

ЮРИЙ ВАСИЛЬЕВИЧ ЗАИКА

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией моделирования природно-технических систем Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН, профессор кафедры прикладной математики и кибернетики математического факультета ПетрГУ
zaika@krc.karelia.ru

ЕКАТЕРИНА КОНСТАНТИНОВНА КОСТИКОВА

стажер-исследователь Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН, инженер кафедры математического моделирования систем управления математического факультета ПетрГУ
fedorova@krc.karelia.ru

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ТДС-ДЕГАЗАЦИИ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Рассматривается дегазация пластины, предварительно насыщенной водородом. Эксперимент проводится методом термодесорбционной спектрометрии. В статье приводятся результаты численного моделирования. В соответствующей краевой задаче с нелинейными динамическими граничными условиями учтены основные физико-химические процессы переноса в объеме и на поверхности материала: растворение, обратимый захват дефектами, диффузия и десорбция.

Ключевые слова: водородопроницаемость, краевые задачи, динамические граничные условия, разностные схемы

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Водород рассматривается как один из перспективных экологически чистых энергоносителей. Кроме того, безопасность систем транспортировки и переработки углеводородного сырья во многом определяется уровнем защиты конструкционных материалов от водородной коррозии. Экспериментальный метод термодесорбционной спектрометрии (ТДС) является одним из основных при исследовании взаимодействия водорода с твердым телом (см., например, [3], [5], [8]). Пластина толщины ℓ из металла или сплава, нагретая до температуры $T = \bar{T}$, находится в камере с газообразным водородом под давлением \bar{p} . После насыщения растворенным атомарным водородом образец быстро охлаждается (отключается ток нагрева), камера вакуумируется, и в условиях медленного нагрева с помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток. По этой экспериментальной информации судят о характеристиках взаимодействия водорода с исследуемым материалом.

Учет дефектов (ловушек) и динамических процессов на поверхности проводим в соответствии с [1], [4]. В статье остановимся на прямой задаче, параметрическая идентификация исследуется в [6], [10].

Рассмотрим симметричную по постановке эксперимента краевую задачу ТДС-дегазации:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \sum_{\nu=1}^m \left(a_{\nu}^- [1 - Z_{\nu}] c(t, x) - a_{\nu}^+ z_{\nu}(t, x) \right), \quad (1)$$

$$Z_{\nu} \equiv \frac{z_{\nu}(t, x)}{z_{\max}^{\nu}},$$

$$\frac{\partial z_{\nu}}{\partial t} = a_{\nu}^- (T) [1 - Z_{\nu}] c(t, x) - a_{\nu}^+ (T) z_{\nu}(t, x), \quad (2)$$

$$t \in (0, t_*), \quad x \in (0, \ell),$$

$$c(0, x) = \varphi(x) = \varphi(\ell - x), \quad (3)$$

$$z_{\nu}(0, x) = \psi_{\nu}(x) = \psi_{\nu}(\ell - x), \quad x \in [0, \ell],$$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \mu s(T) p(t) - J(t) \pm D(T) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{0,\ell}, \\ J(t) &\equiv b(T) q^2(t), \\ c_0(t) &= c_\ell(t) = g(T) q(t), \quad t \in [0, t_*], \\ p(t) &= \theta_1 \int_0^t J(\tau) \exp \left\{ \frac{\tau - t}{\theta_0} \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $c(t, x)$ – концентрация атомарного водорода (H), растворенного внутри пластины, $c_0(t) \equiv c(t, 0)$, $c_\ell(t) \equiv c(t, \ell)$; $z_v(t, x)$ – концентрация H, захваченного дефектами физико-химической структуры материала (например, в микрополостях); z_{\max}^v – максимальная концентрация H в дефекте; a_j – коэффициенты поглощения и выделения H ловушками; $q(t)$ – поверхностная концентрация; D , b , g – коэффициенты диффузии, десорбции и быстрого растворения; μ – кинетическая константа ($\mu \approx 1,46 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1} \text{ торр}^{-1}$); s – коэффициент прилипания водорода в газовой фазе к поверхности; $J(t)$ – плотность десорбционного потока (торцами пластины пренебрегаем); $p(t)$ – давление молекулярного водорода в вакуумной камере. Для практических целей захват учтен в простейшей «интегральной» форме, уточнение геометрии дефектов и их распределения существенно усложнило бы модель. Если дефект – не микрополость, а, например, включение гидридной фазы, то соответствующий коэффициент – $a_j^- = 0$, $a_j^+ > 0$ лишь при $T \geq T_{\text{crit}}$, а $\psi_j(x)$ обычно задается постоянной. Константы θ_0 , θ_1 определяются характеристиками вакуумной установки: θ_0 – отношение объема камеры к скорости отбора газа, θ_1 – отношение площади пластины к объему камеры. Параметры модели D , b , g , s , a_j зависят от температуры T . Как правило, в «рабочем диапазоне» с достаточной точностью выполняется закон Аррениуса. Например, $D(T) = D_0 \exp\{-E_D/[RT]\}$, $D_0, E_D, R = \text{const}$. Нагрев обычно линейный: $T(t) = T_0 + vt$, $v > 0$. Сокращенно будем обозначать $D(t) \equiv D(T(t))$, $b(t) \equiv b(T(t))$, ...

