VI Minsk International Heat and Mass Transfer Forum
MIF 2008, Minsk, May 19-23, 2008

УДК 532.137.3

ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ РЕОСТАБИЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

И.В. Елюхина, Г.П. Вяткин

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

Измерение вязкостных свойств высокотемпературных сред обычно проводится методом крутильных колебаний [1], обладающим широкими возможностями для выявления неньютоновского поведения [2]. Традиционно результаты экспериментов интерпретируются в рамках ньютоновской модели [1], несмотря на то что реализуемые здесь условия (например, малые и изменяющиеся во времени деформации и их скорости) делают наблюдаемыми даже слабо выраженные неньютоновские свойства. Последнее может приводить к противоречиям в опытных данных, вопрос о причинах которых является одним из принципиальных в физике жидкометаллического состояния. Широкий массив данных по расплавам позволил обнаружить некоторые закономерности в наблюдаемых в эксперименте параметрах: декремента затухания δ и периода τ колебаний, связанные с их изменением в зависимости от номера колебания N. Причиной этих факторов, не принимаемых во внимание при традиционной интерпретации, как раз и может служить нелинейный характер течения в тигле.

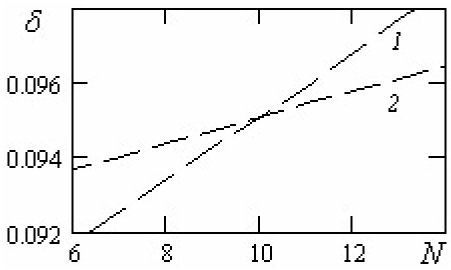
Математическую модель опыта, включающую сопряженные нестационарные дифференциальные уравнения движения тигля и исследуемой среды в нем, построим при допущениях [1]. В реологическом уравнении состояния учтем только вязкую компоненту, т.е. рассмотрим реостабильные среды. Тогда поведение вискозиметра можно интерпретировать в рамках известных соотношений для ньютоновских сред [1]. Так, прибор радиусом R и высотой H, заполненный линейными средами, вне переходных процессов совершает колебания с независимыми от N параметрами. Если жидкость нелинейна, то в связи с уменьшение скорости сдвига в процессе затухания и соответствующего изменения вязкости ν, здесь эффективной $\nu_{эф}$, происходит изменение τ и δ. Такое изменение для длинного тигля отмечено в [3], а зависимости $\delta = \delta(\xi)$ и $\tau = \tau(\xi)$, где $\xi = R/\sqrt{\nu/q_0}$, где q_0 – частота колебаний пустого тигля, для ньютоновской среды – в [1], и, например, для вязко- и псевдопластичной среды τ с ростом N увеличивается. Поэтому при оценке нелинейно вязких свойств используем точные зависимости, например, из [1] в терминах $\nu_{эф}(N)$. Далее размерные величины даны в системе СГС (температура t в °C), данные сглажены, выводы выполнены при качественной воспроизводимости особенностей в различных опытах. Моделированием установлено отсутствие влияния в расчетных значениях переходных процессов при условиях и алгоритме опыта, когда движение инициировалось в вынужденном режиме.

Неньютоновские свойства образцов. Общие тенденции в изменении δ и τ при затухании проявлялись достаточно отчетливо. Так, свойство неизосинхронности наиболее существенно после расплавления образца и угасает по мере роста t. В этой связи интерес представляют эксперименты, когда объект длительное время находится при одной и той же t, а его свойства (и реологический тип) изменяются, что проявляется в наблюдаемых в опыте параметрах. Эффекты возникали и в процессе эксперимента, особенно если на температурных зависимостях вязкости имелись аномалии. В ряде случаев зависимость $\delta = \delta(N)$ носила колебательный характер, что говорит о наличии упругих свойств. Такое характерно для линейных вязкоупругих систем в переходных процессах (здесь не проявляющихся) или при наличии дополнительно пластичных свойств. В пользу последнего свидетельствует тот факт, что $\nu_{эф}$ с ростом N изменяется, а наличие минимумов $\delta = \delta(N)$ обеспечивается таковыми на $\delta = \delta(\nu)$ для вязкоупругих сред [3]. В расчетах по возможности учены такие факторы [1] как, например, возникновение пленок на поверхности, что изменяет расчетную зависимость от формулы для одного торца до таковой для двух, и пр. Заметим, что для линейной среды τ и δ в регулярном режиме постоянны, не зависят от начального углового смещения тигля α_0, а свойства оцениваются для вязкой среды из уравнения [1], вязкоупругой – в терминах комплексной вязкости.

