Труды Карельского научного центра РАН
№ 5. 2011. С. 97–102

УДК 519.6:539.2

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ ДЕФЕКТА ЗАЩИТНОГО ПОКРЫТИЯ

Н. И. Родченкова, Е. К. Костикова

Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН

Рассматривается водородопроницаемость цилиндрической перегородки при наличии на входной поверхности дефекта защитного покрытия. Для различных конструкционных материалов, когда лимитирующими являются процессы диффузии и десорбции, представлены соответствующие математические модели в форме краевых задач с условиями I рода и нелинейными динамическими граничными условиями. Разработана разностная схема для численного моделирования проникающего потока.

Ключевые слова: водородопроницаемость, нелинейные краевые задачи, разностные схемы.

N. I. Rodchenkova, E. K. Kostikova. DIFFERENCE SCHEME FOR THE BOUNDARY-VALUE PROBLEM OF HYDROGEN PERMEABILITY IN THE PRESENCE OF PROTECTIVE COATING DEFECT

We consider the permeability of cylindrical barrier to hydrogen in the presence of protective coating defect on the inlet surface. For different structural materials, when diffusion and desorption are the limiting processes, corresponding mathematical models in the form of boundary-value problems with first-type conditions and nonlinear dynamic boundary conditions are presented. The difference scheme for numerical modelling of the permeation flux has been developed.

Key words: hydrogen permeability, nonlinear boundary-value problems, difference schemes.

Постановка задачи

Снижение проникновения водорода и его изотопов сквозь стенки из конструкционных материалов является важнейшей задачей при решении комплексных проблем хранения и транспортировки водорода, защиты от водородного охрупчивания, контроля содержания трития в защитных системах будущих термоядерных реакторов (проект ITER). Конструкция из металла или сплава обеспечивает необходимую механическую прочность перегородки, а нанесенное защитное покрытие должно препятствовать миграции изотопов водорода. Дефекты защитной пленки могут подвергать соответствующую область конструкционного материала прямому воздействию водорода [Писарев и др., 2008]. В статье [Zajec, 2011] поставлена задача математического моделирования водородопроницаемости цилиндрического образца радиуса L и высоты

H в случае, когда диффузия является единственным лимитирующим процессом. На входной поверхности $z = 0$, покрытой тонкой защитной пленкой, присутствует дефект малого радиуса r_0 (булавочное отверстие), через который проникает водород. Остальная часть входной поверхности водородонепроницаема, как и боковая поверхность. На выходной стороне $z = H$ поддерживается вакуум. В начальный момент времени $t = 0$ образец обезводорожен. Затем на входной стороне скачкообразно повышается давление молекулярного водорода до уровня p. Если пренебречь относительно быстрым (это зависит от p, материала и размеров образца) переходным процессом, то можно считать, что концентрация растворенного водорода под дефектом поддерживается на постоянном уровне c_0 (находится в равновесии с газообразной фазой по закону Сивертса, $c_0 \propto \sqrt{p}$). Растворенный (атомарный) водород диффундирует к выходной поверхности. С помощью масс-спектрометра регистрируется проникающий поток.

Аналитический анализ краевой задачи без учета поверхностных процессов проведен лишь для случая полупространства ($r \to +\infty$) [Warrick et al., 1992; Rajendran, Sangaranarayanan, 1995]. Основным недостатком такой постановки задачи является то, что поверхностные процессы, которым в последнее время уделяется повышенное внимание, в модели не учитываются.

Цель работы — построить разностную схему для моделей водородопроницаемости цилиндрического образца заданных размеров при наличии дефекта как без учета, так и с учетом влияния поверхности.

