

## **Программный комплекс для расчета процессов переноса водорода в металлах**

Чихрай Е.В.<sup>1</sup>, Тажыбаева И.Л.2, Кульсартов Т.В.<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> НИИЭТФ КазНУ им.аль-Фараби, Алматы, Казахстан; [chikhray@physics.kz](mailto:chikhray@physics.kz)

<sup>2)</sup> ИАЭ НЯЦ РК, Алматы, Казахстан

В работе приводится описание и математическая формулировка задачи переноса водорода и его изотопов (дейтерия и трития) в металлах, постановка задачи численного решения системы дифференциальных уравнений диффузии в среде с ловушками и равномерно распределенным или точечным источником диффузанта. Описывается реализация решения полученной аппроксимацией конечными разностями системы линейных уравнений методом прогонки (алгоритм Томаса). Описаны примеры реализации основных модулей программы расчета, результаты тестирования ее на экспериментальных кривых.

Одним из важнейших методологических аспектов современного материаловедения, в особенности связанного с созданием новых материалов для работы в критических условиях высоких температур, давлений и радиационной нагрузки, является изучение процессов массопереноса водорода. Исследование одной только роли водорода в процессах коррозии, охрупчивания и старения металлов в настоящее время заставляет исследователей искать новые подходы и методы, как экспериментов, так и анализа. Одним из наиболее мощных методов такого анализа экспериментальных данных традиционно является компьютерное моделирование внутренних процессов в металлах и сплавах в присутствии водорода и под различными рода внешними воздействиями: радиационном, температурном, химическом, механическом и т.п.

В НИИЭТФ КазНУ уже более десяти лет, как используется для научных и образовательных целей и постоянно совершенствуется собственный комплекс программ для расчета параметров взаимодействия водородотвердое тело. Необходимость разрабатывать собственный набор программ обусловлена целым рядом причин – и недоступностью дорогих лицензионных продуктов, и их ограниченностью в некоторых аспектах. Скажем такой известный продукт как ANSYS, базирующийся на аппроксимации конечными элементами, не очень подходит для случая многослойных систем типа метал-оксид-покрытие, когда толщина каждого из слоев отличается на три-четыре порядка от предыдущего. Кроме того иногда необходимо иметь более развитое описание ловушек для диффузанта или процессов на поверхности или границах раздела.

Представленный набор программ ограничивается рассмотрением только одномерных процессов массопереноса и только таких, для которых возможно составление описывающей процесс системы дифференциальных уравнений. Такое ограничение, на самом деле не является очень жестким, так как охватывает большинство исследовательских (экспериментальных) и значительную часть практических задач диффузии и массопереноса

водорода.

В наиболее типичном случае процесс переноса водорода в металле описывается системой дифференциальных уравнений диффузии в однородной среде с ловушками ограниченной емкости (по модели Мак-Набба-Фостера). Задача для одномерного случая состоит в численном решении системы дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = D(t) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - N \frac{\partial m}{\partial t} + G(x, t) \\ \frac{\partial m}{\partial t} = k_1(t) \cdot (1 - m)C - k_2(t) \cdot m \end{cases}$$

где  $C$  – концентрация диффузанта (в нашем случае – водорода) в металле;  $D(t)$  – коэффициент диффузии;  $N$  – число (концентрация) ловушек ограниченной емкости в металле;  $m$  – степень заполнения ловушек ( $0 \leq m \leq 1$ );  $\partial m / \partial t$  – уравнение динамики заполнения-опустошения ловушек (только в свободные ловушки происходит захват водорода, и только из занятой ловушки водород может выйти в металл);  $k_1$  – коэффициент (скорость) захвата водорода в ловушки,  $k_2$  – коэффициент (скорость) высвобождения водорода из ловушки;  $G(x, t)$  – функция описывающая некий источник водорода в металле,  $t$  – время.

В работе вкратце описывается физика рассматриваемого процесса, этапы его численного моделирования: выбор схемы аппроксимации дифференциальных уравнений конечными разностями; составление системы линейных алгебраических уравнений; выбор и обоснование метода их численного решения; программирование. Большая часть работы посвящена описанию и использованию созданных в лаборатории конструкционных материалов ядерно-энергетических установок НИИЭТФ КазНУ набора программ для численных расчетов таких диффузионных процессов. Программы рассчитывают динамику распределения диффузанта по толщине образца, динамику заполнения-высвобождения ловушек и временную зависимость потока десорбции диффузанта из металла при его проницаемости при постоянной температуре или при нагреве в заданном диапазоне температур с указанной скоростью.

Разработанный программный комплекс может использоваться студентами и докторантами, специализирующихся по физике твердого тела, радиационной физике, экспериментальной ядерной физике и изучающих методы численного моделирования переноса вещества в рамках спецкурсов "Взаимодействие излучений с веществом", "Диффузионные процессы в твердых телах", "Радиационно-стимулированные процессы в кристаллах", "Ядерная и термоядерная энергетика" и соответствующих лабораторных практикумов.