

УДК 678.01:303.724.32.032.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ ПОТЕРИ МАССЫ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА В ВАКУУМЕ

Власова А.М.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, e-mail: allavlasova93@mail.ru

В данной статье проведен численный анализ экспериментальных данных о потере массы штатного терморегулирующего покрытия космических аппаратов при вакуумно-тепловом воздействии. Экспериментальные данные были получены при помощи системы состоящей из четырёх кварцевых микровесов, термостатированных при различных температурах. Анализ этих результатов и масс-спектров исследуемого материала позволил разделить совокупность молекул выделяющихся из него в вакууме на четыре группы, в соответствии с их массами. В работе предлагается алгоритм, при помощи которого проведена оценка значений эффективных коэффициентов диффузии и десорбции математической модели описывающей процесс потери массы полимерного композита при вакуумно-тепловом воздействии. Также в статье показаны результаты расчётов, проведенных с использованием полученных значений эффективных коэффициентов диффузии и десорбции, которые удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: коэффициент диффузии, коэффициент десорбции, полимерный композиционный материал, потеря массы

MODELING OF THERMO-STIMULATED MASS LOSS OF POLYMERIC COMPOSITE IN VACUUM.

Vlasova A.M.

Bauman Technical University, Moscow, e-mail: allavlasova93@mail.ru

Numerical analysis of experimental data of mass loss in the thermal control coating of spacecraft's under vacuum-heat impact using the system of 4 thermostated at different temperatures quartz micro weights was conducted. As a result, a set of molecules exuded from the investigated material was divided into 4 groups with respect to the particles' masses. Algorithm to estimate values of effective coefficients of diffusion and desorption of mathematical model describing the process of mass loss was suggested. The article shows the results of calculations performed using the obtained values of the effective diffusion coefficient and desorption, which are in satisfactory agreement with the experimental data.

Keywords: diffusion coefficient, desorption coefficient, polymeric composite material, mass loss

Современные космические аппараты (КА) оснащены большим количеством высокочувствительной аппаратуры, нормальное функционирование которой может быть нарушено вследствие неучтенного воздействия собственной внешней атмосферы (СВА). СВА – это газовое облако, образующейся в окрестности КА за счет потери массы материалов поверхности, газовой выделений негерметичных отсеков, работы электродвигателей и т.д. [1, 2]. Осаждение частиц СВА на чувствительных к загрязнениям поверхностях приводит к множеству негативных последствий, например, таких как снижение светопропускания и появление ложных срабатываний оптических приборов [3- 5]. Острота этой проблемы обусловлена широким применением полимерных композиционных материалов (ПКМ), в качестве терморегулирующих покрытий КА, которые являются основными источниками летучих веществ (ЛВ), создающими предпосылки для увеличения плотности СВА и присутствия в ее составе высокомолекулярных легкоконденсирующихся соединений.

В связи с тенденцией к увеличению сроков активного существования изделий

космической техники, предъявляются повышенные требования к надежности прогнозирования уровней загрязнения функциональных поверхностей КА в условиях эксплуатации. Применение содержательных физико-математических моделей для описания источников летучих веществ в задачах расчета СВА КА ограничивается сложностью определения коэффициентов дифференциальных уравнений моделей из экспериментальных результатов. Поэтому разработка алгоритмов для их оценки является актуальной задачей.

Методика и результаты эксперимента

В качестве модельного материала для экспериментального исследования был выбран ЭКОМ-1 – штатное терморегулирующее покрытие КА. Из этого материала, нанесенного толщиной 100 мкм на подложку из Амг-6, были изготовлены образцы, которые взвешивали до и после тепло-вакуумного воздействия при давлении 10^{-4} Па. Для исследования динамики потери массы материалов использовались кварцевые микровесы – измерительное устройство, предназначенное для преобразования измене-

ния массы, присоединенной к поверхности кварцевого пьезорезонатора, в приращение выходной частоты автогенератора.

Масс-спектры зарегистрированные в диапазоне величин m/z от 25 до 700 на приборе MAT-900 фирмы Термо-Финниган методом прямого ввода образца ЭКОМ-1 при температуре 120°C в ионный источник показали, что тепло-вакуумное воздействие на материала приводит к выходу ЛВ,

имеющих сложный молекулярный состав (рис. 1).

