

Апробация расчетно-теоретической модели аэротермохимической деструкции карбида кремния, омываемого высокотемпературным потоком воздуха

© В.В. Горский^{1,3}, А.Н. Гордеев², С.А. Васильевский²,
Т.И. Дудкина³, В.А. Сысенко³

¹МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

²Институт проблем механики РАН, Москва, 119526, Россия

³ОАО «ВПК «НПО машиностроения», г. Реутов Московской области,
143966, Россия

Карбид кремния широко используется в технике для защиты от окисления элементов конструкций высокоэнергетических устройств. Приведены результаты определения эффективных физических свойств карбида кремния на основе решения обратной задачи по отношению к известным экспериментальным данным по абляции этого материала, полученных в дозвуковых воздушных струях плазматрона, и расчетно-теоретической модели протекания процесса. В рамках модели учтено протекание всех основных физико-химических процессов, сопутствующих абляции карбида кремния: гетерогенное химическое взаимодействие с кислородом, в результате которого на поверхности образуется пленка диоксида кремния, сублимация последнего с обеих сторон этой пленки и диффузия через нее газообразных компонентов, унос массы диоксида кремния под воздействием сдвигающих сил, действующих со стороны газового потока. Для расчета гетерогенной химической реакции использовано уравнение Аррениуса, для расчета уноса массы диоксида кремния в жидкой фазе — уравнения ламинарного пограничного слоя, сдвигающие силы, действующие на пленку диоксида кремния, получены в рамках уравнений Навье — Стокса. Результаты исследований предназначены для повышения качества расчетных оценок толщины слоя карбида кремния, необходимой для защиты от окисления высокотемпературных элементов конструкции изделий.

Ключевые слова: углеродные материалы, карбид кремния, термохимическая деструкция, деструкция карбида кремния, ламинарный пограничный слой, защита от окисления.

Введение. В работе [1] для относительно невысоких температур деструкции карбида кремния предложен новый подход к расчету скорости его термохимического окисления в окислительных газовых потоках на основе:

- использования кинетической модели окисления карбида кремния;
- ограничения набора окислительных веществ, участвующих в этой реакции, только чисто кислородными соединениями;

- использования только пассивной модели химического взаимодействия карбида кремния с кислородом, продуктом которой является конденсированный диоксид кремния;

- предположения существования псевдогазового слоя на границе карбида кремния и пленки конденсированного диоксида кремния (для обозначения этой границы использован термин «поверхность A »);

- учета диффузии окислительных веществ к поверхности A из набегающего газового потока через пленку диоксида кремния;

- учета выделения кислорода на поверхности A за счет диссоциации диоксида кремния, испарившегося с этой поверхности;

- описания уноса массы диоксида кремния в рамках уравнений ламинарного пограничного слоя.

Для обозначения параметров, относящихся к поверхности A и к стенке, применяли индексы « A » и « w » соответственно, а на поверхности A предполагается наличие некоторого газового псевдослоя. Под термином «стенка» понимается поверхность материала, обтекаемая набегающим на нее газовым потоком. В свою очередь, для обозначения параметров газовой смеси на внешней границе газового пограничного слоя используется индекс « e ». Скорость диффузионного массопереноса различных веществ рассмотрена в рамках закона бинарной диффузии Фика [2, 3].

Не останавливаясь на описании физико-математической постановки задачи, подробно изложенной в [1], отметим, что проведенный в этой работе крайне ограниченный объем исследований показал: в рамках предложенного механизма термохимической деструкции карбида кремния удастся воспроизвести аномальный характер зависимости скорости протекания этого процесса от давления в пограничном слое.

В настоящей работе методика решения задачи по расчету скорости разрушения карбида кремния протестирована на серии экспериментов, проведенных в работах [4, 5] в диапазоне температур 1300...1600 °С. При этом численное моделирование обтекания образцов высокотемпературным воздушным потоком, истекающим из разрядного канала плазмотрона, проводилось в рамках соответствия с методикой работ [6, 7].

