

Структурная многомасштабная модель термодеструктирующих упругих композитов

© Ю.И. Димитриенко, Ю.В. Юрин, М.Н. Коряков, А.А. Маремшаова

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Предложена структурная многомасштабная модель термодеструктирующих при высоких температурах композиционных материалов, которая позволяет прогнозировать термоупругие свойства композита на основе свойств исходных компонентов – фаз матрицы и фаз моноволокон. Модель учитывает кинетику фазовых превращений в матрице и моно волокнах, происходящих в них при высоких температурах, что позволяет описывать эффекты зависимости свойств композита не только от температуры, но и от скорости нагрева и предыстории нагрева. Предложенная модель состоит из 4 структурных уровней, на нижнем уровне находятся фазы матрицы и моноволокон, а на верхнем уровне – находятся ячейка периодичности, образованная нитями из моноволокон и окружающей их матрицы. Для каждого структурного уровня вводится своя ячейка периодичности. Для нижних уровней применяются приближенно-аналитические решения задач на ячейках периодичности, предложенные ранее в работах Ю.И. Димитриенко, а для ячейки периодичности верхнего уровня строится 3D конечно-элементное решение локальной задачи. Многомасштабная модель термодеструктирующих композитов реализована в программном комплексе Manipula/SMCM, разрабатываемом в НОЦ «СИМПЛЕКС» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Приведен численный пример расчета упругих свойств тканевого стеклоэпоксидного композита при нагреве до высоких температур.

Ключевые слова: термодеструкция, композиты, ячейка периодичности, МКЭ, высокие температуры, Manipula/SMCM

Введение. Композиционные материалы на полимерных матрицах (ПКМ) активно применяются в элементах конструкций, эксплуатирующихся при воздействии высоких температур, например, при создании тепловой защиты спускаемых аппаратов [1-12], для повышения огнестойкости космических, строительных, транспортных и других ответственных конструкций [13]. При воздействии высоких температур (свыше 500-600 К) полимерная матрица в составе ПКМ начинает термодеструктировать: в ней происходят химические процессы терморазложения полимера с образованием большого количества газообразных продуктов и новой твердой фазы (пиролитического или коксового остатка). В армирующих волокнах в составе ПКМ, в зависимости от их химического состава также может происходить процесс термодеструкции (органические волокна), или необратимые фазовые превращения (волокна из оксидной керамики), или термоокисление (углеродные или безоксидные керамические волокна).

ПКМ, в которых происходят перечисленные процессы, обычно называют термодеструктурирующими композитами [9-11].

В большом цикле работ [9-11,14,15 и др.] была предложена и подробно разработана теория термомеханического поведения термодеструктурирующих ПКМ. В ее основе лежит модель Ю.И.Димитриенко 4-х фазной полимерной термодеструктурирующей матрицы и волокон. Эта модель является аналитической, она связывает упругие и теплофизические свойства матрицы, волокон и ПКМ со свойствами фаз матрицы и моноволокон и объемным содержанием этих фаз. В работах [9,16,17] эта модель применена для решения сложных задач расчета напряженно-деформированного состояния композитных конструкций из термодеструктурирующих ПКМ.

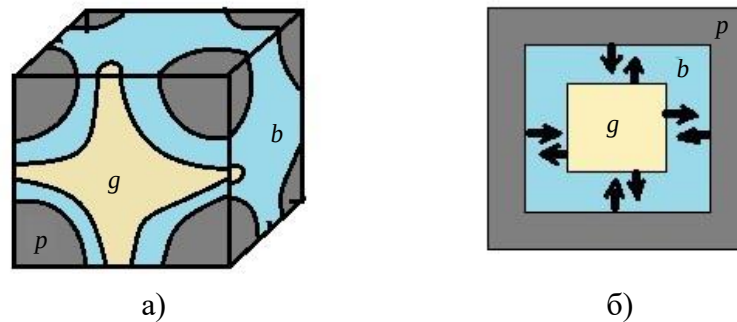
Целью настоящей работы является разработка модифицированного варианта модели термодеструктурирующего ПКМ, в которой для матрицы и моноволокон, как и ранее применяется аналитическая 4-х фазная модель, а для расчета композита применена структурная модель, основанная на решении локальных задач на ячейках периодичности (ЯП) методом конечных элементов. Эти методы решения локальных задач разработаны и внедрены в программный комплекс Manipula/SMCM, разработанный в НОЦ “Симплекс” МГТУ им.Н.Э. Баумана [18].

Общая многомасштабная структурная модель термодеструктурирующего ПКМ. Согласно предлагаемой модифицированной модели термодеструктурирующие ПКМ имеют многомасштабную иерархическую структуру, состоящую из 4 уровней (рис. 1): на 4-ом верхнем уровне этой структуры располагается ЯП ПКМ, представляющая собой повторяющийся элементарный объем, состоящий из матрицы и нитей. На 3-ем уровне находится ЯП нити, образованной моноволокнами и матрицей. На 2-ом структурном уровне находятся ЯП матрица и ЯП моноволокна, по отдельности. На 1-м структурном уровне находятся 3 фазы, из которых состоит матрица, и 3 фазы, из которых состоит моноволокно.

Модели 1-го структурного уровня: фазы матрицы и моноволокон. В соответствии с моделью, предложенной в [9,14,15], термодеструктурирующие матрица и моноволокна являются изотропными термоупругими материалами.

Матрица в рассматриваемом диапазоне температур состоит из 3-х фаз (рис.1а):

- твердой полимерной b -фазы, которая существует при относительно низких температурах;
- твердой пиролитической p -фазы, которая образуется в процессе термодеструкции ($i = p$), ее объемная концентрация — φ_p ;
- газовой g -фазы, образующей поры в матрице.

