УДК 536.24 621.03

Идентификация математической модели неравновесной термохимической кинетики деструкции полимерных теплозащитных материалов

А. В. Моржухина, А. В. Нетелев, И. А. Рудой

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва; e-mail: alena.morzhukhina@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.12.2017

На сегодняшний день разрушающиеся полимерные материалы широко используются в конструкции теплонагруженных элементов в самых разных областях техники. Процесс деструкции в таких материалах носит сложный многостадийный характер, для описания которого одностадийное уравнение Аррениуса уже не вполне подходит, так как протекание химических процессов начинает зависеть от темпа нагрева. Данная статья посвящена разработке алгоритма определения коэффициентов уравнения неравновесной термохимической кинетики методом обратных задач.

Ключевые слова: обратные задачи теплообмена, деструкция материалов, космический аппарат, тепловая защита.

Введение

Термическая деструкция полимерных теплозащитных материалов сопровождается тепловыми эффектами и выделением пиролизного газа. Пиролизный газ образуется в узкой области – в зоне разложения. Границы области разложения определяются температурой, плотностью материала и темпом нагрева. Образовавшийся газ фильтруется в область с наименьшим давлением, участвуя при этом в процессе переноса тепла. Тепловые эффекты от многостадийных параллельных химических реакций имеют как экзотермический, так и эндотермический характер. Традиционно кинетические процессы описываются полуэмпирическим одностадийным уравнением аррениусовского типа:

$$\frac{d\rho}{d\tau} = \begin{cases} K\rho^n, \; T \geq T_н, \\ 0, \quad T < T_н; \end{cases} \; K = -B\exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Принять во внимание сложный характер реакции можно с помощью нелинейных коэффициентов и введения в уравнения новых членов, учитывающих температуру и темп нагрева.

При проектировании элементов конструкции из подверженных разложению материалов важно знать как теплофизические, так и термохимические характеристики самого материала. Существует ряд работ [1, 2], посвященных вопросам определения теплофизических характеристик разлагающихся полимеров. В них приводятся алгоритмы идентификации математических моделей теплопереноса, основанные на решении обратных задач. Но эти алгоритмы предусматривают, что термокинетические характеристики определяются заранее, каким-либо другим методом. Было бы целесообразно из обработки данных одного эксперимента получить не только теплофизические, но и термокинетические коэффициенты математической модели.

Постановка обратной задачи неравновесной термохимической кинетики

Для описания процесса деструкции полимера была выбрана одномерная математическая модель, включающая три зоны с подвижными внутренними границами: зону незатронутого разложением материала; зону разложения, в которой протекают химические реакции и образуется фильтрующийся пиролизный газ; зону коксового остатка, через который возможна фильтрация пиролизного газа. Граница между исходным и разлагающимся материалом определяется температурой начала разложения $T_н$. Границу между разлагающимся материалом и коксовым остатком можно найти, зная значение коксового остатка ρ_c. Для однослойного материала такая математическая модель имеет вид:

$$c\left(T(\tau,x)\right)\rho\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial\tau}=$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}\right)+$$
$$+C_g\left(T(\tau,x)\right)\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho(\xi,\tau)}{\partial\tau}\partial\xi\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}+ \quad (1)$$
$$+H\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau},$$
$$x\in(0,L),\ \tau\in(0,\tau_{\max});$$

$$-\alpha_1\lambda\left(T(0,\tau)\right)\frac{\partial T(0,\tau)}{\partial x}+\beta_1T(0,\tau)=q_1(\tau),\ \tau\in(0,\tau_{\max}); \quad (2)$$

$$-\alpha_2\lambda\left(T(L,\tau)\right)\frac{\partial T(L,\tau)}{\partial x}+\beta_2T(L,\tau)=q_2(\tau),\ \tau\in(0,\tau_{\max}); \quad (3)$$

$$T(0,x)=T_0(x),\ x\in(0,L); \quad (4)$$

$$\rho(0,x)=\rho_0(x),\ x\in(0,L). \quad (5)$$

Деструкция полимера описывалась уравнением Аррениуса с добавочным членом, определяющим зависимость темпа разложения от темпа нагрева:

$$\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}=F(x,\tau), \quad (6)$$

где

$$F(x,\tau)=\begin{cases}0,\ T(x,\tau)<T_r\\ -\left(A+\Theta\dfrac{\partial T}{\partial\tau}\right)\rho^n\exp\left(\dfrac{-E}{RT(x,\tau)}\right),\ \rho(x,\tau)>\rho_c,\ T(x,\tau)\ge T_r\\ 0,\ \rho(x,\tau)\le\rho_c.\end{cases}$$