Более точная модель растворения определяется балансом потоков:

$$\begin{aligned} k^+(T)c_{0,\ell}(t) \left[1 - q(t)q_{\max}^{-1} \right] - \\ - k^-(T)q(t) \left[1 - c_{0,\ell}(t)c_{\max}^{-1} \right] &= \pm D(T)c_x \Big|_{0,\ell}. \end{aligned}$$

Но когда диффузия значительно медленнее проницаемости поверхности ($D(T)c_x \approx 0$) и концентрации малы, получаем условие быстрой растворимости $c_{0,\ell} \approx gq$, где $g = k^-/k^+$. Если поверхность изотропна (в смысле $E_{k^-} \approx E_{k^+}$), то g слабо зависит от T .

Уточним начальные данные. Равновесная концентрация насыщения \bar{c} удовлетворяет соот-

ношению $\mu s \bar{p} = b \bar{c}^2/g^2$, $T = \bar{T}$ (производные в (4) равны нулю), модель соответствует диапазону $\bar{c} \sim \sqrt{\bar{p}}$. При непродолжительном начальном этапе ТДС-эксперимента (охлаждение и вакуумирование) имеем практически равномерное начальное распределение $\varphi(x) = \bar{c}$. Для ловушки с обратимым захватом (микрополость) константа $\bar{z}_v = \psi_v(x)$ определяется в силу (2) ($\partial/\partial t = 0$, $T = \bar{T}$): $a_v^-(\bar{T}) \left[1 - \bar{z}_v/z_{\max}^v \right] \bar{c} - a_v^+(\bar{T}) \bar{z}_v = 0$. Для некоторых значений параметров задача может оказаться жесткой: $|\dot{q}(0)| \gg 1$. Концентрация диффундирующего водорода симметрична относительно середины пластины, начальное вакуумирование длится некоторое (пусть и малое) время. Для уточнения начальных данных разумно принять $\varphi(x) = \bar{c} - A[x - \ell_0]^2$, $A > 0$, $2\ell_0 = \ell$. Константа A определяется подстановкой $\varphi(x)$ в условие «мягкого старта» $\dot{q}(0) = 0$ (равенство относительное: начальная температура T_0 и скорость нагрева v достаточно малы). Функцию $\psi_v(x)$ фиксируем соотношением

$$a_v^-(T_0) \left[1 - \psi_v/z_{\max}^v \right] \varphi - a_v^+(T_0) \psi_v = 0 (\approx 0).$$

Для дефекта типа включения гидридной фазы значения $\bar{z}_v \equiv \psi_v(x)$, T_{crit} , a_v^+ задаются по информации о конкретном химическом составе гидрида. Без принципиальных изменений используются и более высокие степени для представления $\varphi(x)$.