Анализ экспериментальных данных по скорости деструкции карбида кремния. Объект исследований — апробация расчетно-теоретической модели азротермохимической деструкции карбида кремния на наборе данных по средней скорости $G_{\text{AbI,Exp}}$ абляции (изменения массы) карбида кремния в процессе высокотемпературного газодинамического эксперимента. Данные работы [5], полученные для чистого карбида кремния весовым методом в определенном интервале изменения температуры стенки и давления p_e в пограничном слое, приведены на рис. 1.

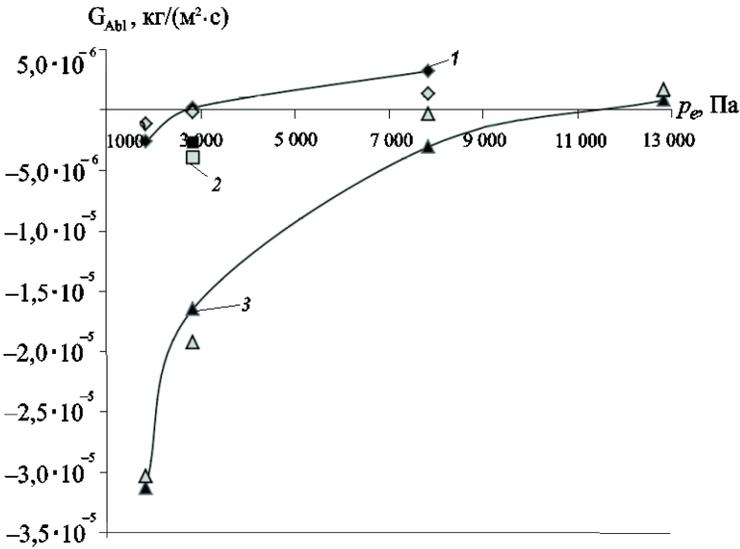


Рис. 1. Зависимость скорости изменения удельной массы образца от давления в газе при $T_w = 1\ 300$ (1); $1\ 400$ (2); $1\ 500$ °C (3). Черным цветом обозначены расчетные данные, серым — экспериментальные

Как видим, снижение давления приводит к существенному увеличению скорости потери массы испытанных образцов в исследуемом диапазоне температур. Для выявления факторов, объясняющих указанный характер зависимости $G_{Abl, Exp}(p_e)$, определены оптимальные значения:

- коэффициента C_{SiO_2} , входящего в формулу для расчета диффузионного массопереноса через пленку диоксида кремния;
- величин, входящих в зависимости от температуры;
- аппроксимационных коэффициентов A_s и B_s для расчета давления насыщенного пара диоксида кремния $p_{SiO_2, \oplus, A}$ в псевдослое на поверхности A , имеющего вид

$$p_{SiO_2, \oplus, A} = \exp\left(A_s - \frac{B_s}{T_A}\right);$$

- аппроксимационных коэффициентов K_{SiC} и E_{SiC} для расчета кинетического члена ω_{SiC} в законе окисления карбида кремния на поверхности A ;
- аппроксимационных коэффициентов α_μ и β_μ для расчета вязкости диоксида кремния $\mu_{SiO_2, w}$ на стенке.

В качестве примера решения таких задач можно указать работу [1].

Ниже приведены результаты решения оптимизационной задачи, в рамках которой определяли значения приведенных коэффициентов,

обеспечивающие минимум рассогласования расчетных и экспериментальных данных в соответствии с методом наименьших квадратов [6] с помощью одного из вариантов эвристического метода прямого поиска Хука — Дживса [7]. При этом использовали следующие исходные данные (табл. 1).

Таблица 1

Исходные данные, зависящие от температуры и давления

Параметр	Давление p_e , Па									
	1 750		2 480			7 500			12 440	
T_w , °C	1 300	1 500	1 300	1 400	1 500	1 300	1 500	1 600	1 500	1 600
$p_{e,ss}$, МПа/м ²	0,3855	0,3866	0,1669	0,2205	0,2453	0,0546	0,0919	0,1048	0,0491	0,0623
h_{00} , МДж/кг	17,35	28,02	17,54	23,34	28,37	16,41	24,56	31,91	19,97	25,22
$A_{h,n}$, кг/(м ² ·с)	0,054	0,057	0,048	0,052	0,056	0,039	0,049	0,052	0,043	0,047
$G_{Abb,Exp} \cdot 10^6$	-2,15	-31,3	-1,24	-4,95	-20,2	0,3	-1,32	-3,44	0,64	1,55

Фиксированные исходные данные:

ρ_{SiO_2} — 2 250 кг/м³; ρ_{SiC} — 3 200 кг/м³; λ_{SiO_2} — 2; ε_w — 0,8; $\sigma_{A,w}$ — 3,65; $\delta_{SiO_2,in}$ — 0,2; $\delta_{SiC,in}$ — 3 000 кг/м³; $\delta_{k,min}$ — 0,1; $\delta_{k,max}$ — 0,2.