В этом уравнении коэффициенты A,Θ,n,E являются искомыми характеристиками. На данном этапе работы целесообразно оценить эффективность разрабатываемого алгоритма, приняв коэффициенты аррениусовского уравнения константами. Определение коэффициентов уравнения Аррениуса в данной математической модели является обратной задачей [3]. Особенности решения обратных задач теплопереноса хорошо описаны в литературных источниках и над методами их решения работало большое количество авторов [1, 3, 4]. Среди множества существующих методов решения обратных задач наиболее универсальным, в плане построения вычислительного алгоритма, является метод итерационной регуляризации [4]. Данный метод нашел широкое применение при решении задач диагностики и идентификации тепловых процессов, обратных задач акустики и магнитодинамики [5]. В настоящее время аналитически доказана единственность решения задачи идентификации для одного коэффициента модели [4]. Тем не менее практика использования метода итерационной регуляризации показала, что метод дает хорошие результаты для восстановления даже четырех коэффициентов математической модели [2].

В методе итерационной регуляризации для решения поставленной задачи используется дополнительная информация о температуре в некоторых внутренних точках [3]:

$$T(X_m,\tau)=f_m(\tau),\ m=1,M. \quad (7)$$

Источником такой информации могут служить установленные в материале термодатчики. В соответствии с алгоритмом итерационной регуляризации в этих точках вводятся фиктивные границы тепловых слоев с идеальными условиями теплового контакта:

$$\frac{\partial T(X_m-0,\tau)}{\partial x}=\frac{\partial T(X_m+0,\tau)}{\partial x},\ m=\overline{1,M-1}; \quad (8)$$

$$T(X_m-0,\tau)=T(X_m+0,\tau),\ m=\overline{1,M-1}. \quad (9)$$

С учетом дополнительной информации и введенных допущений математическая модель принимает вид:

$$c\left(T(\tau,x)\right)\rho\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial\tau}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}\right)+C_g\left(T(\tau,x)\right)\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho(\xi,\tau)}{\partial\tau}\partial\xi\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}+H\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}, \quad (10)$$

$$x\in\left(X_{m-1},X_m\right), m=\overline{1,M+1},\quad X_0=0,\quad X_{M+1}=L,\quad \tau\in(0,\tau_{\max}];$$

$$T(0,x)=T_0(x),\ x\in\left(X_{m-1},X_m\right), m=\overline{1,M+1},\ x_0=0,\ x_{M+1}=L; \tag{11}$$

$$\rho(0,x)=\rho_0(x),\ \ x\in\left(X_{m-1},X_m\right), m=\overline{1,M+1},\ x_0=0,\ x_{M+1}=L; \tag{12}$$

$$-\alpha_1\lambda\left(T(0,\tau)\right)\frac{\partial T(0,\tau)}{\partial x}+\beta_1 T(0,\tau)=q_1(\tau), \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{13}$$

$$-\alpha_2\lambda\left(T(L,\tau)\right)\frac{\partial T(L,\tau)}{\partial x}+\beta_2 T(L,\tau)=q_2(\tau), \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{14}$$

$$\frac{\partial T(X_m-0,\tau)}{\partial x}=\frac{\partial T(X_m+0,\tau)}{\partial x}, m=\overline{1,M}, \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{15}$$

$$T(X_m-0,\tau)=T(X_m+0,\tau), m=\overline{1,M}, \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{16}$$