Цель работы состоит в разработке вычислительного алгоритма для моделирования плотности десорбции $J(t) = b(t)q^2(t)$, $t \in [0, t_*]$ ($J(t) \approx 0$, $t \geq t_*$). Эта функция определяется из эксперимента, так что модельный поток $J(t)$ необходим для качественных оценок, для обоснования и тестирования методов параметрической идентификации.

РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ: РАЗНОСТНАЯ СХЕМА

Следуя стандартной методике [2], [9], введем сетку $\bar{\omega}_h^t$ с фиксированными шагами τ , h по t , x в замкнутой области $\Omega = [0, t_*] \times [0, \ell]$. Обозначим через c_i^k приближенные значения концентрации $c(t_k, x_i)$, $z_{i,v}^k \approx z_v(t_k, x_i)$, $k \in \{0, \dots, M\}$, $i \in \{0, \dots, N\}$, $\tau = t_*/M$, $h = \ell/N$.

Рассмотрим схему с весами: $D = D(\xi_k)$, $a_v = a_v(\xi_k)$, $\xi_k \in [t_k, t_{k+1}]$,

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{k+1} - c_i^k}{\tau} &= (1 - \sigma) \left[D \frac{c_{i+1}^k - 2c_i^k + c_{i-1}^k}{h^2} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{v=1}^m \left(a_v^- \left[1 - Z_{i,v}^k \right] c_i^k - a_v^+ z_{i,v}^k \right) \right] + \\ &+ \sigma \left[D \frac{c_{i+1}^{k+1} - 2c_i^{k+1} + c_{i-1}^{k+1}}{h^2} - \sum_{v=1}^m \left(a_v^- \left[1 - \tilde{Z}_{i,v}^{k+1} \right] c_i^{k+1} - a_v^+ z_{i,v}^{k+1} \right) \right], \\ \frac{z_{i,v}^{k+1} - z_{i,v}^k}{\tau} &= (1 - \sigma) \left[a_v^- \left[1 - Z_{i,v}^k \right] c_i^k - a_v^+ z_{i,v}^k \right] + \\ &+ \sigma \left[a_v^- \left[1 - \tilde{Z}_{i,v}^{k+1} \right] c_i^{k+1} - a_v^+ z_{i,v}^{k+1} \right]. \end{aligned}$$

Здесь, чтобы иметь возможность использовать алгоритм прогонки на $(k+1)$ -м слое по времени, неизвестную величину $Z_{i,v}^{k+1}$ заменяем ее аппроксимацией из линейного по $\tilde{Z}_{i,v}^{k+1}$ уравнения

$$\tilde{Z}_{i,v}^{k+1} = Z_{i,v}^k + \frac{\tau}{2} \left[a_v^-(t_k) \left[1 - Z_{i,v}^k \right] c_i^k (z_{\max}^v)^{-1} - a_v^+(t_k) Z_{i,v}^k + a_v^-(t_{k+1}) \left[1 - \tilde{Z}_{i,v}^{k+1} \right] c_i^k (z_{\max}^v)^{-1} - a_v^+(t_{k+1}) \tilde{Z}_{i,v}^{k+1} \right]. \quad (5)$$

В стандартных обозначениях $\dot{y} = f(t, y)$ – это неявная схема $y_{n+1} = y_n + [f_n + f_{n+1}] \tau / 2$ для нормированного на z_{\max}^v уравнения (2) с фиксированной по времени функцией $c = c(t_k, x)$. Итерационную процедуру уточнения $\tilde{Z}_{i,v}^{k+1}$ укажем позже.

Для определенности полагаем $\sigma = 1/2$, $\xi_k = t_k + \tau / 2$ [9; 280]. Погрешность аппроксимации есть $O(\tau^2 + h^2)$. Обозначим $D(t_k + \tau / 2) \equiv \hat{D}_k$, $a_j(t_k + \tau / 2) \equiv \hat{a}_{k,j}$, выразим $\tilde{Z}_{i,v}^{k+1}$ из второго уравнения разностной схемы и подставим в первое. В обозначениях $\kappa = 2h^2\tau^{-1}$,