Поэтому для получения подробной информации о зависимости потери массы образцов использовалась система из четырёх кварцевых микровесов – датчиков потери массы (ДПМ), термостатированных при разных температурах (293, 233, 203, 78K) [6]. Схема расположения датчиков в вакуумной камере изображена на рис. 2.

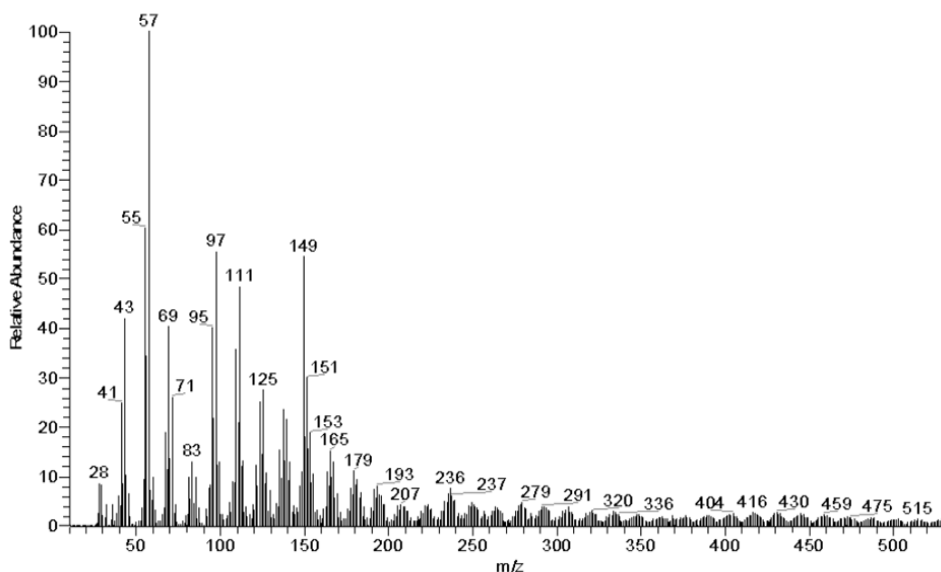


Рис. 1. Масс-спектр образца ЭКОМ-1 при температуре 120°C

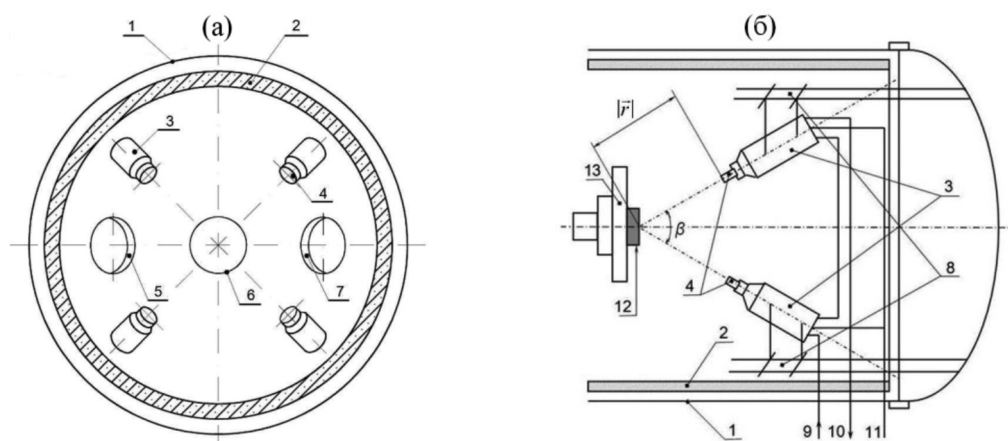


Рис. 2. Схема расположения ДПМ в вакуумной камере. 1 – внешняя стенка вакуумной камеры; 2 – цилиндрическая полость, заполняемая жидким азотом; 3 – термостаты; 4 – датчики потери массы; 5 (7) – входное окно ускорителя электронов (протонов); 6 – входное окно имитатора концентрированного солнечного излучения; 8 – система позиционирования термостатов с датчиками ПМ; 9, 10 – ввод и вывод теплоносителя; 11 – кабель питания и измерений; 12 – образец материала; 13 – изотермическая ячейка