$$\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}=F(x,\tau), \tag{17}$$

где

$$F(x,\tau)=\begin{cases}0, T(x,\tau)<T_r\\ -\left(A+\Theta\dfrac{\partial T}{\partial\tau}\right)\rho^n\exp\left(\dfrac{-E}{RT(x,\tau)}\right), \rho(x,\tau)>\rho_c, T(x,\tau)\geq T_r\\ 0, \rho(x,\tau)\leq\rho_c\end{cases},$$

$$x\in\left(X_{m-1},X_m\right), m=\overline{1,M+1},\ X_0=0,\ X_{M+1}=L;$$

$$\rho(X_m-0,\tau)=\rho(X_m+0,\tau),\ m=\overline{1,M} \tag{18}$$

$$T(X_m,\tau)=f_m(\tau), m=\overline{1,M}, \tau\in(0,\tau_{\max}]. \tag{19}$$

Алгоритм расчета коэффициентов уравнения неравновесной термохимической кинетики

На основе экспериментальных данных строится целевой функционал невязки, характеризующий разницу расчетных и измеренных температур:

$$J(A,\Theta,n,E)=\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_{\max}}\chi_m(\tau)\left[T(d_m,\tau)-f_m(\tau)\right]^2 d\tau. \tag{20}$$

Для устойчивого решения задачи необходимо дополнительно ограничить область поиска решения. В качестве таких ограничений могут использоваться уравнения (10)–(18) [3]. С учетом ограничений, накладываемых уравнениями (10)–(18), функционал (20) запишется в виде:

$$J(A,E,\Theta,n)=\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\left[T(X_m,\tau)-f_m(\tau)\right]^2 d\tau+\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\psi(\tau,x)\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}\right)-\right.$$

$$\left.-c\left(T(\tau,x)\right)\rho\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial\tau}+C_g\left(T(\tau,x)\right)\int_{x_н}^{x}\frac{d\rho(\xi,\tau)}{d\tau}d\xi\frac{\partial T(\tau,x)}{\partial x}+H\left(T(\tau,x)\right)\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}\right]d\tau dx+$$

$$+\sum_{m=1}^{M+1}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\nu(x)\left[T(0,x)-T_0(x)\right]dx+\int_0^{\tau_m}\gamma(\tau,0)\left[-\alpha_1\lambda\left(T(0,\tau)\right)\frac{\partial T(0,\tau)}{\partial x}+\beta_1 T(0,\tau)-q_1(\tau)\right]d\tau+ \qquad (21)$$

$$+\int_0^{\tau_m}\gamma(\tau,L)\left[-\alpha_2\lambda\left(T(L,\tau)\right)\frac{\partial T(L,\tau)}{\partial x}+\beta_2 T(L,\tau)-q_2(\tau)\right]d\tau+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}r(X_m,\tau)\left[\frac{\partial T(X_m-0,\tau)}{\partial x}-\frac{\partial T(X_m+0,\tau)}{\partial x}\right]+$$

$$+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}w(X_m,\tau)\left[T(X_m-0,\tau)-T(X_m+0,\tau)\right]+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}\mu(X_m,\tau)\left[\rho(X_m-0,\tau)-\rho(X_m+0,\tau)\right]d\tau+$$

$$+\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\Phi(\tau,x)\left[\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}-F(x,\tau)\right]d\tau dx.$$

После сообщения искомым характеристикам A,Θ,n,E приращений $\Delta A,\Delta\Theta,\Delta n,\Delta E$ температура и плотность получают вариации ΔT и $\Delta\rho$. Тогда приращение функционала невязки будет определяться выражением:

$$\Delta J = I_0 + I_1 + I_2 + I_3\,; \qquad (22)$$

где

$$I_0=\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}\chi(\tau)\left[T(X_m,\tau)-f(\tau)\right]\Delta T(X_m,\tau)d\tau;$$

$$I_1=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\psi(x,\tau)\left[-\rho c\frac{\partial\Delta T}{\partial\tau}-\rho\frac{\partial c}{\partial T}\Delta T\frac{\partial T}{\partial\tau}-\Delta\rho c\frac{\partial T}{\partial\tau}+\right.$$