$$\begin{aligned} V_i^k &= \sum_{v=1}^m \frac{\hat{a}_{k,v}^- \left[1 - Z_{i,v}^k \right]}{\hat{a}_{k,v}^+ + 2\tau^{-1}}, \quad \tilde{V}_i^{k+1} = \sum_{v=1}^m \frac{\hat{a}_{k,v}^- \left[1 - \tilde{Z}_{i,v}^{k+1} \right]}{\hat{a}_{k,v}^+ + 2\tau^{-1}}, \\ W_i^k &= \sum_{v=1}^m \frac{\hat{a}_{k,v}^+ z_{i,v}^k}{\hat{a}_{k,v}^+ + 2\tau^{-1}}, \quad Q_i^{k+1} = 2 + \kappa \hat{D}_k^{-1} \left(1 + \tilde{V}_i^{k+1} \right), \\ F_i^k &= c_{i-1}^k - \left[2 - \kappa \hat{D}_k^{-1} (1 - V_i^k) \right] c_i^k + c_{i+1}^k + 2\kappa \hat{D}_k^{-1} W_i^k, \end{aligned}$$

получаем

$$c_{i-1}^{k+1} - Q_i^{k+1} c_i^{k+1} + c_{i+1}^{k+1} + F_i^k = 0, \quad k \geq 0. \quad (6)$$

Значения в начальный момент времени (на нулевом слое) известны: $c_i^0 = \varphi(x_i)$. Следуя методу прогонки, ищем приближенные значения концентрации в узлах сетки на $(k+1)$ -м слое по времени в виде

$$c_i^{k+1} = \alpha_i c_{i+1}^{k+1} + \beta_i + \gamma_i c_0^{k+1}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad k \geq 0. \quad (7)$$

Прогоночные коэффициенты: $\alpha_i = 1 / (Q_i^{k+1} - \alpha_{i-1})$, $\beta_i = \alpha_i (\beta_{i-1} + F_i^k)$, $\gamma_i = \gamma_{i-1} \alpha_i$, $i = 2, 3, \dots, N-1$. Записав соотношение (6) для $i=1$, получаем начальные коэффициенты: $\alpha_1 = \gamma_1 = 1 / Q_1^{k+1}$, $\beta_1 = F_1^k / Q_1^{k+1}$.

Ближайшая цель – найти значения c_0^{k+1} , c_N^{k+1} , необходимые для реализации прогонки. Подставим $p(t)$ в граничное условие (4):

$$\dot{q}(t) = \mu s(T) \theta_1 \int_0^t J(\eta) \exp \left\{ \frac{\eta - t}{\theta_0} \right\} d\eta - b(T) q^2(t) \pm D(T) \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{0,\ell}.$$

Запишем разностную аппроксимацию ($x = \ell$): $k \geq 0$, $p_k \equiv p(t_k)$,

$$\begin{aligned} \frac{q_{k+1} - q_k}{\tau} &= \frac{1}{2} \left[\mu s_k p_k - b_k q_k^2 - D_k c_x(t_k, \ell) + \right. \\ &\quad \left. + \mu s_{k+1} p_{k+1} - b_{k+1} q_{k+1}^2 - D_{k+1} c_x(t_{k+1}, \ell) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Интеграл приближенно выражаем по формуле трапеций:

$$\begin{aligned} p_{k+1} &= \theta_1 \int_0^{t_{k+1}} J(\eta) \exp \left\{ \frac{\eta - t_{k+1}}{\theta_0} \right\} d\eta = \\ &= \exp \left\{ -\frac{\tau}{\theta_0} \right\} p_k + \theta_1 \int_{t_k}^{t_{k+1}} \dots d\eta \approx \\ &\approx \exp \left\{ -\frac{\tau}{\theta_0} \right\} p_k + \frac{\theta_1 \tau}{2} \left[J_{k+1} + \exp \left\{ -\frac{\tau}{\theta_0} \right\} J_k \right], \quad p_0 = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Использовался и второй вариант. Воспользуемся для уравнения $\dot{p} = -p / \theta_0 + \theta_1 J$ неявной схемой, указанной выше для $\dot{y} = f(t, y)$:

$$p_{k+1} = \frac{(2\theta_0 - \tau) p_k + \theta_0 \theta_1 \tau (J_k + J_{k+1})}{2\theta_0 + \tau}.$$

