сегмент $\Delta_1 = [K_1^*, K_2^*]$, к которому принадлежит константа равновесия K^* .

Обозначим через $D(t)$ множество отображений Δ_1 с помощью оператора B , зависящее от t как от параметра.

Теорема 2. *Существует сегмент $\Delta_1^* \subset \Delta_1$ такой, что для любого $K^* \in \Delta_1^*$ найдется t и $u \in D(t)$, при которых решение уравнения (9) существует и единственно.*

Существование решения при любом t следует из определения u . Для установления единственности достаточно убедиться в том, что $B(\xi)$ — непрерывная и строго монотонная функция. Непрерывность ее как сложной функции ξ следует, во-первых, из непрерывности $B_1(\xi)$ по определению алгоритма (см. [1, 3]); во-вторых, из непрерывности B_2 относительно параметра C , согласно общим свойствам квазилинейных уравнений параболического типа [9]. Как видно из (8), существует $\lim_{t \rightarrow \infty} u(0, t) = C$, где C оказывается решением соответствующей

стационарной задачи (что отвечает и физике процесса). Поскольку $u(0, t)$ — монотонно возрастающая функция, большим значениям C при достаточно больших t соответствуют большие значения $u(0, t)$ по свойству пределов [10]. Следовательно, $B_2(C)$ — монотонно возрастающая функция. Убедимся в том, что аналогичным свойством обладает $B_1(\xi)$. Согласно (3), $\partial \eta / \partial \xi = -(\partial \psi / \partial \xi) / (\partial \psi / \partial \eta)$. Как показано выше, $\partial \psi / \partial \eta > 0$; $\partial \psi / \partial \xi = (\partial \psi / \partial a_c) (\partial a_c / \partial \xi) = (-1/a_c) \partial a_c / \partial \xi < 0$, так как $\partial a_c / \partial \xi > 0$ в соответствии с (2). Поэтому $\partial \eta / \partial \xi > 0$. Но по определению η , $\text{sign } \partial C / \partial \xi = \text{sign } \partial \eta / \partial \xi$, так что C монотонно возрастает с ростом ξ , в чем и требовалось убедиться. Таким образом, $B(\xi)$ — монотонно возрастающая, непрерывная функция, и, значит, сегмент Δ_1 в условиях теоремы оказывается «вилкой», что и доказывает единственность решения уравнения (8).

Устойчивость решения — непрерывная его зависимость от величины u — прямое следствие непрерывности оператора $B(\xi)$ [10] на Δ_1 и отличия от нуля (положительности) его производной.

Для оценки модуля непрерывности решения задачи нами был проведен математический эксперимент. В этом эксперименте для набора значений K_s , соответствующих различным $T = T_s$, $s = 1, 2, 3$, $T_s \in [1123 \text{ K}, 1323 \text{ K}]$, взятым из [7], значения $u_s(0, t)$ при $t = 10 \text{ ч}$ были рассчитаны с использованием асимптотических формул [11], аппроксимирующих решение (8). Погрешность входных данных имитировалась формулой $\tilde{u}_s = (1 + \delta \omega) u_s$, где ω — случайная величина с равномерным распределением на сегменте $[-1, 1]$. Уравнение (9) решалось с помощью метода вилки на сегменте $[K_1^* - v, K_2^* + v]$ при малом v . При этом значения $B(\xi)$ вычислялись также с использованием асимптотических представлений [11].

Полученные для различных δ значения K_s^* представлены на рис. 3. Оценкой относительной погрешности результата в проведенном эксперименте, где точное значение искомой величины известно, для заданного диапазона температур может служить величина $\varepsilon = \max |(K_s^* - K_s) / K_s^*|$. Ее поведение в зависимости от δ представлено на рис. 4. Можно заметить, что обычной для практических задач погрешности результата около 5% соответствует погрешность измерения температуры $\delta \sim 5\%$, что вполне достижимо.

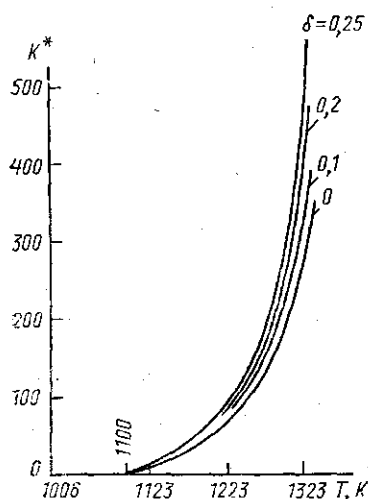


Рис. 3

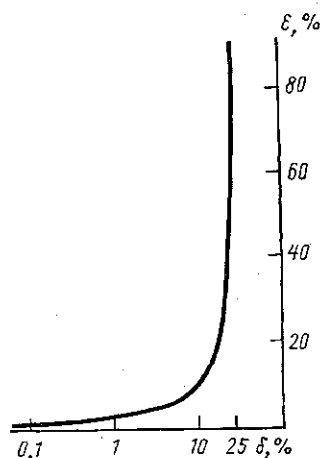


Рис. 4

Авторы выражают благодарность А. Г. Свешникову и В. М. Репину за внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М., 1979.
2. Тихонов А. Н., Кальнер В. Д., Гласко В. Б. Математическое моделирование технологических процессов и метод обратных задач в машиностроении. М., 1990.
3. Гласко В. Б., Гласко Ю. В., Осипенко М. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1995. № 2. С. 21 (Moscow University Phys. Bull. 1995. N 2. P. 18).
4. Тихонов А. Н., Кулик Н. И., Шкляров И. Н., Гласко В. Б. // Инж.-физ. журн. 1980. 39, № 1. С. 5.
5. Гласко В. Б., Щепетиллов А. В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1994. № 1. С. 3. (Moscow University Phys. Bull. 1994. N 1. P. 1).
6. Могутнов Б. М., Томилин И. А., Шварцман Л. А. Термодинамика железоуглеродистых сплавов. М., 1972.
7. Леонидова М. Н., Шварцман Л. А., Шульц Л. А. Физико-химические основы взаимодействия металлов с контролируемыми атмосферами. М., 1980.
8. Кальнер В. Д., Юрасов С. А., Гласко В. Б., Кулик Н. И. // Металловедение и термич. обработка металлов. 1986. № 1. С. 7.
9. Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н. Линейное и квазилинейное уравнения параболического типа. М., 1967.
10. Ильин В. А., Позняк Э. Г. Основы математического анализа. Т. 1. М., 1965.
11. Гласко В. Б., Гласко Ю. В., Ключев К. В., Осипенко М. А. // ЖВМ и МФ. 1994. 39, № 1. С. 156.

Поступила в редакцию
02.02.96