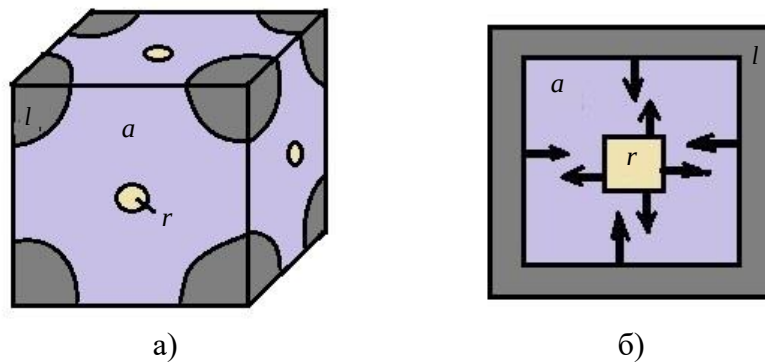


а) — структурная модель ЯП; б) — кубическая модель ЯП

Рис. 1. ЯП трехфазной термодеструктирующей матрицы

Моноволокна в рассматриваемом диапазоне температур также состоят из 3-х фаз (рис. 2 б):

- твердой аморфной a -фазы, которая существует при относительно низких температурах,
- твердой кристаллической l -фазы, которая образуется в процессе нагрева моноволкна,
- газовой r -фазы, образующей поры в моноволокне.



а) — структурная модель ЯП; б) — кубическая модель ЯП

Рис. 2. ЯП трехфазного моноволкна при нагреве

Для оксидных керамических моноволокон газовая фаза отсутствует. Для бескислородных керамических моноволокон, а также органических или углеродных волокон, газовая фаза формируется в процессе нагрева волокон.

Модель 2-го структурного уровня: термодеструктирующая матрица. Рассмотрим ЯП (представительный объем) термодеструктирующей матрицы (рисунок 1) и обозначим относительные доли составляющих ее фаз: φ_b — b -фазы, φ_p — p -фазы, φ_g — газовой g -фазы. Имеет место соотношение нормировки для ЯП матрицы

$$\varphi_b + \varphi_p + \varphi_g = 1. \quad (1)$$

Уравнения, описывающие изменение объемных долей фаз, имеют вид

$$\rho_b \frac{\partial \varphi_b}{\partial t} = -J; \quad (2)$$

$$J = J_0 \varphi_b \exp\left(-\frac{E_A}{R\theta}\right); \quad (3)$$

$$\varphi_p = (\varphi_b^0 - \varphi_b) \frac{\rho_b}{\rho_p} (1 - \Gamma). \quad (4)$$

Эта модель содержит следующие константы: ρ_b — плотность твердой полимерной фазы, ρ_p — плотность твердой пиролизической фазы, Γ — коэффициент газификации, J_0 — предэкспоненциальный множитель; E_A — энергия активации процесса термодеструкции матрицы.

Для расчета эффективных упругих свойств термодеструктирующей матрицы используем кубическую модель, предложенную Ю.И. Димитриенко в работах [9,15] (рис. 1б). Согласно этой модели модуль упругости матрицы E_m , коэффициент Пуассона ν_m и тепловая деформация ε_m матрицы зависят от концентраций фаз и истории изменения температуры, следующим образом

$$E_m = E_b^0 \tilde{a}_1, \quad \nu_m = \nu_b^0, \quad (5)$$

$$\tilde{a}_1 = \left(\frac{S_b}{a^{(0)}(S_p^2 - S_b^2) + m_p(1 - S_p^2)} + \frac{S_p - S_b}{a^{(0)}S_p^2 + m_p(1 - S_p^2)} + \frac{1 - S_p}{m_p} \right)^{-1}, \quad (6)$$

$$\varepsilon_m = \alpha_b \varphi_b (\theta - \theta_0) + \alpha_p \int_0^t [\theta(\tau) - \theta(\tau)] \dot{\varphi}_p d\tau - \beta_p \varphi_p, \quad (7)$$

где обозначены структурные функции

$$S_b = (\varphi_g)^{1/3}, \quad S_p = (1 - \varphi_p)^{1/3}, \quad (8)$$

а также функция обратимого изменения упругих свойств полимерной фазы

$$a^{(0)} = \exp(-a\Delta\hat{\theta}), \quad (9)$$

$$\Delta\hat{\theta} = \Delta\theta + P \int_0^t \exp(-Q(t-\tau)) \Delta\theta(\tau) d\tau, \quad \Delta\theta = \theta - \theta_0. \quad (10)$$

В формулах (6), (7) и (9), (10) обозначены: E_b^0 — модуль упругости b -фазы, E_p — модуль упругости p -фазы, $m_p = \frac{E_p}{E_b^0}$ — отношение модулей упругости фаз, α_b — коэффициент теплового расширения b -фазы, α_p — коэффициент теплового расширения p -фазы, β_p — коэффициент химической усадки, a — коэффициент изменения упругих свойств полимерной фазы при нагреве, P , Q — универсальные константы, определяемые экспериментально [9,15], θ — температура, θ_0 — ее начальное значение.

Модель 2-го структурного уровня: моноволокно. Для моноволокон также рассматриваем свою ЯП и вводим в относительные объемные доли фаз в этой ЯП: φ_a — доля a -фазы, φ_l — доля l -фазы и φ_r — доля газовой r -фазы. Имеет место соотношение нормировки для ЯП моноволокна

$$\varphi_a + \varphi_l + \varphi_r = 1. \quad (11)$$

Изменение объемных концентраций фаз моноволокон описывается следующими кинетическими уравнениями:

$$\rho_a \frac{\partial \varphi_a}{\partial t} = -J_f, \quad (12)$$

$$J_f = J_f^0 \varphi_a \exp\left(-\frac{E_{Af}}{R\theta}\right), \quad (13)$$

$$\varphi_c = (\varphi_a^0 - \varphi_a) \frac{\rho_a}{\rho_c} (1 - \Gamma_f). \quad (14)$$

Эта модель содержит следующие константы: ρ_a — плотность аморфной фазы, ρ_l — плотность кристаллической фазы, Γ_f — коэффициент газификации волокон, J_f^0 — предэкспоненциальный множитель; E_{Af} — энергия активации процесса высокотемпературных фазовых превращений моноволокон.

