

С. В. М а н и ч е в а (Петрозаводск, КГПА). **Симметрия при моделировании гидрирования порошков.**

Интерес к кинетике формирования и распада гидридов связан с перспективами водородной энергетики [1]. Преимущества металлгидридных аккумуляторов водорода по сравнению с баллонами высокого давления или криосистемами связаны с компактностью и высоким уровнем пожаробезопасности.

Формирование и разложение гидридов — сложные физико-химические процессы, их кинетика определяется взаимодействием ряда процессов. Типичным случаем является гидрирование порошка, в связи с чем образец имеет относительно малые размеры (частица порошка). Детальное описание формы трудоемко и нецелесообразно [2]. Однако представляет интерес математическая модель, применимая для возможно более широкого класса форм при сохранении вычислительной эффективности. Симметрия форм частиц порошка в [2] позволила ограничиться одной пространственной переменной: мы описываем группу симметрии и класс симметричных форм, допускающих подобное описание.

Частично гидрированная частица порошка моделируется трехмерным телом V , представляющим собой объединение двух, представляющих области металла и гидрида. Описаны метрика на V и характеристики тела, имеющие физический смысл (площади поверхности фаз, объемы и т. п.), которые должны быть инвариантны относительно взаимно однозначной изометрии этого тела в себя, переводящей поверхность тела и любые эквидистантные ей поверхности в себя.

Кинетика гидрирования частицы такой формы описывается параболической пространственно-одномерной краевой задачей с квазилинейными граничными условиями, причем форма описывается «функцией формы» одной переменной. Класс допустимых тел включает в себя традиционные модели формы (шар, бесконечный цилиндр и т. п.), а также нетривиальные тела, например, тор, цилиндр конечной высоты и объединение цилиндра с двумя шарами того же диаметра, построенными на торцах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Коротеев А. С., Миронов В. В., Смоляров В. А.* Перспективы использования водорода в транспортных системах. — Альтернативная энергетика и экология, 2004, т. 1 (9), с. 5–13.
2. *Chernov I. A., Bloch J., Voit A. P., Gabis I. E.* Influence of metal powder particle's shape on the kinetics of hydriding. — International Journal of Hydrogen Energy, Elsevier, 2010, v. 35, p. 253–258.