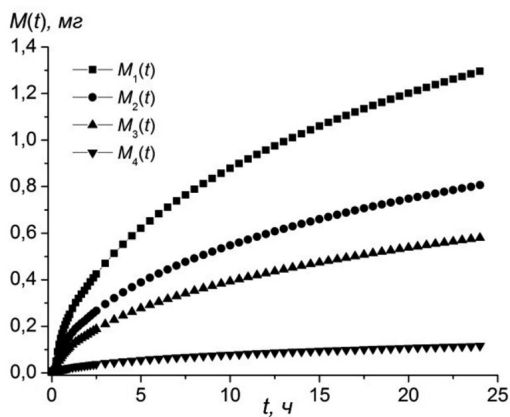


Рис. 3. Зависимости потери массы образца ЭКОМ-1 за счет разных групп молекул осевших на ДПМ, термостатированных при разных температурах: $M_1(t) - 293 \text{ }^\circ\text{K}$; $M_2(t) - 233 \text{ }^\circ\text{K}$; $M_3(t) - 203 \text{ }^\circ\text{K}$; $M_4(t) - 78 \text{ }^\circ\text{K}$

Каждый ДПМ с чувствительностью $(4.7 \pm 0.1) \times 10^{-9} \text{ г/(\text{Гц} \cdot \text{см}^2)}$, состоит из двух 10-МГц кварцевых резонаторов АТ-среза марки РК 171, включенных в цепь отдельных генераторов. Один из кварцевых резонаторов служит опорным, он изолирован от попадания ЛВ, а второй рабочий, его поверхность открыта. Наличие в системе четырёх датчиков, термостатированных при разных значениях температуры, позволяет в каждом эксперименте разделить ЛВ, выделяющиеся из материала, условно на четыре группы:

- «тяжёлые легко конденсирующиеся» осаждаются на чувствительных элементах всех датчиков № 1 ÷ № 4 (при $87 \leq T \leq 293 \text{ K}$);
- «тяжёлые» осаждаются на датчиках № 1, № 2 и № 3 (при $87 \leq T \leq 233 \text{ K}$);
- «средние» осаждаются на датчиках № 1 и № 2 (при $87 \leq T \leq 203 \text{ K}$);
- «лёгкие» осаждаются только на датчике № 1 (при $T = 87 \text{ K}$);

При этом массы «лёгких», «средних» и «тяжёлых» ЛВ определяются из выражений:

$$C(x, t) = 2C_0 \cdot \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin(\mu_i) \exp\left(-\frac{D\mu_i^2 t}{l^2}\right) \cos\left(\frac{\mu_i x}{l}\right)}{\mu_i + \sin(\mu_i) \cos(\mu_i)}, \quad (5)$$

где μ_i – корни следующего трансцендентного уравнения $\frac{D\mu_i}{kl} = ctg(\mu_i)$.

В рамках принятой модели (1)-(4) зависимость массы образца от времени имеет вид:

$$M(t) = m_{mol} \cdot k \cdot S \int_0^l C(l, t) dt = 2C_0 l \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\sin^2 \mu_i (1 - \exp\left(-\frac{D\mu_i^2 t}{l^2}\right))}{(\mu_i + \sin \mu_i \cos \mu_i) \mu_i}, \quad (6)$$

где m_{mol} – масса молекул, S – площадь поверхности образца, $C_0 l = kSC_0 m_{mol}$.

$M_1(t) - M_2(t)$; $M_2(t) - M_3(t)$; $M_3(t) - M_4(t)$, соответственно, где $M_i(t)$ – масса ЛВ, накопленных на i -ом датчике; $M_4(t)$ – масса «тяжёлых легко конденсирующихся» ЛВ.

В качестве примера на рис. 3 представлены экспериментальные результаты, полученные при помощи описанной выше системы из четырех ДПМ.

Математическая модель потери массы ПКМ в вакууме и алгоритм оценки ее параметров.