Для расчета эффективных упругих свойств моноволокон при высокой температуре также используем кубическую модель [9,15] (рис. 2 б). Согласно этой модели модуль упругости E_f , коэффициент

Пуассона ν_f и тепловая деформация ε_f моноволокон зависят от объемных долей их фаз и истории изменения температуры, следующим образом

$$E_f = E_f^0 \tilde{a}_f, \quad \nu_f = \nu_a^0, \quad (15)$$

$$\tilde{a}_f = \left(\frac{S_a}{a_f^{(0)}(S_c^2 - S_a^2) + m_c(1 - S_c^2)} + \frac{S_c - S_a}{a_f^{(0)}S_c^2 + m_c(1 - S_c^2)} + \frac{1 - S_c}{m_c} \right)^{-1}, \quad (16)$$

$$\varepsilon_f = \alpha_a \varphi_a (\theta - \theta_0) + \alpha_l \int_0^t [\theta(t) - \theta(\tau)] \dot{\varphi}_l d\tau - \beta_l \varphi_l, \quad (17)$$

где функции S_c и S_a аналогичны функциям S_p и S_b для матриц и вычисляются по формулам:

$$S_c = (1 - \varphi_c)^{1/3}, \quad S_a = (\varphi_r)^{1/3}. \quad (18)$$

Функция обратимого изменения упругих свойств аморфной фазы моноволокон имеет вид

$$a_f^{(0)} = \exp(-a_f \Delta \hat{\theta}). \quad (19)$$

В формулах (16), (17) и (19) обозначены: E_f^0 — модуль упругости а-фазы, E_c — модуль упругости с-фазы, $m_c = \frac{E_c}{E_a^0}$ — отношение модулей упругости фаз, α_a — коэффициент теплового расширения а-фазы, α_c — коэффициент теплового расширения с-фазы, β_l — коэффициент химической усадки моноволокна, a_f — коэффициент изменения упругих свойств аморфной фазы при нагреве.

Модель 3-го структурного уровня: нить при высоких температурах. Для расчета теплофизических и упругих свойств нити применяется модель однонаправленного композита, состоящего из матрицы и пучка моноволокон. Эта модель также была предложена Ю.И.Димитриенко в работах [9,15], в этой модели нить считается трансверсально-изотропной средой, ее технические упругие модули вычисляются по формулам

$$E_L = E_f \varphi_f \tilde{a}_2 \quad (20)$$

— продольный модуль упругости нити,

$$E_T = E_f \tilde{a}_5 \quad (21)$$

— поперечный модуль упругости нити,

$$G_{TL} = \frac{E_m \tilde{a}_3}{2(1 + \nu_m)} \quad (22)$$

— продольный модуль сдвига нити,

$$\nu_{TT} = \nu_m \quad (23)$$

— поперечный коэффициент Пуассона нити,

$$\nu_{LT} = \nu_m \tilde{a}_4 \quad (24)$$

— продольный коэффициент Пуассона нити, где введены обозначения для структурных функций

$$\begin{aligned} \tilde{a}_2 &= \left(1 + tg^2 \Phi \frac{\varphi_f}{m_E} \right)^{-1}, \\ \tilde{a}_3 &= (1 - \delta_f) \delta_f + \frac{1 + \nu_f}{2m_E} \delta_f^2 \sin^2 \Phi, \quad \delta_f = 2\sqrt{\frac{\varphi_f}{\pi}}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\tilde{a}_4 = 1 - \varphi_f + \varphi_f \frac{\nu_f}{\nu_m},$$

$$\tilde{a}_5 = (1 - \delta_f) \delta_f + \frac{\nu_f}{2m_E} \delta_f^2 \sin^2 \Phi,$$

здесь $m_E = \frac{E_m}{E_f}$ — отношение модулей упругости матрицы и моново-

локна при температуре, Φ — угол разориентации моноволокон в нити, φ_f — объемная доля моноволокон в нити.

Модель 4-го структурного уровня: тканевый ПКМ при высоких температурах. Для расчета упругих характеристик тканевого композита с термодеструктурирующей матрицей и нитями применяется модель композита с периодической структурой и 3D ячейкой периодичности (рис. 3). Матрица является как и для низших структурных уровней, изотропной, а нить — криволинейно-трансверсально-изотропной. Линия криволинейной трансверсальной изотропии располагается по срединной линии нити.

Эффективные определяющие соотношения тканевого композита имеют вид

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{\varepsilon}_{ij}^0 + \bar{P}_{ijkl} \bar{\sigma}_{kl}, \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad (26)$$

где $\bar{\varepsilon}_{ij}$, $\bar{\sigma}_{kl}$ — эффективные тензоры деформации и напряжений композита, $\bar{P}_{ijkl}$ — компоненты эффективного тензора модулей упругости композита, $\bar{\varepsilon}_{ij}^0$ — компоненты эффективного тензора тепловых деформаций композита.

Для вычисления компонент эффективных тензоров $\bar{P}_{ijkl}$ и $\bar{\varepsilon}_{ij}^0$ по свойствам матрицы E_m , ν_m и нити E_L , E_T , G_{TL} , ν_{TT} , ν_{LT} , изменяющимся при высокотемпературном нагреве, используется метод асимптотического осреднения (МАО) [19,20] и конечно-элементный метод решения локальных задач на ячейке периодичности, разработанный в работах [21,22].

После вычисления компонент $\bar{P}_{ijkl}$ с помощью метода МАО, вычисляются эффективные упругие константы тканевого композита, который является ортотропным материалом, оси ортотропии которого ориентированы по главным осям симметрии ЯП тканевого КМ

$$\bar{E}_\gamma = 1 / \bar{P}_{\gamma\gamma\gamma}, \quad \bar{\nu}_{\gamma\beta} = -\bar{P}_{\gamma\beta\beta} / \bar{P}_{\gamma\gamma\gamma}, \quad \bar{G}_{\gamma\beta} = 1 / (4\bar{P}_{\gamma\beta\gamma\beta}), \quad (27)$$

где $\bar{E}_\gamma$, $\bar{\nu}_{\gamma\beta}$, $\bar{G}_{\gamma\beta}$ — эффективные модули упругости, коэффициенты Пуассона и модели сдвига композита.