$$+\frac{\partial^2\lambda}{\partial T^2}\frac{\partial T}{\partial x}\Delta T\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{\partial\lambda}{\partial T}\frac{\partial\Delta T}{\partial x}\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{\partial\lambda}{\partial T}\Delta T\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial\Delta T}{\partial x}\right)+$$

$$\left.+C_g\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho}{\partial\tau}d\xi\frac{\partial\Delta T}{\partial x}+C_g\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}d\xi\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{\partial C_g}{\partial T}\Delta T\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho}{\partial\tau}d\xi\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{\partial H}{\partial T}\Delta T\frac{\partial\rho}{\partial\tau}+H\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}\right]dxd\tau+$$

$$+\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\Phi(x,\tau)\left[\frac{\partial F}{\partial\rho}\Delta\rho+\frac{\partial F}{\partial T}\Delta T-\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}\right]dxd\tau;$$

$$I_2=\sum_{m=1}^{M+1}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\nu(x,\tau)\Delta T dx+\int_0^{\tau_m}\gamma(0,\tau)\left\{\alpha_1\lambda\left(T(0,\tau)\right)\frac{\partial\Delta T_1(0,\tau)}{\partial x}+\left[\beta_1+\alpha_1\frac{\partial\lambda\left(T(0,\tau)\right)}{\partial x}\frac{\partial T(0,\tau)}{\partial x}\right]\Delta T(0,\tau)\right\}d\tau+$$

$$+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}r_m(X_m,\tau)\left[\frac{\partial\Delta T(X_m-0,\tau)}{dx}-\frac{\partial\Delta T(X_m+0,\tau)}{dx}\right]d\tau+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}w_m(X_m,\tau)\left[\Delta T(X_m-0,\tau)-\Delta T(X_m+0,\tau)\right]d\tau+$$

$$+\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_m}\mu(X_m,\tau)\left[\Delta\rho(X_m-0,\tau)-\Delta\rho(X_m+0,\tau)\right]d\tau+$$

$$+\int_0^{\tau_m}\gamma(L,\tau)\left\{\alpha_2\lambda\left(T(L,\tau)\right)\frac{\partial\Delta T(L,\tau)}{\partial x}+\left[\beta_2+\alpha_2\frac{\partial\lambda\left(T(L,\tau)\right)}{\partial x}\frac{\partial T(L,\tau)}{\partial x}\right]\Delta T(L,\tau)\right\}d\tau;$$

$$I_3=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\left\{\frac{\partial F}{\partial E}\Delta E+\frac{\partial F}{\partial A}\Delta A+\frac{\partial F}{\partial n}\Delta n+\frac{\partial F}{\partial\Theta}\Delta\Theta\right\}\Phi(x,\tau)dxd\tau.$$

Минимизация функционала (20) осуществлялась градиентными методами (методом сопряженных градиентов, методом скорейшего спуска):

$$A^{s+1}=A^{s}-\gamma_s G\left(J_A^{'(s)}\right),\ \ s=0,\ 1,\ ...,\ s^*; \tag{23}$$

$$\Theta^{s+1}=\Theta^{s}-\gamma_s G\left(J_\Theta^{'(s)}\right),\ \ s=0,\ 1,\ ...,\ s^*; \tag{24}$$

$$n^{s+1}=n^{s}-\gamma_s G\left(J_n^{'(s)}\right),\ \ s=0,\ 1,\ ...,\ s^*; \tag{25}$$

$$E^{s+1}=E^{s}-\gamma_s G\left(J_E^{'(s)}\right),\ \ s=0,\ 1,\ ...,\ s^*. \tag{26}$$

Первостепенной задачей в этом случае является расчет градиента функционала невязки $J'(A,\Theta,n,E)$ [6]. Так как на данном этапе разработки алгоритма искомые характеристики считались константами, то нет необходимости их параметризовать. Градиент функционала находится для каждой из определяемых характеристик из линейной части приращения градиента функционала (19):

$$J_A^{'}=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\frac{\partial F}{\partial A}\Phi(x,\tau)\,dxd\tau; \tag{27}$$

$$J_\Theta^{'}=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\frac{\partial F}{\partial \Theta}\Phi(x,\tau)\,dxd\tau; \tag{28}$$

$$J_E^{'}=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\frac{\partial F}{\partial E}\Phi(x,\tau)\,dxd\tau; \tag{29}$$

$$J_n^{'}=\sum_{m=1}^{M+1}\int_0^{\tau_m}\int_{X_{m-1}}^{X_m}\frac{\partial F}{\partial n}\Phi(x,\tau)\,dxd\tau. \tag{30}$$

