

Н. М. В л а с о в, И. И. Ф е д и к (Подольск, РОНЦ МГОУ). **Аналитические методы в задачах вычислительной математики.**

Численные методы используют при моделировании различных физических процессов. Корректность моделирования обеспечивают тестовые примеры на основе точных аналитических решений уравнений математической физики. Целью данного сообщения является моделирование водородной проницаемости полого цилиндра при взаимодействии физических полей: концентрационных, температурных, упругих и термоупругих. Выбор модельной системы обусловлен тем, что упомянутые поля имеют логарифмическую зависимость от радиальной координаты. Такая особенность позволяет получить точное аналитическое решение уравнений диффузионной кинетики.

Диффузионный поток атомов водорода в рамках термодинамики необратимых процессов имеет вид (см. [1]):

$$\vec{j} = -D \left(\nabla c + \frac{c \nabla V}{kT} + \frac{Qc \nabla T}{kT^2} \right), \quad (1)$$

где D — коэффициент диффузии атомов водорода, c — концентрация атомов водорода, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, Q — теплота переноса, V — энергия связи атома водорода с полем упругих и термоупругих напряжений. Из условия непрерывности диффузионного потока $\partial c / \partial t + \operatorname{div} \vec{j} = 0$ получим уравнение для определения концентрации атомов водорода в полом цилиндре

$$\begin{aligned} \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\nabla(c \nabla V)}{kT} + \frac{Q \nabla(c \nabla T)}{kT^2}, \quad r_0 < r < R, \\ c(r, 0) &= 0, \quad c(r_0, t) = c_0, \quad c(R, t) = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где r_0 и R — внутренний и внешний радиусы полого цилиндра, c_0 — концентрация атомов водорода на внутренней поверхности.

Решение задачи (2) представляет значительные математические трудности. Однако логарифмическая зависимость T и V от радиальной координаты существенно упрощает задачу (2) (см. [2]):

$$\begin{aligned} \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3}{r} \frac{\partial c}{\partial r}, \quad r_0 < r < R, \\ c(r, 0) &= 0, \quad c(r_0, t) = c_0, \quad c(R, t) = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где β_1 , β_2 и β_3 — безразмерные параметры задачи. Они определяют вклад соответственно температурных, упругих и термоупругих полей в кинетику процесса. Задача (3) допускает точное аналитическое решение. Оценки для системы $(Zr - H)$ показывают, что $|\beta_1 + \beta_2 + \beta_3| \simeq 1$.

Получены аналитические зависимости для концентрации атомов водорода в полом цилиндре. На их основе определены диффузионные потоки атомов водорода через внешнюю поверхность. Определенное сочетание безразмерных параметров задачи позволяет управлять водородной проницаемостью полого цилиндра. Результаты моделирования могут найти применение в практических задачах водородной энергетики. Это направление исследований весьма важно для обеспечения экологической безопасности окружающей биосферы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Varias A. G., Massih A. R.* Simulation of hydrogen embrittlement in zirconium alloys under stress and temperature gradients. — *Journal of Nuclear Materials*, 2000, v. 279, p. 273–285.
2. *Vlasov N. M., Fedik I. I.* Structural and impurity traps for hydrogen atoms. — *International Journal of Hydrogen Energy*, 2006, v. 31, p. 265–267.