Диффузионная модель

Рассмотрим краевую задачу водородопроницаемости цилиндрической перегородки только с учетом диффузии в объеме:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right), \qquad (1)$$

$$r \in (0, L),\ z \in (0, H),\ t \in (0, t_*),$$

$$c(t, r, 0) = c_0, \quad r \in [0, r_0],\ r_0 < L, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial z}(t, r, 0) = 0, \quad r \in (r_0, L],\ t \geqslant 0, \qquad (3)$$

$$c(t, r, H) = 0, \quad r \in [0, L],\ t \geqslant 0, \qquad (4)$$

$$\frac{\partial c}{\partial r}(t, L, z) = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial r}(t, +0, z) = 0, \qquad (5)$$

$$c(0, r, z) = 0, \quad r \in [0, L],\ z \in [0, H].$$

Здесь $c(t, r, z)$ – концентрация атомарного водорода в конструкционном материале (металле или сплаве); D – коэффициент диффузии. Момент времени t_* определяется выходом проникающего потока на стационарное значение. Следует отметить, что установление носит асимптотический характер. Но t_* не следует выбирать слишком большим, чтобы переходные процессы «не потерялись» на фоне стационара. Условие $c_r(t, +0, z)$ следует из симметрии распределения $c(t, r, z)$.

Уточнение поставки задачи. Цель состоит в разработке разностной схемы для моделирования потока водорода с выходной поверхности цилиндрического образца:

$$J(t) = -D \int_0^L \frac{\partial c}{\partial z}\Big|_{z=H} 2\pi r\, dr.$$

Изменения выражения $J(t)$ с учетом рекомбинации атомов водорода в молекулы на поверхности (в приповерхностном объеме) приведены в последующих разделах статьи.

Численное моделирование позволяет выявить особенности кинетики проникновения водорода и оценить влияние параметров модели, включая размеры образца и дефекта.

Разностная аппроксимация краевой задачи

Будем следовать методике, разработанной для задачи термодесорбции [Родченкова, Заика, 2010]. Следуя стандартной технике [Самарский, 1971], введем пространственную сетку

$$\Omega_h = \left\{(r_i, z_j) \,\middle|\, \begin{matrix} r_i = i\, h_r,\ i = 0, 1, ..., N_1 = [L/h_r] \\ z_j = j\, h_z,\ j = 0, 1, ..., N_2 = [H/h_z] \end{matrix}\right\}$$

и сетку по времени

$$\omega_\tau = \{\, t_k = k\tau,\ k = 0, 1, ..., K = [t_*/\tau]\}.$$

Обозначим через $c^k_{i,j}$ приближенные значения объемной концентрации $c(t_k, r_i, z_j)$. При переходе с k на $k+1$ слой по времени будем использовать следующие обозначения, опуская номер слоя по времени: $c_{i,j} = c^k_{i,j}$, $\bar{c}_{i,j} = c^{k+1/2}_{i,j}$, $\hat{c}_{i,j} = c^{k+1}_{i,j}$, где $(r_i, z_j) \in \Omega_h$, $t_k \in \omega_\tau$. Для уравнения (1) рассмотрим неявную разностную схему метода переменных направлений, называемую продольно-поперечной (схемой Писмена-Рэкфорда) [Косарев, 2000]. Переход от слоя k к слою $k+1$ осуществляется в два этапа. На первом этапе определяются промежуточные значения $\bar{c}_{i,j}$ из соотношений

$$\frac{\bar{c}_{i,j} - c_{i,j}}{0{,}5\,\tau D} = \frac{c_{i,j-1} - 2\,c_{i,j} + c_{i,j+1}}{h_z^2} + \frac{\bar{c}_{i-1,j} - 2\,\bar{c}_{i,j} + \bar{c}_{i+1,j}}{h_r^2} + \frac{\bar{c}_{i+1,j} - \bar{c}_{i-1,j}}{2\,r_i h_r}.$$

На втором этапе, пользуясь найденными $\bar{c}_{i,j}$, находим $\hat{c}_{i,j}$ из соотношений

$$\frac{\hat{c}_{i,j} - \bar{c}_{i,j}}{0,5\,\tau D} = \frac{\hat{c}_{i,j-1} - 2\,\hat{c}_{i,j} + \hat{c}_{i,j+1}}{h_z^2} + \frac{\bar{c}_{i-1,j} - 2\,\bar{c}_{i,j} + \bar{c}_{i+1,j}}{h_r^2} + \frac{\bar{c}_{i+1,j} - \bar{c}_{i-1,j}}{2\,r_i h_r}. \quad (6)$$

Данные соотношения рассматриваются во внутренних узлах сетки ($i = 2, ..., N_1 - 1$, $j = 1, ..., N_2 - 1$). Суммарная погрешность аппроксимации $O(\tau^2 + h_r^2 + h_z^2)$.