При этом сопряженный множитель Лагранжа $\Phi(x,\tau)$ находится из решения сопряженной задачи:

$$\frac{\partial\psi(x,\tau)}{\partial\tau}\rho(x,\tau)c(T)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda(T)\frac{\partial\psi(x,\tau)}{\partial x}\right)-\left(\frac{d\lambda(T)}{dT}\frac{\partial T(x,\tau)}{\partial x}+C_g(T)\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho(\xi,\tau)}{\partial\tau}d\xi\right)\frac{\partial\psi(x,\tau)}{\partial x}+$$
$$+\left(\frac{\partial H(T)}{\partial T}\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}+\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}c(T)-C_g(T)\frac{\partial\rho(x,\tau)}{\partial\tau}\right)\psi(x,\tau)+\Phi(x,\tau)\frac{\partial F}{\partial T}=0, \tag{31}$$

$$x\in(X_{m-1},X_m),\ m=\overline{1,M+1},\ \ X_0=0,\ \ X_{M+1}=L,\ \tau\in(0,\tau_{\max}];$$

$$\psi(x,\tau_{\max})=0,,\ \ x\in(X_{m-1},X_m),m=\overline{1,M+1},\ X_0=0,\ X_{M+1}=L,; \tag{32}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}\lambda(T(0,\tau))-\psi C_g(T(0,\tau))\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho(T(\xi,\tau))}{\partial\tau}d\xi+\frac{\psi}{\alpha_1}\beta_1=0\,,\tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{33}$$

$$\lambda(T(X_m,\tau))\left[\frac{\partial\psi(X_m+0,\tau)}{\partial x}-\frac{\partial\psi(X_m-0,\tau)}{\partial x}\right]=\left[T(X_m,\tau)-f_m(\tau)\right], \tag{34}$$

$$m=\overline{1,M}\,,\tau\in(0,\tau_{\max}];$$

$$\psi(X_m-0,\tau)=\psi(X_m+0,\tau),\ \ m=\overline{1,M}\,,\tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{35}$$

$$-\frac{\partial\Phi(x,\tau)}{\partial\tau}=\Phi(x,\tau)\frac{\partial F}{\partial\rho}-H(T)\frac{\partial\psi(x,\tau)}{\partial\tau}-\left(c(T)\frac{\partial T(x,\tau)}{\partial\tau}+\frac{\partial H(T)}{\partial T}\frac{\partial T(x,\tau)}{\partial\tau}\right)\psi(x,\tau)-$$

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\int_{x_н}^{x}C_g(T)\frac{\partial T(\xi,\tau)}{\partial\xi}\psi(\xi,\tau)d\xi\right), \tag{36}$$

$$x\in(X_{m-1},X_m),\ m=\overline{1,M+1},\ X_0=0,\ X_{M+1}=L,\ \tau\in(0,\tau_{\max}];$$

$$\Phi(x,\tau_н)=0, \tag{37}$$

$$\frac{\partial\psi(L,\tau)}{\partial x}\lambda\big(T(L,\tau)\big)-\psi(L,\tau)C_g\big(T(L,\tau)\big)\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho\big(T(L,\tau)\big)}{\partial\tau}d\xi+\frac{\psi(L,\tau)}{\alpha_2}\beta_2=0,\ \tau\in(0,\tau_{\max}]. \tag{38}$$

Для вычисления глубины спуска используется формула:

$$\gamma_{s,k}=\frac{-\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_{\max}}\big[T(X_m,\tau)-f_m(\tau)\big]\Delta T_k\Big(X_m,\tau,G\big(J'^{(s)}\big)\Big)d\tau}{\sum_{m=1}^{M}\int_0^{\tau_{\max}}\Big[\Delta T_k\Big(X_m,\tau,G\big(J'^{(s)}\big)\Big)\Big]^2d\tau}, \tag{39}$$