Здесь ε_w — степень черноты стенки; h_{00} — энтальпия торможения набегающего воздушного потока; $A_{h,n}$ — коэффициент конвективного теплообмена на непроницаемой стенке.

Газодинамические параметры определяли для условий экспериментов, проведенных на плазмотроне ВГУ-4 по методике, разработанной в Институте проблем механики РАН [8, 9], включающей экспериментальные измерения и проведение расчетов, моделирующих течение и теплообмен в окрестности критической точки испытываемой модели.

Эксперименты проводили для стандартной геометрии разрядного канала — кварцевой трубки длиной 400 мм, диаметром 80 мм, расход воздуха составлял 2,8 г/с при $p_e \geq 2 480$ Па и 3,6 г/с — в противном случае. Модель диаметром 50 мм устанавливали от среза сопла плазмотрона на расстоянии 60 мм ($p_e \geq 2 480$ Па), 100 мм ($p_e = 1 500$ Па, мощность установки $N = 52$ кВт) и 200 мм ($p_e = 1 500$ Па, $N = 49$ кВт).

В ходе экспериментов измеряли следующие параметры:

- тепловой поток q_{Cal} в критической точке водоохлаждаемого медного калориметра, установленного в модели;
- тепловой поток q_w в критической точке образца, изготовленного из исследуемого материала и установленного в модели;
- температуру T_w в критической точке образца;
- скоростной напор на оси струи перед моделью q .

Численное моделирование включало в себя расчет следующих режимов и параметров:

- течения газа в разрядном канале плазмотрона;
- течения газа в барокамере и обтекания им модели;
- течения газа в пограничном слое вблизи критической точки модели и теплового потока к ее поверхности как функции температуры стенки;

- эффективного коэффициента каталитической рекомбинации

γ_{Rec} .

Первые два расчета проводили на основе уравнений Навье — Стокса при предположении термохимического равновесия [8, 9].

Расчеты течения газа в пограничном слое проводились для случая химически неравновесного пятикомпонентного диссоциированного воздуха, с учетом конечной каталитической активности поверхности исследуемого материала и конечной толщины пограничного слоя и завихренности потока на его внешней границе [9].

Энтальпию торможения газового потока перед моделью определяли на основе решения обратной задачи, обеспечивающей воспроизведение измеренного в эксперименте теплового потока к поверхности калориметра, изготовленного из материала с высокими каталитическими свойствами.

Для воздушного потока в качестве эталонного идеально каталитического материала использовали медь высокой чистоты. При этом принимали, что эффективная вероятность рекомбинации атомов на ее поверхности равна единице.

Необходимое для проведения указанных расчетов значение скорости V_e натекания газа на внешнюю границу пограничного слоя определяли в ходе специального эксперимента с помощью трубки Пито, установленной в месте расположения внешней границы пограничного слоя перед моделью:

$$V_e^2 = 2q/(k_p \rho_e),$$

где k_p — эмпирический коэффициент, зависящий от числа Рейнольдса, в рассматриваемой серии экспериментов $Re = 1,05$; ρ_e — плотность газовой смеси на внешней границе пограничного слоя.

Вторую производную давления по координате s в окрестности критической точки модели рассчитывали путем численного дифференцирования профиля функции $p_e(s)$, полученного из численного расчета обтекания модели.

Производную $Fr_{w,s}$ поверхностного трения по координате s в окрестности критической точки модели определяли из одномерного

уравнения Эйлера при предположении линейности тангенциальной проекции вектора скорости.

Значения найденных параметров, характеризующих тепловое и силовое воздействие на модель со стороны набегающего на нее газового потока, приведены в табл. 1.