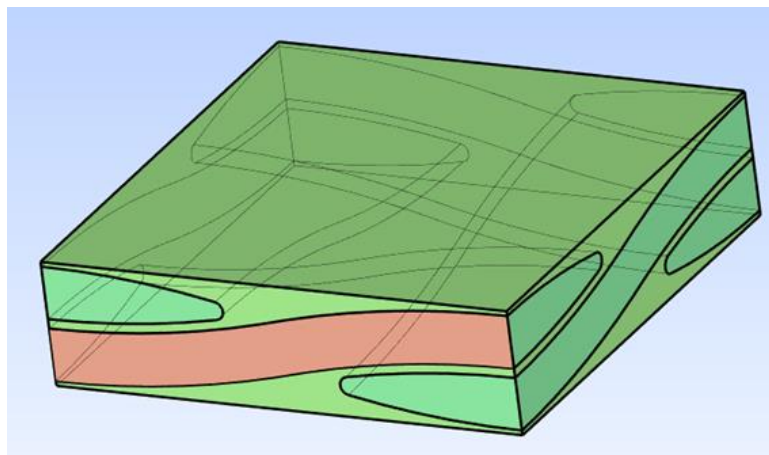


Рис. 3. ЯП тканевого композита

Численный алгоритм решения задачи расчета эффективных свойств композита. Предложенный алгоритм вычисления эффективных упругих свойств композита, включающий в себя конечно-элементный метод решения локальных задач на ЯП, а также конечно-

разностное решение кинетических уравнений, описывающих изменение фаз матрицы и моноволокон, реализован в составе программного комплекса Manipula/SMCM, разработанного в Научно-образовательном центре «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» (НОЦ «Симплекс») МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Примеры численного моделирования. В качестве примера численного моделирования был рассмотрен тканевый стеклопластик на эпоксифенольном связующем. Все константы модели термодеструктурирующей матрицы и стеклянного моноволокна были взяты из работ [9,15]. Объемная концентрация нитей в тканевом КМ составляла 0.5

На рис. 4 - 7 приведены кривые изменения эффективных модулей упругости (27) тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева и при разных скоростях нагрева.

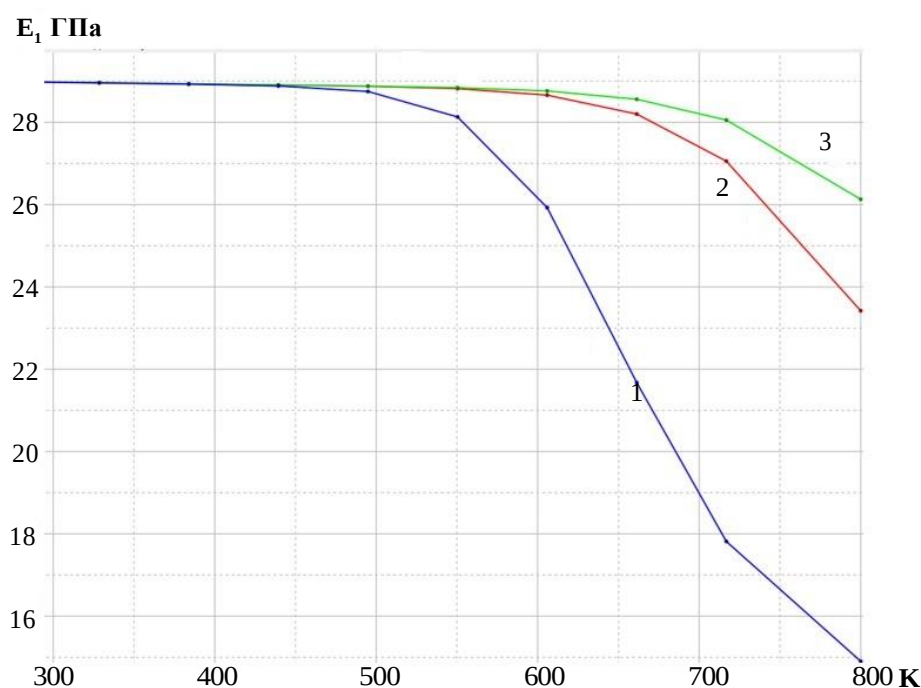


Рис. 4. Изменение эффективного модуля упругости $\bar{E}_1$ по основе тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева и разных скоростей нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

Расчеты были проведены для 3 режимов нагрева, которые отличались различной скоростью нагрева: 4, 1,6 и 0,8 град/с. Как и было отмечено в [9, 14], скорость нагрева существенно влияет на температурную зависимость упругих свойств композита: с увеличением ско-

рости нагрева, термодеструкция происходит в более замедленном режиме, и, соответственно, снижение упругих свойств композита происходит при более высоких температурах.

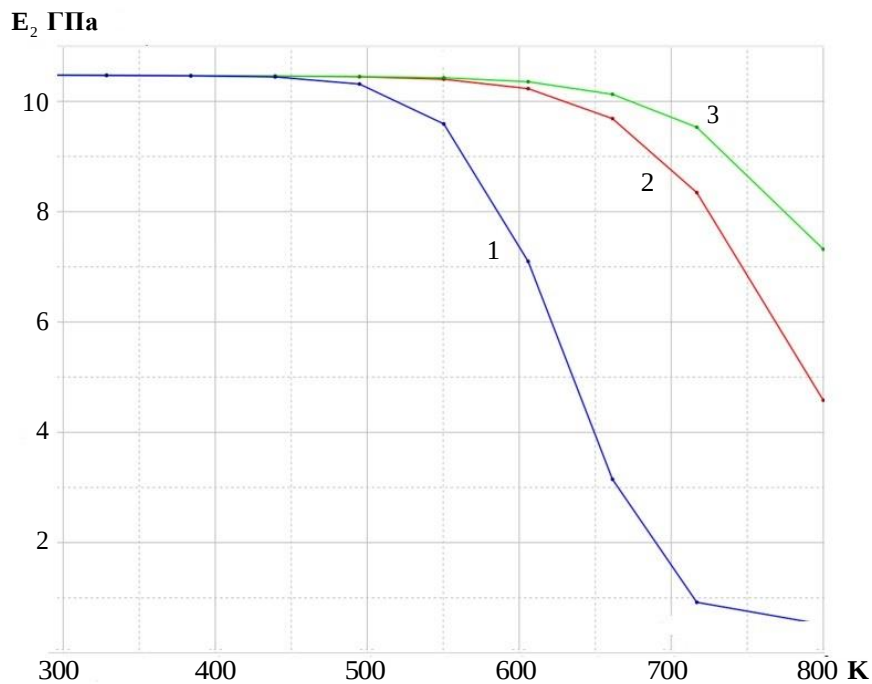


Рис. 5. Изменение эффективного по основе модуля упругости $\bar{E}_2$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева и разных скоростей нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