В граничном узле с точностью до $O(h^2)$ имеем

$$2h c_x(t_j, \ell) \approx c_{N-2}^j - 4c_{N-1}^j + 3c_N^j, \quad j = k, k+1. \quad (10)$$

Значения концентрации на k -м слое уже известны. Для $(k+1)$ -го слоя, подставляя значения c_{N-2}^{k+1} и c_{N-1}^{k+1} из соотношения (7), получаем

$$\begin{aligned} c_x(t_{k+1}, \ell) &\approx \frac{1}{2h} \left[(3 + \alpha_{N-1} (\alpha_{N-2} - 4)) c_N^{k+1} + \right. \\ &\quad \left. + (\gamma_{N-2} + \gamma_{N-1} (\alpha_{N-2} - 4)) c_0^{k+1} + (\beta_{N-2} + \beta_{N-1} (\alpha_{N-2} - 4)) \right]. \end{aligned}$$

В силу симметрии начальных данных в краевой задаче граничные концентрации равны, поэтому решение ищем при условии $c_0^{k+1} = c_N^{k+1}$. Апроксимацию $c_x(t_{k+1}, \ell)$ запишем более компактно:

$$2h c_x(t_{k+1}, \ell) \approx (H + G) c_N^{k+1} + B, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \text{где } H &= 3 + \alpha_{N-1} \zeta, \quad G = \gamma_{N-2} + \gamma_{N-1} \zeta, \\ B &= \beta_{N-2} + \beta_{N-1} \zeta, \quad \zeta = \alpha_{N-2} - 4. \quad \text{Соотношения} \\ (9)-(11) &\text{подставляем в (8), обозначив } c_N^{k+1} = y: \\ \left[\frac{b_{k+1}}{g_{k+1}^2} \left(1 - \frac{\mu \theta_1 \tau}{2} s_{k+1} \right) \right] y^2 &+ \left[\frac{2}{\tau g_{k+1}} + \frac{D_{k+1}}{2h} (G + H) \right] y + \Gamma = 0, \\ \Gamma &\equiv \frac{b_k}{g_k^2} \left(1 - \frac{\mu \theta_1 \tau}{2} \exp \left\{ -\frac{\tau}{\theta_0} \right\} s_{k+1} \right) \left(c_N^k \right)^2 + \left(\frac{3D_k}{2h} - \frac{2}{\tau g_k} \right) c_N^k + \\ &+ \frac{1}{2h} \left(D_{k+1} B + D_k (c_{N-2}^k - 4c_{N-1}^k) \right) - \mu p_k \left(\exp \left\{ -\frac{\tau}{\theta_0} \right\} s_{k+1} + s_k \right). \end{aligned}$$

Для второго варианта определения p_{k+1} :

$$\begin{aligned} & \left[\frac{b_{k+1}}{g_{k+1}^2} \left(1 - \frac{\mu \theta_0 \theta_1 \tau}{2\theta_0 + \tau} s_{k+1} \right) \right] y^2 + \left[\frac{2}{\tau g_{k+1}} + \frac{D_{k+1}}{2h} (G + H) \right] y + \Gamma = 0, \\ & \Gamma \equiv \frac{b_k}{g_k^2} \left(1 - \frac{\mu \theta_0 \theta_1 \tau}{2\theta_0 + \tau} s_{k+1} \right) (c_N^k)^2 + \left(\frac{3D_k}{2h} - \frac{2}{\tau g_k} \right) c_N^k + \\ & + \frac{1}{2h} \left(D_{k+1} B + D_k (c_{N-2}^k - 4c_{N-1}^k) \right) - \mu p_k \left(\frac{2\theta_0 - \tau}{2\theta_0 + \tau} s_{k+1} + s_k \right). \end{aligned}$$

По физическому смыслу нас интересует положительный корень квадратного уравнения по y . Погрешность аппроксимации граничного условия $-O(h^2 + \tau^2)$, что согласуется с разностной схемой внутри пластины.