Сопоставление расчетных и экспериментальных данных, проведенное после решения оптимизационной задачи, показало, что удовлетворительного описания экспериментальных данных получить не удалось.

В то же время в результате решения оптимизационной задачи в диапазоне температур 1300...1500 °С получено удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных (см. рис. 1, табл. 2).

Таблица 2

Экспериментальные данные и результаты расчетов

Параметр	Давление p_e , Па							
	1 790		2 480			7 440		12 440
T_A , °С	1 300	1 500	1 300	1 400	1 500	1 300	1 500	1 500
$G_{Abl,Exp} \cdot 10^6$	-2,15	-31,3	-1,24	-4,95	-20,2	0,3	-1,32	+0,64
$G_{Abl} \cdot 10^6$	-3,63	-32,22	-0,85	-3,4	-17,47	2,19	-4,06	-0,21
$G_{Ox,SiC} \cdot 10^6$	9,71	33,5	7,91	9,71	20,6	6,61	10,8	8,66
$G_{Sub,SiO_2,A} \cdot 10^6$	0,1	111	0,06	1,69	57,3	0,018	13	7,41
$G_{Sub,SiO_2,w} \cdot 10^6$	-0,1	-70,7	-0,06	-1,72	-40,1	-0,019	-11,6	-6,99
$G_{Lign,SiO_2} \cdot 10^6$	14,1	9,24	10,4	14,1	13,8	6,09	14,1	10,2
$\Delta_{SiO_2} \cdot 10^6$	17,67	8,85	20,18	17,39	12,98	24,29	19,49	23,38
$\Delta_{SiC} \cdot 10^6$	-16,97	-46,49	-15,25	-16,85	-30,96	-14,34	-18,77	-16,7

Примечание: Знаки «минус» и «плюс» означают потерю и увеличение массы материала соответственно; индекс «Exp» относят к экспериментальным данным.

Найденному численному решению задачи соответствуют следующие значения оптимизируемых констант: $C_{SiO_2} = 9,74 \cdot 10^{-6}$; $A_s = 4,24 \cdot 10^1$; $B_s = 6,695 \cdot 10^4$; $K_{Ox,SiC} = 2,26 \cdot 10^5$; $E_{Ox,SiC} = 1,28 \cdot 10^8$; $\alpha_\mu = 3,5$; $\beta_\mu = 1,17 \cdot 10^4$.

На рис. 2–4 приведены зависимости от давления p_e массовых скоростей протекания отдельных физико-химических процессов, где черным цветом обозначены расчетные данные, серым — экспериментальные (1–3 — соответствуют рис. 1).

Как видно из представленных на рисунках данных, с уменьшением давления происходит заметное уменьшение толщины пленки диоксида кремния, блокирующей поступление кислорода к поверхности А, что приводит к возрастанию скорости окисления карбида кремния (см. рис. 2).

В то же время при уменьшении давления существенно возрастают как скорость испарения диоксида кремния с поверхности A , так и скорость его конденсации на стенке. Однако суммарная скорость сублимации этого вещества при этом монотонно возрастает (см. рис. 3).

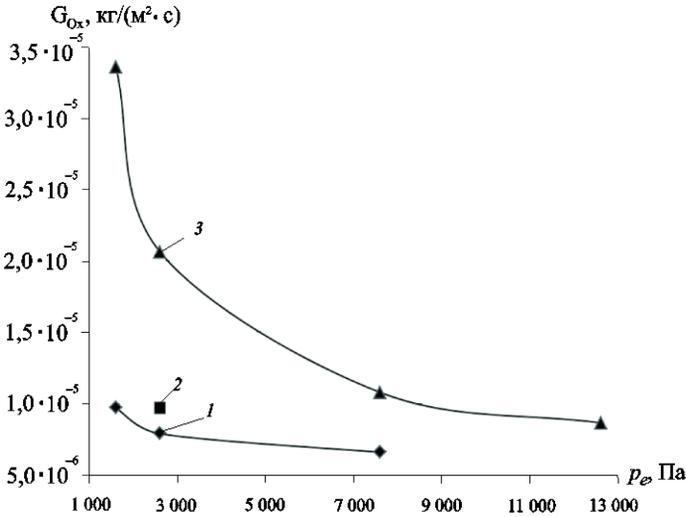


Рис. 2. Скорость окисления карбида кремния в конце времени наблюдения при $T_w = 1300$ (1); 1400 (2); 1500 °C (3). Черным цветом обозначены расчетные данные, серым — экспериментальные