Пример 1. Условия эксперимента: $\delta_0 \sim 0.006$, $\tau_0 \sim 3.09$, $\tau \sim 3.18$, $R \sim 0.68$, $\chi = H/R \sim 3.4$, $A \sim 0.12$, где τ_0, δ_0 – параметры колебаний пустого тигля, A – отношение моментов инерции пустой подвесной системы и замороженной жидкости массой M : $MR^2/2$. В опытном образце в области I около точки ветвления с $t \sim 1660$ на зависимости $\delta = \delta(N)$ значения δ несколько колеблются около среднего значения, возрастающего с ростом N. Доверительные интервалы для значений δ для верхней и нижней кривых пересекаются только вблизи I. Будем исходить из монотонного характера $\delta = \delta(N)$ (рис. 1), рассмотрим точки, отвечающие верхней ветви: 1 – $t = 1670$ и 2 – 1725. При отдалении от области I колебания приближаются к изосинхронным. Для точки 2, проходимой в опыте перед точкой 1 и отвечающей более высокой t, зависимость $\delta = \delta(N)$ более пологая (что качественно характерно и для случая равных свойств одного типа среды), а усредненные по всем N значения $\bar{\delta}$ и $\bar{\nu}$ ниже (слабовязкая область [1]: $\xi_{эф} \sim 10$, для первой точки $\xi_{эф}$ ниже; $\bar{\nu} \sim 0.009$). Параметры колебаний для нелинейных сред зависят от α_0 и при различных α_0 (α_N) получаются различные $\bar{\delta}$ (для точек 1 и 2 разница $\Delta\alpha_0 < 1\%$). Для $t \sim 1675$ нижней ветви, отвечающей росту t, ситуация с $\delta = \delta(N)$ близка к таковой для точки 1, а при их совмещении с учетом α_0 ($\Delta\alpha_0 < 5\%$) данные можно полагать совпадающими. Целевая функция f имеет криволинейный овраг на плоскости неизвестных показателя m и постоянной степенной реологической модели и ввиду слабого изменения δ от N широкий диапазон значений f на оси оврага близок к минимальному, что осложняет процедуру надежной оценки. Для лучшей наблюдаемости свойств следует перейти к более низким ξ (например, в сильновязкую область), χ или высоким A. Псевдопластичные свойства выражены сильнее вблизи ветвления кривых $\delta = \delta(t)$: $m \sim 0.74$ для точки 1 и $m \sim 0.88$ для точки 2 (при $\alpha_0 \sim 0.1$), что говорит о структурных превращениях в этом диапазоне t. На рис. 2 отмечены кривые течения в диапазоне скоростей сдвига D, проходимом в эксперименте. Для каждого опыта он может быть разный (в т.ч. разное число N, принимаемых при обработке) и это еще один из путей получения иного $\bar{\delta}$.

Пример 2. Пусть эксперименты начинаются при близких α_0 с расплавами одинакового реологического типа и свойствами (близкие содержание примесей, структура и пр.). Покажем, что неучет даже незначительного изменения δ при изменении N (обусловленное слабо нелинейным типом, например с $m = 0.85$) может приводить к ошибкам и следовательно противоречиям в данных по вязкости при использовании различных установок в предположении ньютоновского характера течения. Это особенно характерно для низких температур из исследуемого интервала. Для наглядности примем приближение длинного цилиндра (при $\delta_0 \sim 0$) в терминах безразмерных параметров (D, b и пр.) [3], моделирование закона колебаний выполним для $\alpha_0 \sim 0.11$ (с учетом переходных процессов). Значение постоянной степенного закона $b = 0.7$ принято исходя из $bD^{m-1} - 1 \to \min$ в диапазоне рабочих D; $\xi_{эф} = \xi\varphi$, где ξ фиксировано. По традиционной методике оценим φ – величину, которая для ньютоновской среды при различных опытных условиях была бы константой, для точек: $A = 0.1$, $\xi = 10$ (1); 0.2, 10 (2); 0.01, 10 (3); 0.1, 20 (4); 0.05, 15 (5); 0.075, 2 (6). Получаем: $\varphi \sim 1.08$ (1); 1.07 (2); 1.31 (3); 1.18 (4); 1.79 (5); 0.96 (6), т.е. результаты, например, по (1) и (5), часто встречаемых на практике, отличаются в среднем на 50%. Учет ошибок в иных параметрах будет давать еще более значительные отклонения. Заметим, что относительное изменение вязкости в 2 раза выше, чем изменение ξ. Высокие ошибки в параметрах установки и колебаний и различная чувствительность вязкости к ним при различных A и ξ_0, конечно, также могут изменять оценку $\bar{\nu}$ и для ньютоновской среды. Но корректный учет в рамках [1] позволит выделить их из ошибок, описанных здесь, что может служить критерием нелинейного поведения.