Изложим поэтапно алгоритм вычислений. Фиксируем значения ℓ , D_0 , E_D , b_0 , E_b , s_0 , E_s , g , $\bar{c} = \bar{c}(\bar{p}, \bar{T})$, T_0 , v . Находим $A > 0$ ($\varphi(0) > 0$), подставляя квадратичное начальное распределение $\varphi(x) = \bar{c} - A[x - \ell_0]^2$ в условие мягкого старта $\dot{q}(0) = 0$:

$$A = \ell_0^{-2} \left(\bar{c} + \ell_0^{-1} D g^2 b^{-1} \left(1 - \sqrt{\bar{c} \ell b D^{-1} g^{-2} + 1} \right) \right) \Big|_{T_0}.$$

Задаем типы дефектов, соответствующие коэффициенты a_ν и начальные распределения $\psi_\nu(x)$. На $(k+1)$ -м слое по времени ($k \geq 0$) алгоритм вычислений следующий.

1. Вычисляем по слою значения $\tilde{Z}_{i,\nu}^{k+1}$ из уравнения (5).
2. В соответствии с соотношениями (6), (7) прямым ходом прогонки вычисляем наборы коэффициенты α , β , γ .
3. Значения концентрации в граничных узлах определяем, решая квадратное уравнение относительно $y = c_N^{k+1} = c_0^{k+1} > 0$.
4. Обратным ходом прогонки по формуле (7) находим приближенные значения концентрации во всех внутренних узлах.
5. Вычисляем значения концентрации в дефектах из второго уравнения разностной схемы в объеме по формуле

$$z_{i,\nu}^{k+1} = z_{i,\nu}^k + \frac{\hat{a}_{k,\nu}^- \left[(1 - Z_{i,\nu}^k) c_i^k + (1 - \tilde{Z}_{i,\nu}^{k+1}) c_i^{k+1} \right] - 2\hat{a}_{k,\nu}^+ z_{i,\nu}^k}{\hat{a}_{k,\nu}^+ + 2\tau^{-1}}$$

6. Коррекция $\tilde{Z}_{i,\nu}^{k+1}$ состоит в том, что теперь можно положить $\tilde{Z}_{i,\nu}^{k+1} = z_{i,\nu}^{k+1} / z_{\max}^\nu$ и повторить вычисления по пунктам 2–5 до установления $\tilde{Z}_{i,\nu}^{k+1} \approx Z_{i,\nu}^{k+1}$ (обычно двух-трех итераций достаточно).

Вычислительные эксперименты показали, что в рассматриваемом диапазоне параметров модели следует отдать предпочтение второму варианту определения p_{k+1} (по критерию мате-

риального баланса на отрезке времени проведения эксперимента).

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

При реализации вычислений, помимо физических соображений, в качестве критерия правильности счета принят материальный баланс:

$$\begin{aligned} & \int_0^\ell [\varphi + \sum \psi_\nu] dx + 2q(0) = \\ & = \int_0^\ell [c(t, x) + \sum z_\nu(t, x)] dx + 2q(t) + 2 \int_0^\ell J(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

Из-за большого разброса порядков величин проводилось масштабирование: $x = \ell \hat{x}$, $\hat{x} \in [0, 1]$, $\hat{c} = c/\bar{c} \in [0, 1]$, $\hat{z} = z/\bar{c}$, $\hat{q} = \hat{c}_{0,1}/(g\ell)$, $\hat{D} = D/\ell^2$, $\hat{J} = b\hat{q}^2$, $\hat{b} = b\bar{c}\ell$, $\hat{\mu} = \mu/(\bar{c}\ell)$. В экспериментальной практике ℓ обычно в пределах $10^{-2} - 10^{-1}$ см, $p \sim 0.1 - 10$ торр. Ограничимся $\bar{c} \sim 10^{16} - 10^{19}$ 1/cm³, $\bar{z} \sim 10^{14} - 10^{21}$ 1/cm³. Поверхность считаем изотропной: $g \sim 10^{-3} - 100$ ($g \approx k^-/k^+$, $E_g \approx 0$). Укажем рассмотренные диапазоны аррениусовских параметров:

Диапазоны аррениусовских параметров

Параметр	Диапазон	Предэкспонента	E, кДж/моль
D , см ² /с	$10^{-10} - 10^{-3}$	$10^{-3} - 10^{-1}$	10–40
b , см ² /с	$10^{-25} - 10^{-4}$	$10^{-4} - 2 \cdot 10^{-1}$	50–120
s	$10^{-10} - 10^{-1}$	$10^{-3} - 2 \cdot 10^{-1}$	0–40
a , 1/с	$10^{-6} - 10^{-1}$	$10^{-3} - 2 \cdot 10^{-1}$	0–20

Результаты численного моделирования (рис. 1–8) полностью соответствуют физическим представлениям. Общие значения параметров: $\ell = 10^{-2}$, $\bar{c} = 10^{18}$, $T_0 = 300$ К, $b_0 = 10^{-3}$, $E_b = 90$, $D_0 = 10^{-2}$, $g_0 = 100$, $E_g = 10^{-4}$, $s_0 = 10^{-2}$, $E_s = 20$, $\theta_0 = 10^{-3}$, $\theta_1 = 2$. Варьируемые коэффициенты приводятся в порядке следования максимумов графиков слева направо или по их убыванию.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-01-00439).

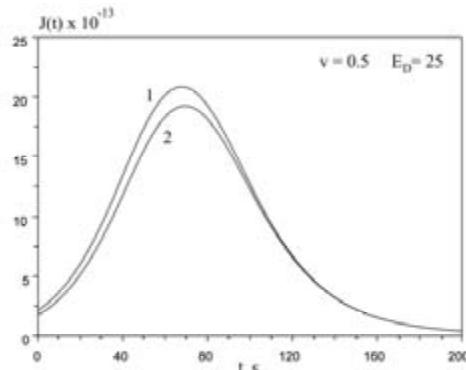


Рис. 1. Начальное распределение: 1 – равномерное,
2 – параболическое

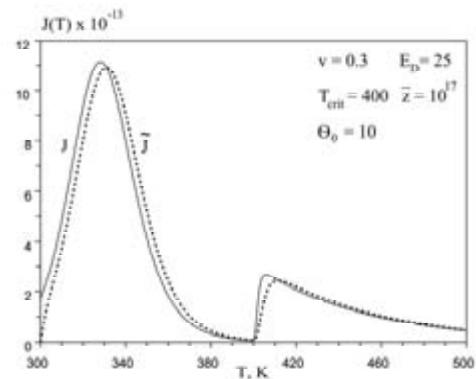


Рис. 2. ТДС-спектры $J(T)$ и $\tilde{J}(T) = p(T)/(\theta_0 \theta_1)$

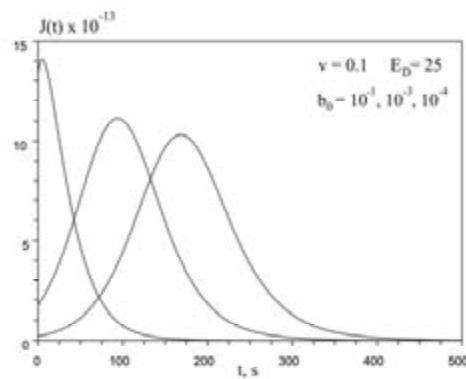


Рис. 3. Влияние параметра b_0

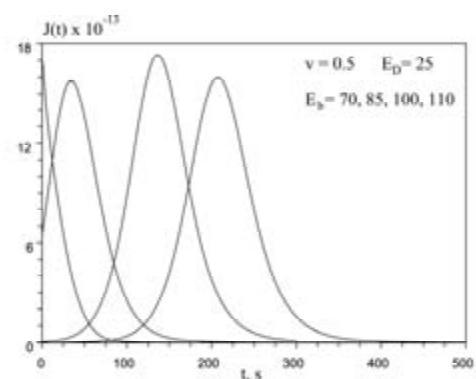


Рис. 4. Влияние параметра E_b

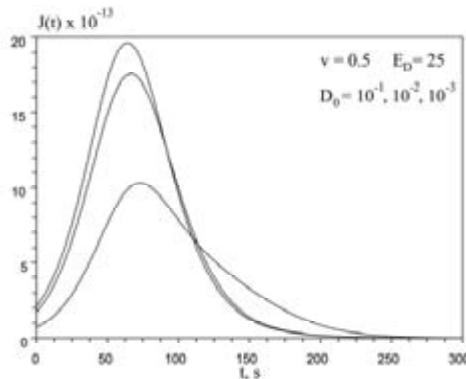


Рис. 5. Влияние параметра D_0

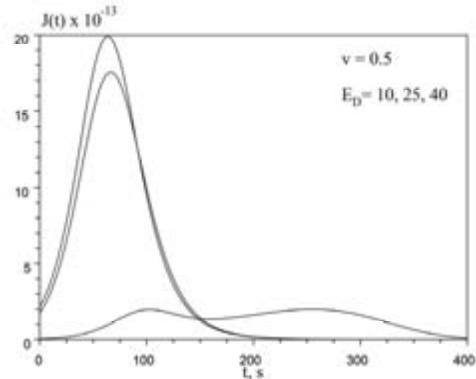


Рис. 6. Влияние параметра E_D

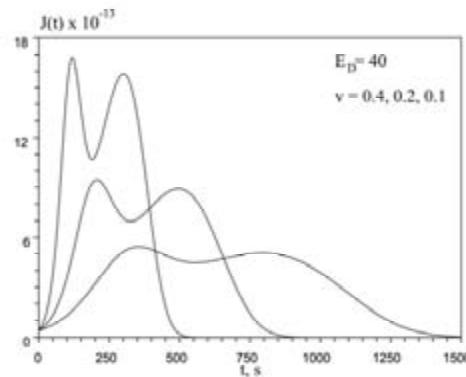


Рис. 7. Влияние скорости нагрева. ТДС-пик (t, J)

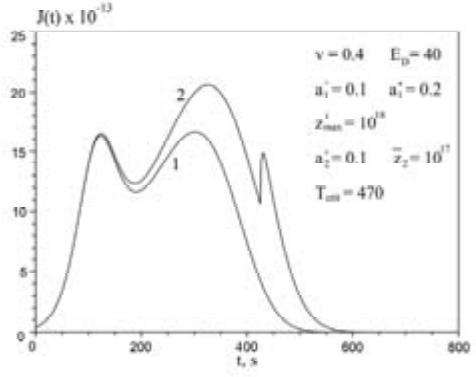


Рис. 8. Влияние дефектов: 1 – без дефектов,