Изменение концентрации ЛВ в материале при вакуумно-тепловом воздействии обусловлено диффузией и десорбцией ЛВ с поверхности материал-вакуум. Толщина образцов материала 10^3 раза меньше остальных линейных размеров, следовательно, можно пренебречь краевыми эффектами и рассматривать одномерную задачу: при этом потеря массы происходит только через свободную поверхность материал-вакуум. В рамках сделанных предположений решение задачи о потере массы ПКМ сводится к решению следующей краевой задачи [7]:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, t > 0 \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x=0} = 0, \quad (2)$$

$$-D \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x=l} = kC \quad (3)$$

$$C(x, 0) = C_0 = \text{const}, \quad (4)$$

где D – эффективный коэффициент диффузии, $\text{мкм}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; k – эффективный коэффициент десорбции, $\text{мкм} \cdot \text{с}^{-1}$; l – толщина образца материала, мкм ; C_0 – распределение концентрации ЛВ в материале в начальный момент времени, $\text{молекул} \cdot \text{мкм}^{-3}$.

Решением системы (1)-(4) является пространственно-временное распределение ЛВ в образце модельного материала:

Из формулы (6) видно, что решением задачи (1)-(4) является бесконечный ряд. Так как нас интересует закономерность процесса потери массы на достаточно длительном интервале времени, то для его приемлемого описания достаточно ограничиться несколькими первыми членами ряда. При исследовании ряда (6) выявлено, что добавление к сумме первых четырех-пяти слагаемых, последующих членов ряда, не приводит к значительному повышению точности.

В данной работе для построения модели мы использовали пять слагаемых ряда в формуле (7), что достаточно для удовлетворительной оценки.

$$M(t) = 2C_0' l \sum_{i=0}^5 \frac{\sin^2 \mu_i (1 - \exp(-\frac{D\mu_i^2 t}{l}))}{(\mu_i + \sin \mu_i \cos \mu_i) \mu_i}. \quad (7)$$

Задача, поставленная в данной работе, заключается в нахождении таких значений параметров D и k , при которых функция $M(t)$ наилучшим образом приближает значения, полученные в ходе эксперимента. Ориентируясь на метод наименьших квадратов (МНК), мерой близости функции (7) к экспериментальным данным будем считать сумму квадратов отклонений:

$$F(D, k) = \sum_{j=1}^N \left(Y_j - 2C_0' l \sum_{i=0}^4 \frac{\sin^2 \mu_i (1 - \exp(-\frac{D\mu_i^2 t_j}{l}))}{(\mu_i + \sin \mu_i \cos \mu_i) \mu_i} \right)^2 \quad (8)$$

где Y_j – экспериментальные данные о потере массы образца ПМК в вакууме на j -й момент времени, а $M(t_j)$ – значение функции, определяемой (7) при $t = t_j$.

Оценка значений эффективных коэффициентов диффузии и десорбции путем минимизации $F(D, k)$ по параметрам D и k связана с рядом проблем, обусловленных видом целевой функции (8), которые делают процесс минимизации весьма затруднительным:

1) Параметр решения задачи (1)-(4) μ_i связан с параметрами модели D и k трансцендентным уравнением, что осложняет аналитическое вычисление производных целевой функции.

2) Наличие большого количества локальных экстремумов, в широкой окрестности которых градиент целевой функции (8) очень мал, приводит к ложному определению минимума и это обстоятельство усложняет применение для решения поставленной задачи многих традиционных методов.

Поэтому в данной работе для решения задачи минимизации целевой функции был применен алгоритм искусственной пчелиной колонии [8, 9]. В данном подходе каждое решение представляется в виде объекта (пчелы), который инициализируется своими «координатами» (некоторыми значениями искомых коэффициентов D и k) и имеет значение равное величине целевой функции рассчитанной при соответствующих параметрах.

Алгоритм искусственной пчелиной колонии можно описать следующим образом:

1. Инициализация N объектов случайными координатами из заданной области. То есть пчелы-разведчики отправляются в точки со случайными параметрами функции.

2. Вычисление значений объектов (значений целевой функции). Наименьшая полученная величина целевой функции запоминается как промежуточное решение.