Прогонка по радиусу r

Рассмотрим переход с k-го на $(k + 1/2)$-й слой. В обозначениях

$$A_i = \frac{1-[2i]^{-1}}{\varkappa},\ B_i = \frac{1+[2i]^{-1}}{\varkappa},\ \varkappa = 2\Big[1+\frac{h_r^2}{D\tau}\Big],$$

$$F_{i,j} = \Big(\frac{h_r}{h_z}\Big)^2 \cdot \frac{c_{i,j-1} - 2c_{i,j} + c_{i,j+1}}{\varkappa} + \Big[1-\frac{2}{\varkappa}\Big] c_{i,j}$$

при каждом фиксированном $j = 1, 2, \ldots, N_2-1$ получаем при $k \geqslant 0$

$$A_i \bar{c}_{i-1,j} - \bar{c}_{i,j} + B_i \bar{c}_{i+1,j} + F_{i,j} = 0.$$

Значения в начальный момент времени (на нулевом слое) известны: $c^0_{i,j} = 0$. Следуя методу прогонки, ищем приближенные значения концентрации в узлах сетки на $(k + 1/2)$-м слое ($k \geqslant 0$) по времени в виде

$$\bar{c}_{i,j} = \alpha_{i+1,j}\,\bar{c}_{i+1,j} + \beta_{i+1,j},\ \ i = 0, ..., N_1 - 1. \quad (7)$$

Прогоночные коэффициенты: $i = 2, 3, \ldots, N_1$,

$$\alpha_{i,j} = \frac{B_{i-1}}{1-A_{i-1}\,\alpha_{i-1,j}},\ \ \beta_{i,j} = \frac{F_{i-1,j} + A_{i-1}\,\beta_{i-1,j}}{1 - A_{i-1}\alpha_{i-1,j}}.$$

При $r \to +0$ имеем

$$c_r/r = (c_r(t, r, z) - c_r(t, 0, z))/r \approx c_{rr}.$$

Начальные коэффициенты $\alpha_{1,j}$, $\beta_{1,j}$ находим из аппроксимации уравнения $c_t = D(2c_{rr} + c_{zz})$ на $(k + 1/2)$-м слое, $i = 1$, и условия $c_r|_{+0} = 0$: $\alpha_{1,j} = (6 - \varkappa)/4$, $\beta_{1,j} = F_{1,j}\,\varkappa/4$.

Ближайшая цель — найти значение $\bar{c}_{N_1,j}$, необходимое для реализации обратного хода прогонки. Запишем аппроксимацию первого из граничных условий (5) ($r = L$). В граничном узле с точностью до $O(h_r^2)$ имеем:

$$2h_r c_r(t_{k+1/2}, L, z_j) \approx \bar{c}_{N_1-2,j} - 4\bar{c}_{N_1-1,j} + 3\bar{c}_{N_1,j}.$$

Подставляя значения $\bar{c}_{N_1-2,j}$, $\bar{c}_{N_1-1,j}$ из соотношения (7), имеем

$$\bar{c}_{N_1,j} = \frac{\beta_{N_1,j}(4 - \alpha_{N_1-1,j}) - \beta_{N_1-1,j}}{3 + \alpha_{N_1,j}(\alpha_{N_1-1,j} - 4)}.$$

По формуле (7) определяем искомые значения $\bar{c}_{i,j}$, $i = 0, \ldots, N_1 - 1$, $j = 1, \ldots, N_2 - 1$.

Теперь найдем оставшиеся приближения $\bar{c}_{i,j}$ при $j = 0$ и $j = N_2$, $i = 0, 1, \ldots, N_1$. Значения $\bar{c}_{i,N_2} = 0$ согласно граничному условию (4) ($z = H$). Обозначим $i_0 = \max\{i : r_i \leqslant r_0\}$. Тогда из граничных условий (2), (3) ($z = 0$) получаем соотношения $\bar{c}_{i,0} = c_0$, $i = 0, 1, \ldots, i_0$ и $\bar{c}_{i,0} = (4\bar{c}_{i,1} - \bar{c}_{i,2})/3$, $i = i_0 + 1, \ldots, N_1$.