где приращение температуры $\Delta T_k\Big(X_m,\tau,G\big(J'^{(s)}\big)\Big)$ определяется из решения задачи приращения температуры для каждой из четырех (k=1, 4) определяемых характеристик:

$$\rho c\frac{\partial\Delta T_k}{\partial\tau}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial\Delta T_k}{\partial x}\right)+\left(\frac{d\lambda}{dT}\frac{\partial T}{\partial x}+c_g\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho}{\partial\tau}d\xi\right)\frac{\partial\Delta T_k}{\partial x}+\left(\frac{d^2\lambda}{dT^2}\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2+\frac{d\lambda}{dT}\frac{\partial^2T}{\partial x^2}+\frac{dH}{dT}\frac{\partial\rho}{\partial\tau}+\right.$$

$$\left.+\frac{dc_g}{dT}\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\rho_m}{\partial\tau}d\xi\frac{\partial T_m}{\partial x}-\rho\frac{dc}{dT}\frac{\partial T}{\partial\tau}\right)\Delta T_k+c_g\int_{x_н}^{x}\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}d\xi\frac{\partial T}{\partial x}+H\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}-\Delta\rho c\frac{\partial T}{\partial\tau}, \tag{40}$$

$$x\in(X_{m-1},X_m),\ m=\overline{1,M+1},\ X_0=0,\ X_{M+1}=L,\ \tau\in(0,\tau_{\max}];$$

$$\Delta T_k(0,x)=0,\ x\in(X_{m-1},X_m),\ m=\overline{1,M+1},\ X_0=0,\ X_{M+1}=L; \tag{41}$$

$$-\alpha_1\left(\lambda\frac{\partial\Delta T_k(0,\tau)}{\partial x}+\frac{\partial T(0,\tau)}{\partial x}\frac{d\lambda}{\partial T}\Delta T_k(0,\tau)\right)+\beta_1\Delta T_k(0,\tau)=0,\ \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{42}$$

$$\frac{\partial\Delta T_k(X_m,\tau)}{\partial x}=\frac{\partial\Delta T_k(X_m+0,\tau)}{\partial x},\ m=\overline{1,M},\ \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{43}$$

$$\Delta T_k(X_m,\tau)=\Delta T_k(X_m+0,\tau),\ m=\overline{1,M},\ \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{44}$$

$$\Delta\rho(X_m,\tau)=\Delta\rho(X_m+0,\tau),\ m=\overline{1,M},\ \tau\in(0,\tau_{\max}]; \tag{45}$$

$$\frac{\partial\Delta\rho}{\partial\tau}=\begin{cases}0, T\le T_r\\ \left[\frac{\partial F}{\partial\rho}\Delta\rho+\frac{\partial F}{\partial T}\Delta T+R_k\right], \rho>\rho_c, T>T_r;\\ 0, \rho\le\rho_c\end{cases} \tag{46}$$

$$R_1=\frac{\partial F}{\partial A}G(J'_A),\ R_2=\frac{\partial F}{\partial\Theta}G(J'_\Theta),\ R_3=\frac{\partial F}{\partial n}G(J'_n),\ R_4=\frac{\partial F}{\partial E}G(J'_E),$$

$$x \in \left(X_{m-1}, X_m\right),\ m = \overline{1, M+1},\ \ X_0 = 0,\ \ X_{M+1} = L,\ \ \tau \in (0, \tau_{\max}];$$

$$-\alpha_2\left(\lambda\frac{\partial \Delta T_k(L,\tau)}{\partial x} + \frac{\partial T(L,\tau)}{\partial x}\frac{\partial \lambda}{\partial T}\Delta T_k(L,\tau)\right) + \beta_2 \Delta T(L,\tau) = 0\,, \tau \in (0, \tau_{\max}]\,. \qquad (47)$$

Задача (40)–(47) решается для каждой из определяемых характеристик $k = 1, 4$.