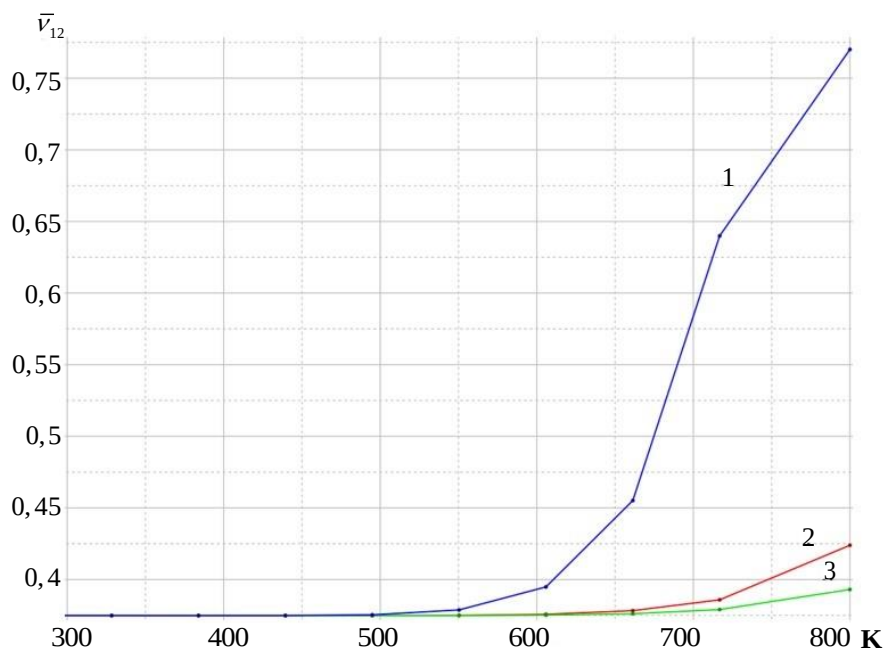


Рис. 6. Изменение эффективного коэффициента Пуассона $\bar{\nu}_{12}$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева и скорости нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

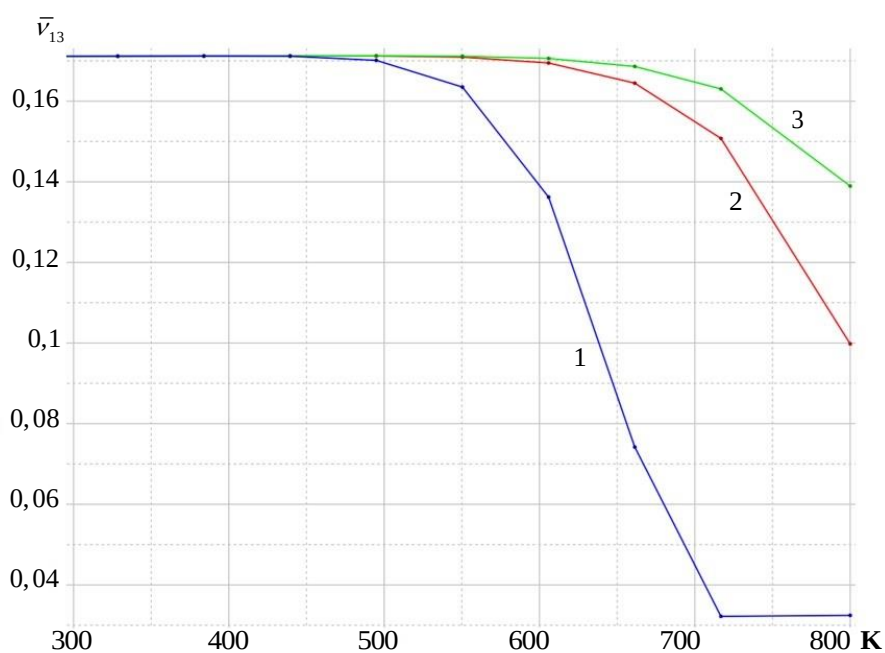


Рис. 7. Изменение эффективного коэффициента Пуассона $\bar{\nu}_{13}$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева и скорости нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

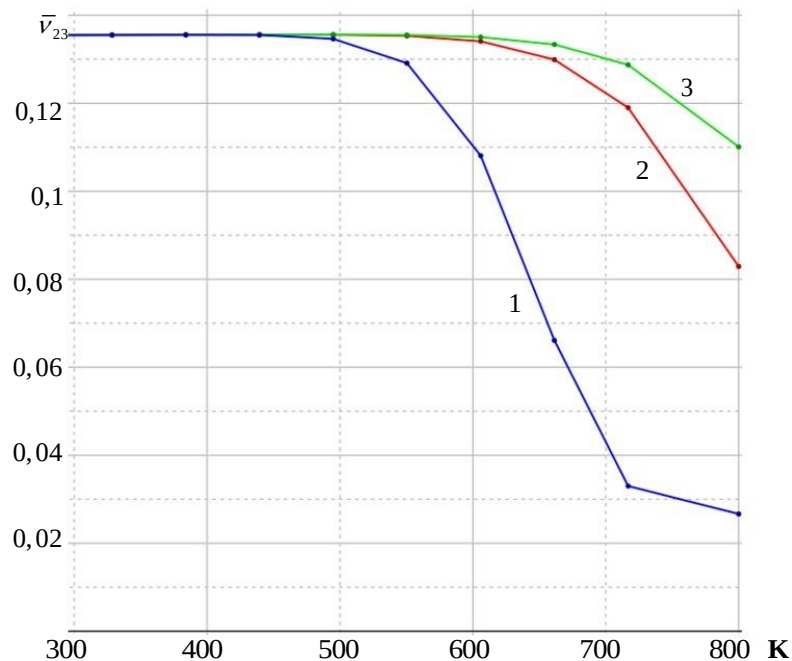


Рис. 8. Изменение эффективного коэффициента Пуассона $\bar{\nu}_{23}$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева, при разных скоростях нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