Данные получены в экспериментах, оптимизированных под определенную цель – надежную оценку ν ньютоновской среды. Поэтому построить строгое решение в их рамках не представляется возможным, т.к. могут быть найдены только точечные оценки без интервальных: недостаточно характеристик для статистической обработки или приводимые средние значения параметров в каждом из опытов, в их серии не являются подходящими в этом аспекте, опыты с хорошей наблюдаемостью неньютоновских эффектов (значительное изменение δ и τ от N) считались промахом и т.д. Приведенные здесь результаты интересны именно в том отношении, что обращают внимание на возможные варианты обработки и более полное использования поступающий из опыта информации. Это позволяет в рамках иного, чем ньютоновский, реологического типа расплава как исключить ряд противоречий в термодинамических зависимостях вязкости, так и установить особенности в строении чистых металлов или



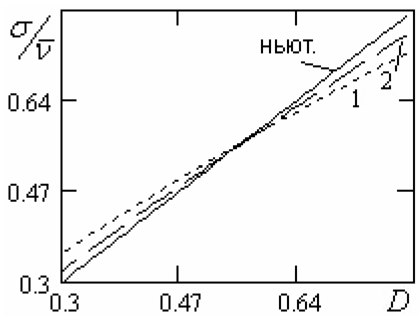


Рис. 1. Зависимость $\delta = \delta(N)$:
1, 2 – номера точек
Рис. 2. Зависимость напряжения σ от D

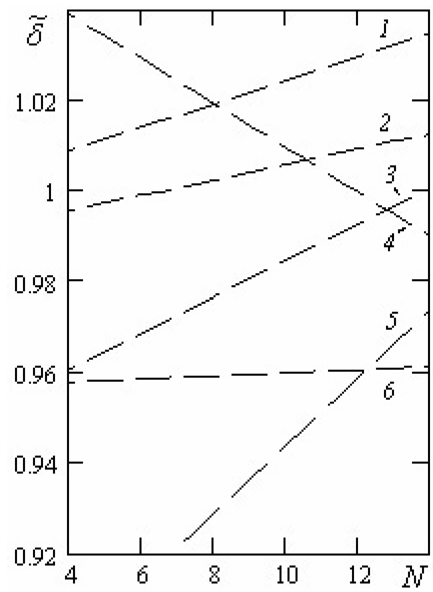


Рис. 3. Зависимости $\tilde{\delta} = \kappa\delta(N)$:
1...6 – номера точек; 1 – $\kappa = 30$,
2 – 45, 3 – 15, 4 – 34, 5 – 7, 6 – 150

возникающих в процессе опыта гетерогенных систем, структурных превращений в них.

Параметрическая идентификация. Фундаментальная задача об идентификации реологической принадлежности расплава и его свойств не может считаться решенной без реализации всего алгоритма, включающего анализ идентифицируемости и наблюдаемости системы, разработку алгоритма оценивания, определение разброса неизвестных параметров по разбросу опытных данных, проверку соответствия расчетной и эмпирической информации, планирование оптимального эксперимента [3].

Измерения характеристик возможны в ограниченном числе точек, количество таких параметров обычно невелико и размерность их вектора меньше размерности вектора состояния системы, расширенного вектором неизвестных параметров. Условие, при котором существует единственное решение задачи оценивания, это условие идентифицируемости. Систему, состоящую из математических моделей процесса и измерений, можно назвать идентифицируемой, если между вектором состояния системы, расширенным вектором характеристик жидкости, и вектором наблюдаемых величин существует взаимно однозначное соответствие. Система наблюдаема, если соответствие существует между этими векторами, когда первый не расширен.

Если модель эксперимента содержит систему нелинейных дифференциальных уравнений, то для локальной идентифицируемости необходимо, чтобы ее матрица Якоби была невырождена. Глобальная однозначность может не существовать в случае, когда критерий всюду локально выполняется, и для ее обеспечения на систему необходимо наложить дополнительное условие знакоопределенности главных миноров. Это условие является достаточным, но не необходимым, в связи с чем система может быть идентифицируема даже тогда, когда оно не выполняется. Элементы матрицы наблюдаемости можно построить, например, для бингамовской среды с пластической вязкостью v' и пределом текучести σ_0, как $J_{11} = \partial\tau/\partial v'$, $J_{12} = \partial\tau/\partial\sigma_0$, $J_{21} = \partial\delta/\partial v'$, $J_{12} = \partial\delta/\partial\sigma_0$. В невырожденных случаях обычно этот Якобиан является $N-P$-матрицей, из чего следует идентифицируемость модели. При численном описании функции чувствительности находятся из решения системы уравнений, полученной из исходной дифференцированием по неизвестным свойствам и переменой в левых частях уравнений порядка дифференцирования, с нулевыми начальными условиями. При этом задача идентификации сводится к задаче наблюдения.