Заключение

Разработанный алгоритм позволяет определить постоянные коэффициенты математической модели неравновесной термохимической кинетики деструкции полимерного материала. В дальнейшем, после апробации разработанного алгоритма, планируется доработать алгоритм определения коэффициентов математической модели, зависящих от температуры. В качестве первого шага по апробации планируется провести эксперимент на модельных данных. Следующий этап апробации должен будет включать в себя проведение эксперимент на базе тепловой лаборатории НИО-601 (МАИ).

Список обозначений

A, Θ, n, E – определяемые коэффициенты уравнения Аррениуса;

$a_1,\ b_1,\ q_1(\tau)$ – коэффициенты, характеризующие тип граничного условия на внешней (нагреваемой) поверхности;

$a_2,\ b_2,\ q_2(\tau)$ – коэффициенты, характеризующие тип граничного условия на внутренней поверхности;

$c(T)$ – теплоемкость, Дж/м^3·К;

$C_g(T)$ – теплоемкость пиролизного газа, Дж/кг·К;

$f_m(\tau)$ – измеренные значения температуры в точке с координатой X_m, К;

G – оператор, определяющий выбранный метод оптимизации;

$J(A, \Theta, n, E)$ – целевой функционал невязки;

$H(T)$ – тепловой эффект химической реакции, Дж/кг;

$k = 1{,}4$ – порядковый номер определяемой характеристики;

L – толщина материала, м;

$m = 1, M$ – номер термодатчика;

R – газовая постоянная в уравнении Арениуса;

s – номер итерации;

s^* – номер последней итерации;

$T_н$ – температура начала деструкции, К;

$T(x,\tau)$ – температура, К;

$T_0(x)$ – распределение температур в начальный момент времени по толщине образца, К;

$T(X_m,\tau)$ – расчетные значения температуры в точке с координатой X_m, К;

x – координата, м;

$x_н$ – координата границы зоны начала деструкции, м;

X_m – координата установки m-го датчика, м;

γ_s – глубина спуска на s-й итерации;

$\lambda(T)$ – теплоемкость, Вт/м^2;

ρ_c – плотность кокосового остатка, кг/м^3;

$\rho_0(x)$ – зависимость плотности образца от координаты в начальный момент времени, кг/м^3;

τ – время, с;

$\tau_н$ – время начала деструкции в точке, с;

$\tau_{\max}$ – продолжительность прогрева, с;

$\chi(\tau)$, $\psi(x,\tau)$, $\Phi(x,\tau)$, $\gamma(0,\tau)$, $\gamma(L,\tau)$, $r(X_m,\tau)$, $w(X_m,\tau)$, $\eta(X_m,\tau)$, $\nu(x)$ – неопределенные множители Лагранжа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Мишин В. П., Алифанов О. М.** Обратные задачи теплообмена – области применения при проектировании и испытаниях технических объектов // ИФЖ. 1982. Т. 42. № 2. С. 181–192.
2. **Alifanov O. M., Budnik S. A., Nenarokomov A. V., Netelev A. V., Titov D. M.** Destructive materials thermal properties determination with application for spacecraft structures testing // Proc. of 61st International Astronautical Congress. 2010. P. 8541–8548.
3. **Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.** Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986. 288 с.
4. **Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В.** Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена. М.: Наука, 1988. 288 с.
5. **Алифанов О. М., Румянцев С. В.** О выводе формул для градиента невязки при итерационном решении обратных задач теплопроводности. II. Определение градиента через сопряженную переменную // ИФЖ. 1987. Т. 52. № 4. С. 668–675.
6. **Алифанов О. М., Ненарокомов А. В., Ненарокомов К. А., Финченко В. С., Титов Д. М.** Неразрушающая дефектоскопия материалов гибкой тепловой защиты методами нелинейной акустики // Тепловые процессы в технике. 2016. Т. 8. № 8. С. 368–377.