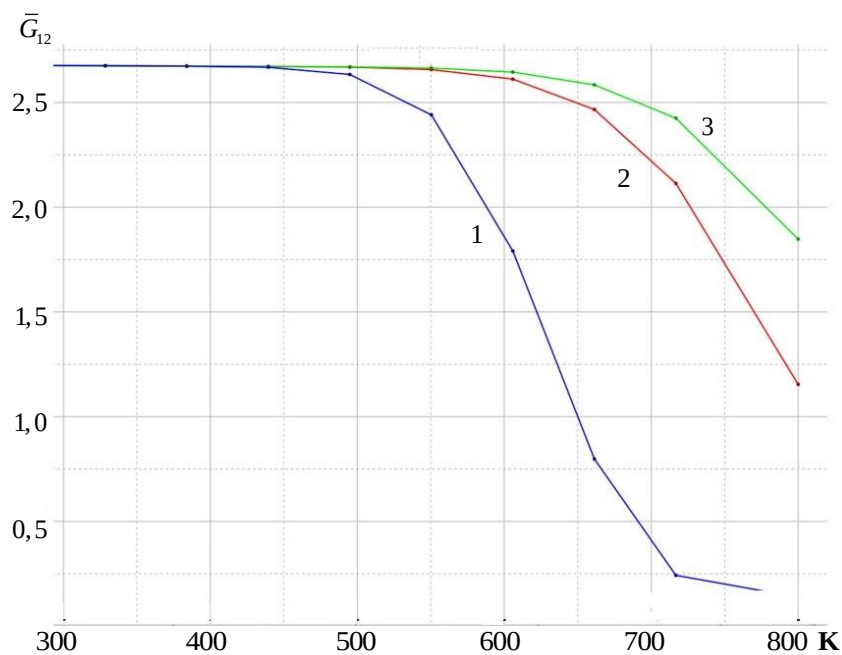


Рис. 9. Изменение эффективного модуля сдвига $\bar{G}_{13}$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева, при разных скоростях нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

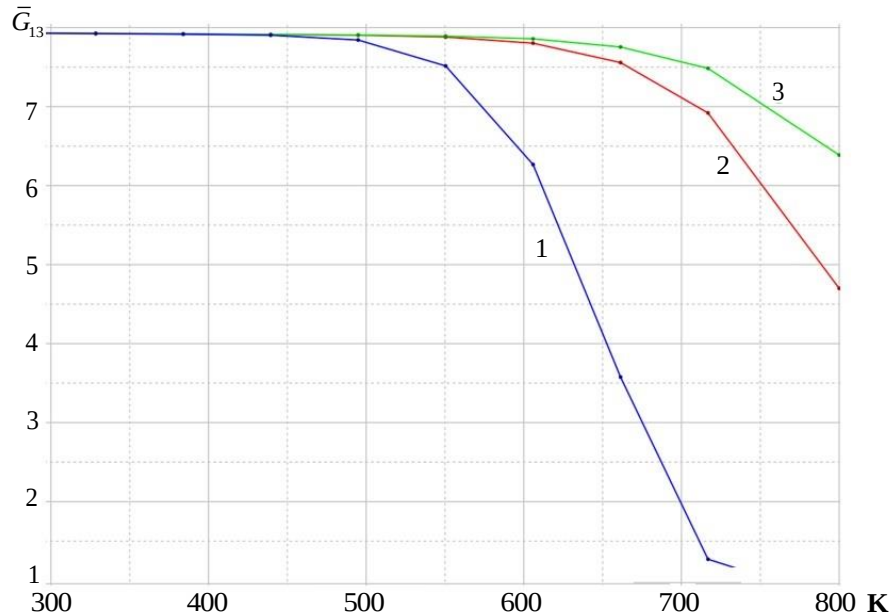


Рис. 10. Изменение эффективного модуля сдвига $\bar{G}_{12}$ тканевого стеклокомпозита в зависимости от температуры нагрева, при разных скоростях нагрева: 1 – 0,8 град/с; 2 – 1,6 град/с; 3 – 4 град/с

Таким образом, показано, что разработанная структурная многомасштабная модель термодеструктирующих упругих композитов может использоваться для прогнозирования высокотемпературного деформирования ПКМ, также как и ранее предложенная приближенно-аналитическая модель. Однако, в отличие от последней структурная модель позволяет более точно моделирования процесс взаимного деформирования матрицы и волокон на так называемом, мезо-уровне композита.

Выводы. В работе предложена структурная многомасштабная модель термодеструктирующих при высоких температурах упругих композитов на полимерной матрице. Модель содержит 4 иерархически вложенных структурных уровня: на нижнем, 1 уровне находятся фазы матрицы и моноволокна, а на верхнем, 4-ом уровне, - сам композит. Для расчета упругих свойств на 1, 2 и 3 уровне используются феноменологическая, аналитическая модели, а на верхнем, 4-ом уровне (мезо-уровень) применяется более точная 3D модель КМ. Предложены соотношения для вычисления термоупругих характеристик на каждом структурном уровне, причем на 4-ом уровне применяется более точная 3D модель реальной мезо-структуры КМ. Проведены численные тестовые расчеты эффективных упругих свойств типичного термодеструктирующего эпоксифенольного стеклопластика, которые показали эффективность разработанной модели и численно-