2 – с дефектами двух типов

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бекман И. Н. Феноменологическое описание диффузии в дефектных средах // Взаимодействие водорода с металлами / Под ред. А. П. Захарова. М.: Наука, 1987. С. 143–177.
2. Власова Е. А., Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Приближенные методы математической физики. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. 700 с.
3. Водород в металлах: Пер. с англ.; В 2 т. / Под ред. Г. Алефельда, В. Фелькля. М.: Мир, 1981.
4. Габис И. Е., Компаниец Т. Н., Курдюмов А. А. Поверхностные процессы и проникновение водорода сквозь металлы // Взаимодействие водорода с металлами / Под ред. А. П. Захарова. М.: Наука, 1987. С. 177–206.
5. Гидридные системы: Справочник / Авторы: Колачев Б. А., Ильин А. А., Лавренко В. А., Левинский Ю. В. М.: Металлургия, 1992. 352 с.
6. Заика Ю. В. Параметрическая регуляризация модели водородопроницаемости с динамическими граничными условиями // Математическое моделирование. 2001. Т. 13. № 11. С. 69–87.
7. Мартинсон Л. К., Малов Ю. И. Дифференциальные уравнения математической физики. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2002. 368 с.
8. Проблемы дегазации металлов / Авторы: Кунин Л. Л., Головин А. И., Суровой Ю. И., Хохрин В. М. М.: Наука, 1972. 324 с.
9. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
10. Zaika Yu. V. Identification of a hydrogen transfer model with dynamical boundary conditions // Int. J. of Mathematics and Mathematical Sciences. 2004. № 4. P. 195–216.