3. Проверяется условие останова для промежуточного решения. В рассматриваемом случае условием останова будет достаточно малая величина невязки, т.е. функции (8). Если условие останова было достигнуто, то промежуточное решение является искомым.

4. В зависимости от значения целевой функции выделяются два вида перспективных участков на поверхности функции, вблизи которых возможно располагается глобальный экстремум. А именно:

- Выбирается n ($n < N$) лучших участков, где значения целевой функции меньше всех;

- Выбирается m ($m < n$) так называемых выбранных участков, где значения целевой функции хуже, чем на лучших участках, но эти участки все равно являются неплохими с точки зрения значения целевой функции.

5. Инициализация объектов случайными координатами в окрестности выбранных участков (лучшие участки рассматриваются более подробно), а также $p = N - m - n$ оставшихся объектов определяются случайными координатами из всей рассматриваемой области.

6. Возвращаемся к пункту 2.

Группа молекул	Температура	$D, \text{cm}^2/\text{c}$	$k, \text{cm}/\text{c}$
Легкие	87°K	$2.9 \cdot 10^{-8}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$
Средние	$87^\circ\text{K} < T \leq 203^\circ\text{K}$	$1.25 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-5}$
Тяжелые	$203^\circ\text{K} < T \leq 233^\circ\text{K}$	$3.7 \cdot 10^{-8}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$
Тяжёлые легко конденсирующиеся	$293^\circ\text{K} \leq T$	$9.02 \cdot 10^{-9}$	$1.6 \cdot 10^{-4}$

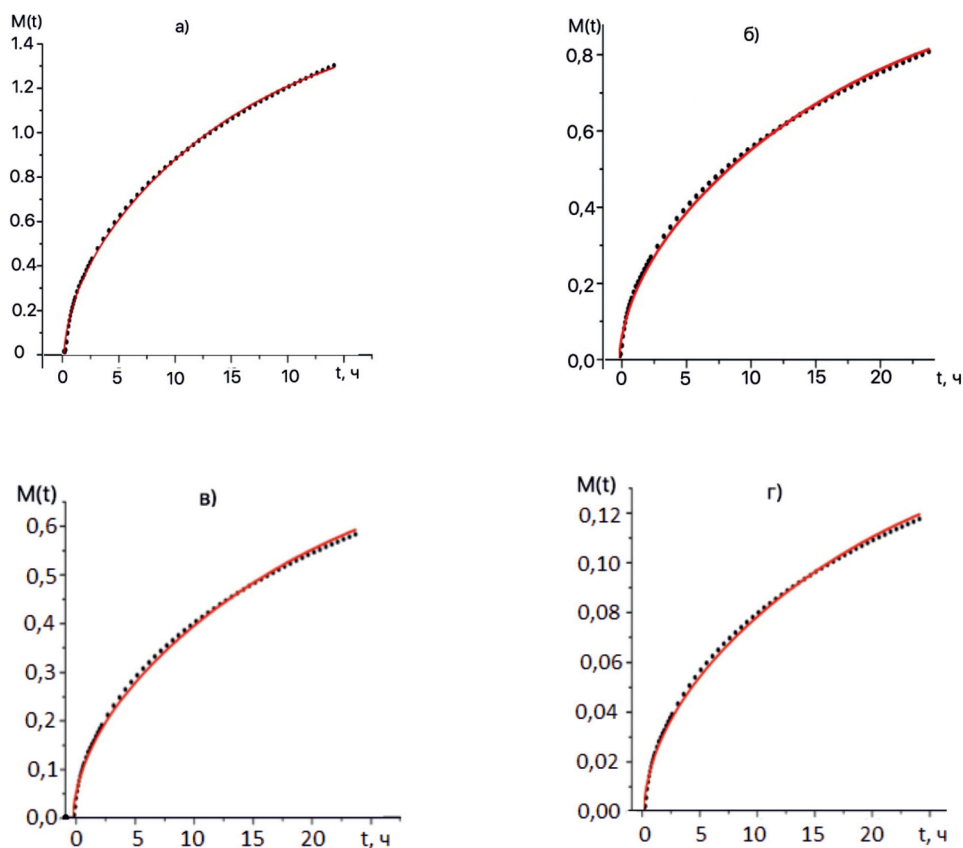


Рис. 4. Экспериментальные и теоретические зависимости потери массы образца от времени: а) легкие молекулы; б) средние молекулы; в) тяжелые молекулы; г) легко конденсирующиеся молекулы; ●●● – экспериментальные данные; — – результаты аппроксимации