Identification of functionally graded materials thermophysical properties by means of inverse problems method

A. V. Morzhukhina, A. V. Netelev, I. A. Rudoy

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow
e-mail: alena.morzhukhina@yandex.ru

Up to date, breaking-up polymeric materials are widely applied in the structures of heat-loaded elements in various fields of technology. These materials are indispensable while creating frontal braking screens of the devices entering the atmosphere with a second cosmic velocity such as "Hayabusa" and "Stardust". The phenol-carbon composite was employed on these devices as a thermal protection material. The destructive process of in these materials is of a complex multi-stage nature. Chemical reactions between the decomposing material components and components of the incoming stream may progress in parallel with heat release and absorption. In engineering practice, when designing destructive thermal protection, applications of these models, with parallel multi-stage processes, can significantly complicate the process of optimal technical solution selection. In such situations, the one-stage Arrhenius equation does not exactly fit to describe the process of destruction. The mathematical model accuracy increasing is possible by introducing into its composition a component that accounts for the heating rate. This article is devoted to the development of an algorithm for computing the coefficients of the non-equilibrium thermo-chemical kinetics equation by the inverse problem method. The developed algorithm is based on solving the coefficient inverse problem by the iterative regularization method. The iterative regularization method application is stipulated by its good convergence and universality, which were confirmed in practice while solving similar problems. The universality of the iterative regularization method algorithm is stipulated by the similarity of the computing apparatus of the steps involved in it. The iterative regularization method is based on the procedure for minimizing the target residual functional of the experimentally measured and calculated temperature values at the temperature sensors installation points. As additional conditions restricting the search for solutions, the conditions for the heat transfer problem in the material and on its surface are introduced into the functional. Correspondingly, the non-equilibrium thermochemical kinetics equations are also included into minimized functional. Minimization of the functional is performed by first-order gradient methods. The key step in gradient methods of minimization is the calculation of the gradient of the target functional. To do this, a solution to the conjugated heat transfer problem is made at the each iteration. The next step in minimizing the functional consists in calculating the descent depth. It is necessary to determine the temperature increment to calculate the descent depth for each of the unknown characteristics. After calculating the new values of the coefficients, it is necessary to solve the direct heat-transfer problem by substituting the newly obtained characteristics as the initial data. The conjugate problem, the problem of temperature increment and the direct problem of heat transfer are formally identical from a mathematical point of view. This circumstance significantly simplifies computational procedures of this algorithm program implementation.

Keywords: inverse heat transfer problems, materials destruction, spacecraft, thermal protection.

REFERENCES

1. **Mishin V. P., Alifanov O. M.** Inverse heat-transfer problems, domains of application in design and testing of technical objects. *Journal of Engineering Physics,* 1982, vol. 42, no. 2, pp.181–192.
2. **Alifanov O. M., Budnik S. A., Nenarokomov A. V., Netelev A. V., Titov D. M.** Destructive materials thermal properties determination with application for spacecraft structures testing. *In Proc. of 61st International Astronautical Congress*, 2010, pp. 8541–8548.
3. **Tikhonov A.N, Arsenin V.Ya.** *Metody resheniya nekorrektnykh zadach* [Methods for solving ill-posed problems]. Moscow, Nauka, 1986, 288 p. In Russ.
4. **Alifanov O. M., Artyukhin E.A, Rumyantsev S.V.** *Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach i ikh prilozheniya k obratnym zadacham teploobmena* [Extreme methods for solving ill-posed problems and their applications to inverse heat transfer problems]. Moscow, Nauka, 1988, 288 p. In Russ.
5. **Alifanov O. M., Rumyantsev S. V.** Formulas for the discrepancy gradient in the iterative solution of inverse heat-conduction problems. Ii. Determining the gradient in terms of a conjugate variable. *Journal of Engineering Physics*, 1987, vol. 52, no. 4, pp.489–495.
6. **Alifanv O. M., Nenarokomov A. V., Nenarokomov K. A., Finchenko V. S., Titov D. M.** Nerazrushayucshaya defektoskopiya materialov gibkoy teplovoy zaschiti metodami nelineinoy akustiki [Non-destructive flaw detection of materials of elastic thermal protection by methods of nonlinear acoustics]. *Teplovye protsessy v tekhnike – Thermal processes in engineering,* 2016, vol. 8, no. 8, pp. 368–377.