Схема идентификации зависит, прежде всего, от критерия качества, представляющего здесь степень соответствия экспериментальных $x_э$ и расчетных $x_р$ значений измеряемых величин. Вид функции, являющейся аналитическим выражением критерия, численные значения и свойства получаемых значений зависят в основном от принципа оценивания. В такой постановке решение сводится к минимизации критерия на множестве возможных значений неизвестных величин. При достаточной информации об ошибках измерений функция может быть построена по методу максимального правдоподобия: $f(v',\sigma_0) = \left(\boldsymbol{\theta}_р(v',\sigma_0,N) - \boldsymbol{\theta}_э(N)\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{B}_1^{-1}\left(\boldsymbol{\theta}_р - \boldsymbol{\theta}_э\right)$, где $\boldsymbol{\theta}_р, \boldsymbol{\theta}_э$ – вектор-столбцы $x_р$ и $x_э$: τ, δ; $\mathbf{B}_1$ – ковариационная матрица ошибок измерения, диагональная положительно определенная: $\det \mathbf{B}_1 \neq 0$, элементы (i,i) равны оценкам дисперсии σ_i^2 измерения в точке N_i, остальные элементы нулевые. При этом предполагается, что закон распределения измеряемой величины является нормальным и подчиняется гауссовскому распределению, математическое ожидание ошибок равно нулю. Геометрически функция $f(v',\sigma_0)$ представляет собой поверхность, заданную таким уравнением. Здесь она имеет выраженный криволинейный овраг на плоскости

(ν', σ_0), а при определенных опытных условиях и наборе ошибок во всех измеряемых величинах возможно возникновение локальных минимумов, что затрудняет численную реализацию. Тогда эффективен комплексный поиск на основе метода конфигураций, предусматривающего локальное изучение поверхности отклика с помощью пробных шагов и ускоренное движение вдоль оси оврага, статистического метода и метода исключения областей, например, сеточного метода.

Измерения искажены случайными и систематическими ошибками, ввиду чего по опытным данным могут быть найдены не сами неизвестные параметры, а значения некоторых случайных величин – их точечных оценок, точность которых определяется с помощью интервальных оценок при данном уровне доверия. Интервалы неизвестных свойств находятся по доверительным интервалам наблюдаемых величин в предположении нормальности распределения и аддитивности ошибок измерения. Ковариационная матрица их ошибок $\mathbf{B}_2 = \left(\mathbf{L}^{\mathrm{T}} \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{L}\right)^{-1}$, где матрица функций чувствительности $\mathbf{L}$ имеет, например, вид $\left((\partial\delta/\partial\nu') \quad (\partial\delta/\partial\sigma_0)\right)$ (в общем случае содержит $l \times 2$ элементов, где l – число выбранных точек N). Определение разброса неизвестных коэффициентов позволяет рассчитать интервалы измеряемых величин, что дает возможность использовать для доказательства адекватности модели реальному процессу известные методы статистической проверки гипотез. Условие адекватности используется для анализа правильности постановки задачи, а также для выбора наилучшей модели процесса или измерения из предлагаемых. Так, располагая различными реологическими моделями и данными натурных экспериментов, идентифицируются реологический тип жидкости, а затем и свойства в его рамках. Определитель $\mathbf{B}_2$ характеризует точность описания, что позволяет проводить выбор точек измерения из условия его минимума, т.е. планирование оптимального эксперимента выполняется из решения экстремальной задачи $|\mathbf{B}| \to \max$, где

$$B_{11} = \sum_{i=1}^{l} \frac{1}{\sigma_i^2} \left(\frac{\partial\delta(N_i)}{\partial\nu'} \right)^2, \; B_{22} = \sum_{i=1}^{l} \frac{1}{\sigma_i^2} \left(\frac{\partial\delta(N_i)}{\partial\sigma_0} \right)^2, \; B_{12} = B_{21} = \sum_{i=1}^{l} \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial\delta(N_i)}{\partial\nu'} \frac{\partial\delta(N_i)}{\partial\sigma_0}.$$