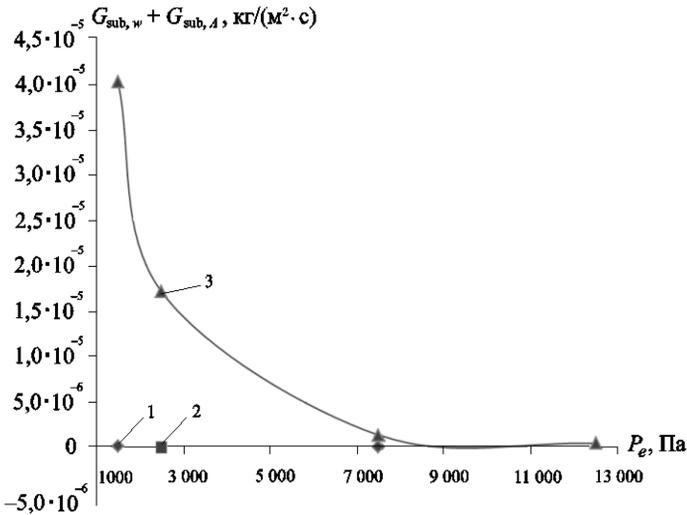


Рис. 3. Скорость сублимации диоксида кремния в конце времени наблюдения при $T_w = 1300$ (1); 1400 (2); 1500 °C (3). Черным цветом обозначены расчетные данные, серым — экспериментальные

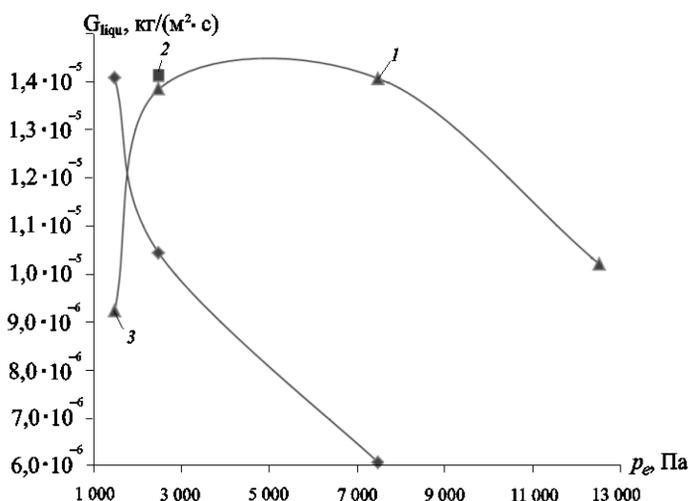


Рис. 4. Скорость уноса карбида кремния в жидкой фазе в конце времени наблюдения при $T_w=1\ 300$ (1); $1\ 400$ (2); $1\ 500$ °С (3). Черным цветом обозначены расчетные данные, серым — экспериментальные

Зависимость скорости уноса массы диоксида кремния в жидкой фазе от давления ведет себя немонотонно при температуре $1\ 500$ °С и монотонно возрастает с уменьшением давления при температуре $1\ 300$ °С (см. рис. 4). Возрастанию этой скорости способствует увеличение сдвигающих сил ($p_{e,ss}$ и $Fr_{w,s}$), происходящее в условиях проведения данных экспериментов при уменьшении давления (см. табл. 2). Одновременно с этим наблюдается однозначное уменьшение толщины пленки диоксида кремния, что, естественно, способствует уменьшению скорости уноса массы SiO_2 в жидкой фазе. Совместное влияние этих разнонаправленных факторов может привести как к монотонному, так и к немонотонному изменению зависимости $G_{Liqu, SiO_2}(p_e)$.

Возникает вопрос, почему включение в оптимизационную процедуру экспериментальных данных, полученных при температуре $1\ 600$ °С, препятствует качественному решению рассмотренной задачи. Одна из возможных причин этого может быть связана со структурными изменениями в материале, приводящими к изменению его физических свойств, которые проходят при температурах выше $1\ 500$ °С.