го алгоритма, реализующего эту модель: она позволяет получать те же результаты, что и разработанная ранее полностью аналитическая феноменологическая модель термодеструктирующего композита, но позволяет более детально исследовать процесс взаимодействия матрицы и нитей при высоких температурах.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Riccio A., Raimondo F., Sellitto A., Carandente V., Scigliano R., Tescione D. Optimum design of ablative thermal protection systems for atmospheric entry vehicle. *Applied Thermal Engineering*, 2017, no. 119, pp. 541–552.
- [2] Carandente V., Savino R., Iacovazzo M., Boffa C. Aerothermal analysis of a sample-return reentry capsule. *Fluid Dynamics and Materials Processing*, 2013, vol. 9, iss. 4, pp. 461–484
- [3] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211
- [4] Алифанов О.М., Иванков А.А., Нетелев А.В., Финченко В.С. Исследование характеристик теплозащитного покрытия аэроупругих тормозных устройств спускаемых в атмосфере планет аппаратов. *Труды МАИ*, 2013, № 71, с. 18.
- [5] Полежаев Ю. В., Юревич Ф. Б. *Тепловая защита*. Москва, Энергия, 1976, 391 с.
- [6] Ayasoufi A., Rahmani R.K., Cheng G., Koomullil R., Neroorkar K. Numerical simulation of ablation for reentry vehicles. *Collection of Technical Papers — 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference Proceedings*, vol. 1, pp. 14–25.
- [7] Beerman A.F., Lewis M.J., Starkey R.P., Cybyk B.Z. Significance of nonequilibrium surface interactions in Stardust return capsule ablation modeling. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, vol. 23, no. 3, pp. 425–432.
- [8] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211
- [9] Димитриенко Ю.И. *Механика композитных конструкций при высоких температурах*. Москва, Физматлит, 2018, 448 с.
- [10] Dimitrienko Yu.I. Internal heat-mass transfer and stresses in thin-walled structures of ablating materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, vol. 40, no. 7, pp. 1701–1711.
- [11] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical behaviour of composite materials and structures under high temperatures: 2. Structures. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, iss. 5, pp. 463–471.
- [12] Страхов В. Л., Разин А. Ф., Каледин Вл. О. *Теплозащита напряженных композитных конструкций*. Москва, Инновационное машиностроение, 2024, 355 с.
- [13] Страхов В.Л., Гаращенко А.Н., Рудзинский В.П. Математическое моделирование работы и определение комплекса характеристик вспучивающейся огнезащиты. *Пожаровзрывобезопасность*, 1997, № 3, с. 21–30.
- [14] Dimitrienko Yu.I. A structural thermomechanical model of textile composite materials at high temperatures. *Composite science and technologies*, 1999, vol. 59, pp. 1041–1053.

- [15] Dimitrienko Yu.I. *Thermomechanics of Composites under High Temperatures*. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht/Boston/London, 1999, 347 p.
- [16] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Юрин Ю.В., Захаров А.А. Конечно-элементное моделирование термонапряжений в композитных термодеструктирующих конструкциях при аэродинамическом нагреве. *Математическое моделирование и численные методы*, 2019, № 2, с. 15–34.
- [17] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Юрин Ю.В., Захаров А.А., Сборщиков С.В., Богданов И.О. Сопряженное моделирование высокоскоростной аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в композитных аэрокосмических конструкциях. *Математическое моделирование и численные методы*, 2021, № 3, с. 42–61.
- [18] Свидетельство № 2020663790 Программа *TERMALSTRESS-PCM_HT_MANIPULA* для конечно-элементного расчета термонапряжений в конструкциях конического типа из тканевых полимерных композиционных материалов при воздействии высокотемпературного газового потока, с учетом криволинейно анизотропии и термодеструкции материала: свидетельство об офиц. регистрации программы для ЭВМ /Димитриенко Ю.И., Юрин Ю.В., Коряков М.Н., Сборщиков С.В., Захаров А.А., Богданов И.О.; заявитель и правообладатель МГТУ им. Н.Э. Баумана — № 2020662965; заявл. 26.10.2020; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 02.11.2020 — [1].
- [19] Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. *Осреднение процессов в периодических средах*. Математические задачи механики композиционных материалов. Москва, Наука, 1984, 352 с.
- [20] Победря Б.Е. *Механика композиционных материалов*. Москва, Издательство МГУ, 1984, 336 с.
- [21] Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечного элемента. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки*, 2002, № 2, с. 95–108.
- [22] Димитриенко Ю. И., Юрин Ю. В., Сборщиков С. В. *Многомасштабное моделирование упругопластических композиционных материалов*. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2024, 228 с.

Статья поступила в редакцию 28.02.2025

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Юрин Ю.В., Коряков М.Н., Маремшаова А.А. Структурная многомасштабная модель термодеструктирующих упругих композитов. *Математическое моделирование и численные методы*, 2025, № 2, с. 19–36.

Димитриенко Юрий Иванович — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, директор Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: dimit@bmstu.ru

Юрин Юрий Викторович — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: yuryurin@yandex.ru

Коряков Михаил Николаевич — ведущий инженер Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: mkoryakov@bmstu.ru

Маремшаова Анастасия Александровна — инженер Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана, ассистент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: maremshaova.nasti@mail.ru

Structural multiscale model of elastic composites with thermal decomposition

© Yu. I. Dimitrienko, Yu. V. Yurin, M. N. Koryakov, A. A. Maremshaova

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

A structural multiscale model composite materials with thermal decomposition at high temperatures is proposed, which allows predicting the thermoelastic properties of the composite based on the properties of the initial components - the matrix phases and the monofilament phases. The model takes into account the kinetics of phase transformations in the matrix and monofilaments occurring in them at high temperatures, which allows describing the effects of the dependence of the composite properties not only on temperature, but also on the heating rate and heating history. The proposed model consists of 4 structural levels, the lower level contains the matrix and monofilament phases, and the upper level contains the periodicity cell formed by the monofilament threads and the matrix surrounding them. For each structural level, a periodicity cell is introduced. For the lower levels, approximate analytical solutions of problems on periodicity cells, proposed earlier in the works of Yu. I. Dimitrienko, are used, and for the periodicity cell of the upper level, a 3D finite element solution of the local problem is constructed. A multiscale model of thermally degradable composites is implemented in the Manipula/SMCM software package developed at the SIMPLEX Research and Education Center of Bauman Moscow State Technical University. A numerical example of calculating the elastic properties of a fabric glass epoxy composite when heated to high temperatures is given.