Параллельные алгоритмы. Помимо используемых на практике схем распараллеливания в задачах оптимизации, решения нелинейных нестационарных распределенных систем дифференциальных уравнений, представленных в т.ч. в библиотеках PETSc и пр., при оценивании свойств расплавов крутильным вискозиметром применяются некоторые частные методики. Рассмотрим, например, одновременное измерение вязкости и плотности ρ в рамках ньютоновской модели и расчет нелинейных свойств среды с использованием точных решений для линейно вязких жидкостей. В первом случае реализуется прямая задача вискозиметрии, т.е. нахождение свойств жидкости из наблюдаемых в эксперименте параметров колебаний при реализованных параметрах установки. Надежная одновременная оценка возможна при выборе двух точек измерения с различными массами образца [4] в рамках многопараметрической задачи поиска наилучших опытных условий, им отвечающим. В соответствие некоторой высоте h_1 заполнения вискозиметра ставится высота $h_2 > h_1$, обеспечивающая оптимальную оценку, затем проводится выбор комплекса этих высот. При расчете учитывается, что с одной стороны величины h_2 и h_1 должны существенно различаться (дно оврага функции качества тогда менее пологое и ее минимум более выражен), но с другой стороны чувствительность параметров колебаний к ν и ρ с уменьшением A и чувствительность ν к ρ с ростом χ, когда влияние торцов слабее, уменьшается. Важно также, какой и параметров: вязкость или плотность, следует оценить точнее или какая из точек преобладает по чувствительности (при изменении массы изменяется наклон откосов оврага).

Во втором случае возникает алгоритм, когда на каждом шаге выполняется решение обратной задачи. В методике, например [3], для каждого N по α и параметрам τ и δ, проводится расчет скорости сдвига и эффективной вязкости, по которой из вискозиметрического уравнения для ньютоновской среды уточняются τ и δ, а степень их соответствия измеренным является критерием качества. При этом величина α_N может отсутствовать в опытных данных и определяться в расчетах совместно с τ и δ, т.к. степень изменения параметров колебаний в зависимости от N при выраженных нелинейных эффектах однозначно определяется коэффициентами реологического уравнения состояния. Расчет интервалов α для серии таких коэффициентов заданного закона (поиск h_2 для диапазона значений h_1 в первой задаче) различными процессами оптимизирует процедуру идентификации в т.ч. в плане затрат на передачу сообщений между ними. В рамках базового процесса проводится анализ выделенных областей и найденные оценки систематизируются. Ускорение при оптимальных взаимодействии процессов и выборе групп близко к линейному, а при возможном здесь сужении области рабочих величин и сокращении суммарного итерационного цикла относительно последовательной реализации, например, для 24 процессоров может достигать 30 раз. Если первая задача решается не для конкретно выбранной, а проектируемой, установки, то ее трудоемкость снижается, в частности, при распределении по процессам внешнего цикла варьируемых характеристик прибора и эффективной организации межпроцессорного обмена по равномерной и взаимо независимой их загруженности. Расчеты проводились с использованием MPI-технологий на вычислительном кластере ЮУрГУ [5].

Итак, продемонстрированы возможности экспериментальной идентификации реологического типа расплавов в общем случае как нелинейно вязких жидкостей, что в свою очередь позволяет получить новую информацию о физико-химической природе этих труднодоступных для экспериментального изучения сред, а также выполнить рекомендации для производственных целей. Подобный подход, как указывалось в [1], «открывает возможность связать кинетику процесса затвердевания сплава с его вязкостными свойствами» и будет полезен при изучении влияния и механизма удаления из исследуемых систем примесей, структурных особенностей в сплавах, проверки согласованности данных и пр.

Опытные данные любезно предоставлены проф. Г.В. Тягуновым и В.В. Вьюхиным (институт физики металлических жидкостей УГТУ–УПИ).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 07-02-96016_урал).

Литература

[1] Швидковский Е.Г., Некоторые вопросы вязкости расплавленных металлов, ГИТТЛ, Москва, 1955.

[2] Елюхина И.В. Наблюдение и измерение неньютоновских свойств высокотемпературных жидкостей крутильно-колебательным методом. Теплофизика высоких температур. 2006. Т. 44, № 3. С. 411–417.

[3] Елюхина И.В., Вяткин Г.П. Аналитический метод для оценки нелинейных свойств крутильно-колебательным методом. Инженерно-физический журнал. 2008.

[4] Елюхина И.В., Вяткин Г.П. Одновременное измерение вязкости и плотности жидкости крутильно-колебательным методом. Изв. вузов. Черная металлургия. 2006. № 5. С. 3–6.

[5] http://infinity.susu.ac.ru.