Заключение. По результатам проведенных исследований можно сделать вывод о возможности использования предложенной методики расчета при температурах, не превышающих $1\ 500$ °С. Использование модели аэротермохимической деструкции карбида кремния при температурах, не превышающих $1\ 500$ °С, является обоснованным.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 2014-08-00971а).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Горский В.В., Гордеев А.Н., Дудкина Т.И. Расчетно-теоретическая модель аэротермохимической деструкции карбида кремния, омываемого высокотемпературным потоком воздуха. *Теплофизика высоких температур*, 2012, т. 50, № 5, с. 692–699.
- [2] Анфимов Н.А. О представлении диссоциированного воздуха в качестве бинарной смеси газов при решении задач пограничного слоя. *ПМТФ*, 1964, № 1, с. 47.
- [3] Горский В.В., Оленичева А.А. О применении закона бинарной диффузии к расчету тепло- и массообмена в газовых смесях сложного химического состава. *Теплофизика высоких температур*, 2011, т. 49, № 1, с. 69.
- [4] Venneman D., Yakushin M. Oxidation tests on SiC reference material in the induction heated facility under sub- and supersonic flow condition. American Institute of Aeronautics and Astronautics. *Proc. of the 7th International Space Planes and Hypersonic Systems Technology Conference. AIAA papers 96-4566*. November 18–22, 1966, Norfolk.
- [5] Yakushin M., Gordeev A., Venneman D., Novelli A. Mass loss of SiC sample surfaces under different flow conditions. *AIAA Paper 98-2605*, 1998.
- [6] Линник Ю.В. *Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений*. Москва, Изд-во физ.-мат. лит.-ры, 1958, 333 с.
- [7] Аоки М. *Введение в методы оптимизации. Основы и приложения нелинейного программирования*. Москва, Наука, 1977, 343 с.
- [8] Vasil'evskii S.A., Kolesnikov A.F., Yakushin M.I. Mathematical models for plasma and gas flows in induction plasmatrons. *Molecular Physics and Hypersonic Flows*. Capitelli M., ed. *NATO ASI Series*, 1996, vol. 482. Kluwer, Dordrecht, 495 p.
- [9] Васильевский С.А., Колесников А.Ф. Численное исследование течения и теплообмена в индукционном плазматроне и определение каталитической активности материалов. *Актуальные проблемы механики. Механика жидкости, газа и плазмы*. Москва, Наука, 2008, с. 95–123.

Статья поступила в редакцию 26.09.2016

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Горский В.В., Гордеев А.Н., Васильевский С.А., Дудкина Т.И., Сысенко В.А. Апробация расчетно-теоретической модели аэротермохимической деструкции карбида кремния, омываемого высокотемпературным потоком воздуха. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2016, вып. 11.

<http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2016-11-1550>

Горский Валерий Владимирович — д-р техн. наук, профессор МГТУ им. Н.Э. Баумана, главный научный сотрудник ОАО «ВПК «НПО машиностроения». Автор более 150 научных работ.

Гордеев Андрей Николаевич — канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского» РАН. Автор 100 научных работ.

Васильевский Сергей Александрович — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник ФГБУН «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского» РАН. С 1992 г. преподает в МФТИ. Автор более 60 научных работ.

Дудкина Таисия Игоревна — инженер ОАО «ВПК «НПО машиностроения».

Сысенко Валентина Алексеевна — канд. техн. наук, старший научный сотрудник отдела аэродинамики ОАО «ВПК «НПО машиностроения». Автор 16 научных работ.

Testing of design-theoretical model of silicon carbide aero thermo-chemical degradation washed by high-temperature air stream

© V.V. Gorskiy^{1,3}, A.N. Gordeev², S.A. Vasil'evskii²,
T.I. Dudkina³, V.A. Sysenko³