Keywords: thermal degradation, composites, periodicity cell, FEM, high temperatures, Manipula/SMCM

REFERENCES

- [1] Riccio A., Raimondo F., Sellitto A., Carandente V., Scigliano R., Tescione D. Optimum design of ablative thermal protection systems for atmospheric entry vehicle. *Applied Thermal Engineering*, 2017, no. 119, pp. 541–552.
- [2] Carandente V., Savino R., Iacovazzo M., Boffa C. Aerothermal analysis of a sample-return reentry capsule. *Fluid Dynamics and Materials Processing*, 2013, vol. 9, iss. 4, pp. 461–484
- [3] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211

- [4] Alifanov O.M., Ivankov A.A., Netelev A.V., Finchenko V.S. Study on thermal shields characteristics of aeroelastic braking devices of reentry vehicles descent into the planets atmosphere. *Trudy MAI*, 2013, no. 71, p. 18.
- [5] Polezhaev Yu.V., Yurevich F.B. *Teplovaya zashchita*. [Thermal protection]. Moscow, Energiya, 1976, 391 p.
- [6] Ayasoufi A., Rahmani R.K., Cheng G., Koomullil R., Neroorkar K. Numerical simulation of ablation for reentry vehicles. *Collection of Technical Papers — 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference Proceedings*, vol. 1, pp. 14–25.
- [7] Beerman A.F., Lewis M.J., Starkey R.P., Cybyk B.Z. Significance of nonequilibrium surface interactions in Stardust return capsule ablation modeling. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, vol. 23, no. 3, pp. 425–432.
- [8] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211
- [9] Dimitrienko Yu.I. *Thermomechanics of Composites Structures under High Temperatures*. Heidelberg, Springer, 2015, 367 p.
- [10] Dimitrienko Yu.I. Internal heat-mass transfer and stresses in thin-walled structures of ablating materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, vol. 40, no. 7, pp. 1701–1711.
- [11] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical behaviour of composite materials and structures under high temperatures: 2. Structures. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, iss. 5, pp. 463–471.
- [12] Strakhov V. L., Razin A. F., Kaledin Vl. O. *Teplozashchita napryazhennykh kompozitnykh konstrukcij* [Thermal protection of stressed composite structures]. Moscow, Innovacionnoe mashinostroenie [Innovative engineering], 2024, 355 p.
- [13] Strakhov V. L., Garashchenko A. N., Rudzinsky V. P. Matematicheskoe modelirovanie raboty i opredelenie kompleksa harakteristik vspuchivayushchejsya ogneshchity [Mathematical modeling of operation and determination of a set of characteristics of intumescent fire protection]. *Fire and explosion safety*, 1997, no. 3, pp. 21-30.
- [14] Dimitrienko Yu.I. A structural thermomechanical model of textile composite materials at high temperatures. *Composite science and technologies*, 1999, vol. 59, pp. 1041-1053.
- [15] Dimitrienko Yu.I. *Thermomechanics of Composites under High Temperatures*. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht/Boston/London, 1999, 347 p.
- [16] Dimitrienko Y. I., Koryakov M. N. , Yurin Y. V. , Zakharov A. A. Finite-element modeling of thermal stresses in composite structures with thermal decomposition under aerodynamic heating. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2019, no. , pp. 15–34.
- [17] Dimitrienko Y. I. , Koryakov M. N. , Yurin Y. V. , Zakharov A. A., Sborschikov S. V. , Bogdanov I. O. Coupled modeling of high-speed aerothermodynamics and internal heat and mass transfer in composite aerospace structures. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2021, no. 3(31), pp. 42-61.
- [18] Certificate no. 2020663790 *Programma THERMALSTRESS-PCM-HT-MANIPULA dlya konechno-elementnogo rascheta termonapryazhenij v konstrukciyah konicheskogo tipa iz tkaneykh polimernykh kompozicionnykh materialov pri vozdejstvii vysokotemperaturnogo gazovogo potoka, s uchedom krivolinejno anizotropii i termodestrukicii materiala* [The THERMALSTRESS-PCM-HT-MANIPULA program for finite element calculation of thermal stresses in conical structures made of fabric polymer composite materials under

the influence of a high-temperature gas flow, taking into account the curvilinear anisotropy and thermal destruction of the material]: certificate of offic. registration of a computer program / Dimitrienko Y.I., Yurin Y.V., Koryakov M. N., Sborschikov S.V., Zakharov A. A., Bogdanov I.O.; applicant and copyright holder: BMSTU — no. 2020662965; application 26.10.2020; registered in the register of computer programs 02.11.2020 — [1].

- [19] Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. *Osrednenie protsessov v periodicheskikh sredakh. Matematicheskie zadachi mekhaniki kompozitsionnykh materialov* [Averaging processes in periodic media. Mathematical problems of the composite material mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1984, 352 p.
- [20] Pobedrya B.E. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of composite materials]. Moscow, Lomonosov Moscow State University Publ., 1984, 324 p.
- [21] Dimitrienko Yu.I. , Kashkarov A.I. Raschet effektivnykh harakteristik kompozitov s periodicheskoy strukturoj metodom konechnogo elementa [Computation of effective characteristic of composites with periodic structures by finite element method]. *Vestnik MGTU im N.E.Baumana. Ser. Estestvennye nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Natural Sciences], 2002, no. 2, pp. 95-108.
- [22] Dimitrienko Yu. I., Yurin Yu. V., Sborshchikov S. V. *Mnogomasshtabnoe modelirovanie uprugoplasticheskikh kompozicionnykh materialov* [Multiscale modeling of elastic-plastic composite materials]. Moscow, Izd-vo MGTU im. N.E. Baumana [Bauman Moscow State Technical University Publishing House], 2024, 228 p.

Dimitrienko Yu.I., Dr. Sc. (Phys.-Math.), Professor, Head of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Director of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: dimit@bmstu.ru

Yurin Y.V., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Senior Scientist of the Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: yvyurin@yandex.ru

Koryakov M.N., Lead Engineer of the Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: mkoryakov@bmstu.ru

Maremshaova A.A., Engineer of the Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: maremshaova.nasti@mail.ru