Несмотря на то, что рассмотренный алгоритм требует большого количества итераций, во многих случаях он обладает рядом несомненных преимуществ при решении задачи поиска глобального экстремума. А именно:

- 1) В отличие от градиентных методов, он не требует вычисления производных.
- 2) Подходит для сложных целевых функций с наличием большого количества локальных экстремумов.

В результате обработки экспериментальных данных с использованием выбранной модели для каждой группы молекул получены оценки эффективных коэффициентов диффузии и десорбции, которые

представленные в таблице, а также построены графики аппроксимирующие экспериментальные данные (рис. 4).

На рис. 4 демонстрируется сравнение результатов расчетов, проведенных с использованием полученных значений параметров математической модели потери массы, с экспериментальными данными.

Выводы

При расчетно-экспериментальных исследованиях термостимулированной потери массы полимерного композита в вакууме получены следующие результаты:

1. Проведен численный анализ экспериментальных данных о потере массы

терморегулирующего покрытия космических аппаратов при вакуумно-тепловом воздействии, полученных с использованием системы состоящей из четырёх кварцевых микровесов, термостатированных при различных температурах. Анализ этих результатов и масс-спектров исследуемого материала позволил разделить совокупность молекул выделяющихся из него в вакууме на четыре группы, в соответствии с их массами. Коэффициенты уравнений модели, описывающей изучаемый процесс, напрямую зависят от эффективных масс молекул, поэтому такое разделение приводит к повышению точности оценки этих параметров.

2. Построен алгоритм для оценки значений эффективных коэффициентов диффузии и десорбции – параметров математической модели, описывающей процесс термостимулированной потери массы полимерного композита. При обработке экспериментальных результатов получены значения указанных параметров.

3. Результаты расчётов, проведенных с использованием полученных значений эффективных коэффициентов диффузии и десорбции, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Модель космоса. Под ред. Новикова Л.С. Выпуск 8. В 2-х томах / Москва: Изд. МГУ, 2007.
2. Delphine FAYE: «Calculation approach for outgassing curves of PU1 paint and molecular contamination modeling: ground testing and computer simulation», 8th International Symposium on «Materials in a space environment», Arcachon-France, From 5 to 9 June 2000.
3. J. Guillin: «Evaluation of isothermal outgassing kinetics for some materials used in apace», Proceedings of the Third European Symposium on Spacecraft Materials in Space Environment, ESA SP-232, The Netherlands, October 1985, p. 35–38.
4. Хасаншин Р.Х., Костюк В.И., Винтайкин И.Б., Косогов А.В. О влиянии ионизирующих излучений космического пространства на осаждение продуктов собственной атмосферы на защитных стёклах солнечных батарей // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. 2013 – Вып. 3. – С. 52–57.
5. Хасаншин Р.Х., Надирадзе А.Б. Изменение оптических свойств функциональных поверхностей космических аппаратов при совместном воздействии электронов и ультрафиолета // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, № 3, С. 73–78.
6. Хасаншин Р.Х., Костюк В.И. Система измерений для исследования потери массы неметаллических материалов при облучении в вакууме // Приборы и техника эксперимента, 2015, № 6, С. 104-107.
7. Kassanchine R.H., A.V. Grigorevskiy, and A.N. Galygin. Simulation of Outgassing Processes in Spacecraft Coatings Induced by Thermal Vacuum Influence // Journal of Spacecraft and Rockets, Vol.41, No. 3 (2004), pp. 384-388. doi: 10.2514/1.10933.
8. Pham D.T., Ghanbarzadeh A., Koc E., Otri S., Rahim S. and Zaidi M. The Bees Algorithm. Technical Note, Manufacturing Engineering Centre, Cardiff University, UK, 2005.
9. Karaboga D. An idea based on honey bee swarm for numerical optimization, Erciyes University, Engineering Faculty, Computer Engineering Department 2005.