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

²Institute for Problems in Mechanics, RAS, Moscow, Russia

³JSC MIC NPO Mashinostroyeniya, Moscow Region, Reutov, Russia

Silicon carbide is widely used in technologies to prevent high-energy devices construction elements from oxidation. The article presents the determination results of silicon carbide effective physical properties based on the inverse problem solution with respect to the experimental data for the material ablation obtained in the subsonic air jet plasma torch, and the design-theoretical model of this process, which have been published in the literature. The given model of silicon carbide mass ablation takes into account all the basic physical and chemical processes involved in the ablation of this material: heterogeneous chemical oxygen reaction with silicon carbide, that results in forming a silicon dioxide film on the material surface, the silicon dioxide sublimation on both film sides and gaseous components diffusion through this film, silicon dioxide ablation under the shear forces influence exerted by the gas stream. To calculate the heterogeneous chemical reaction, we use the Arrhenius equation, to calculate the silica carryover weight in the liquid phase, we use laminar boundary layer equations, and to calculate shear forces acting on the silicon dioxide film, we use Navier – Stokes equations. The article findings are designated to improve the silicon carbide thickness estimates quality required for protection of high-temperature products construction elements from oxidation.

Keywords: carbon materials, silicon carbide, thermochemical destruction, destruction of silicon carbide, laminar boundary layer, layer against oxidation.

REFERENCES

- [1] Gorskiy V.V., Gordeev A.N., Dudkina T.I. *Teplofizika vysokikh temperature — High Temperature*, 2012, vol. 50, no. 5, pp. 692–699.
- [2] Anfimov N.A. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika — Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 1964, no. 1, p. 47.
- [3] Gorskiy V.V., Olenicheva A.A. *Teplofizika vysokikh temperature — High Temperature*, 2011, vol. 49, no. 1, 69 p.
- [4] Venneman D., Yakushin M. Oxidation tests on SiC reference material in the induction heated facility under sub-and supersonic flow condition. American Institute of Aeronautics and Astronautics. *Proc. of the 7th International Space Planes and Hypersonic Systems Technology Conference. AIAA papers 96-4566*. November 18–22, 1966, Norfolk.
- [5] Yakushin M., Gordeev A., Venneman D., Novelli A. Mass loss of SiC sample surfaces under different flow conditions. American Institute of Aeronautics and Astronautics Publ. *AIAA papers 98-2605*, 1998.
- [6] Linnik Yu.V. *Metod naimenshikh kvadrato vi osnovy teorii obrabotki nablyudeniy* [The method of least squares and the basis of observations processing theory]. Moscow, Fiz-mat. lit. Publ., 1958, 333 p.

- [7] Aoki M. *Vvedenie v metody optimizatsii. Osnovy i prilozheniya nelineynogo programmirovaniya* [Introduction to optimization methods. Fundamentals and applications of nonlinear programming]. Moscow, Nauka Publ., 1977, 343 p. [in Russ.].
- [8] Vasil'evskii S.A., Kolesnikov A.F., Yakushin M.I. Mathematical models for plasma and gas flows in induction plasmotrons. *Molecular Physics and Hypersonic Flows*, M. Capitelli, ed. *NATO ASI Series*, vol. 482. Kluwer, Dordrecht, 1996, 495 p.
- [9] Vasil'evskii S.A., Kolesnikov A.F. Chislennoe issledovanie techeniya i teploobmena v induktsionnom plazmotrone i opredelenie kataliticheskoy aktivnosti materialov. *V sbornike: Aktualnye problemy mekhaniki. Mekhanika zhidkosti, gaza i plazmy* [Numerical study of fluid and heat transfer in an inductive plasma torch and the determination of the catalytic activity of the materials. In the collection: Problems in Mechanics. Mechanics of liquid, gas and plasma]. Moscow, Nauka Publ., 2008, pp. 95–123.

Gorskiy V.V., Dr. Sci. (Eng.), Professor, Leading Research Scientist of JSC MIC NPO Mashinostroyeniya, Bauman Moscow State Technical University. Author of over 150 scientific publications.

Gordeev A.N., Cand. Sci. (Phys.-Math.), Leading Research Scientist, Institute for Problems in Mechanics, RAS. Author of 100 scientific publications.

Vasil'evskii S.A., Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Research Scientist, Institute for Problems in Mechanics, RAS. Author of more than 60 scientific publications.

Dudkina T.I., Engineer of JSC MIC NPO Mashinostroyeniya. Co-author of a scientific publication.

Sysenko V.A. Cand. Sci. (Eng.), Leading Research Scientist of JSC MIC NPO Mashinostroyeniya, Department of Aerodynamics. Author of 16 scientific publications.