Прогонка по переменной z

Поскольку в цилиндрических координатах возникает особенность при $r \to +0$, и на границе $z = 0$, задано смешанное краевое условие, то переход с $(k + 1/2)$-го слоя на $(k + 1)$-й совершается в два шага.

Первый шаг: $i = 1$, $r \to +0$ (аппроксимируем $c_r/r \approx c_{rr}$), реализуется алгоритм прогонки для уравнения $c_t = D(2c_{rr} + c_{zz})$.

Второй шаг: $i = 2, \ldots, N_1-1$, $r > 0$, прогонка для уравнения $c_t = D(c_{rr} + c_r/r + c_{zz})$.

Аппроксимация уравнения $c_t = D(2c_{rr} + c_{zz})$:

$$\frac{\hat{c}_{1,j} - \bar{c}_{1,j}}{0{,}5\,\tau D} = \frac{\hat{c}_{1,j-1} - 2\,\hat{c}_{1,j} + \hat{c}_{1,j+1}}{h_z^2} + 2\,\frac{\bar{c}_{0,j} - 2\,\bar{c}_{1,j} + \bar{c}_{2,j}}{h_r^2}.$$

В обозначениях $G = 2(1 + h_z^2/[D\tau])$,

$$\bar{F}_{1,j} = 2\Big(\frac{h_z}{h_r}\Big)^2 \big(\bar{c}_{0,j} - 2\bar{c}_{1,j} + \bar{c}_{2,j}\big) + (G-2)\bar{c}_{1,j}$$

получаем

$$\hat{c}_{1,j-1} - G\,\hat{c}_{1,j} + \hat{c}_{1,j+1} + \bar{F}_{1,j} = 0,\ \ k \geqslant 0. \quad (8)$$

Ищем приближенные значения концентрации на $(k+1)$-м слое по времени в виде: $k \geqslant 0$,

$$\hat{c}_{1,j} = \alpha_{1,j+1}\,\hat{c}_{1,j+1} + \beta_{1,j+1},\ j = 0, 1, ..., N_2-1. \quad (9)$$

Прогоночные коэффициенты: $j = 2, 3, \ldots, N_2$,

$$\alpha_{1,j} = \frac{1}{G - \alpha_{1,j-1}},\ \ \beta_{1,j} = \frac{\bar{F}_{1,j-1} + \beta_{1,j-1}}{G - \alpha_{1,j-1}}.$$

Начальные коэффициенты $\alpha_{1,1}$, $\beta_{1,1}$ находим из формулы (9) при $j = 0$ и условия (2) ($\hat{c}_{1,0} = c_0$): $\alpha_{1,1} = 0$, $\beta_{1,1} = c_0$.

Для разностного соотношения (6) в обозначениях

$$\bar{F}_{i,j} = \Big(\frac{h_z}{h_r}\Big)^2 \Big[\Big(1 - \frac{1}{2i}\Big)\bar{c}_{i-1,j} - 2\Big(1 - \frac{h_r^2}{D\tau}\Big)\bar{c}_{i,j} + \Big(1 + \frac{1}{2i}\Big)\bar{c}_{i+1,j}\Big]$$

при каждом $i = 2, 3, \ldots, N_1 - 1$ получаем

$$\hat{c}_{i,j-1} - G\hat{c}_{i,j} + \hat{c}_{i,j+1} + \bar{F}_{i,j} = 0, \ \ k \geqslant 0. \quad (10)$$

Ищем значения концентрации в узлах сетки на $(k+1)$-м слое по времени в виде: $k \geqslant 0$,

$$\hat{c}_{i,j} = \alpha_{i,j+1}\, \hat{c}_{i,j+1} + \beta_{i,j+1}, \ j = 0, 1, ..., N_2 - 1. \quad (11)$$

Прогоночные коэффициенты: $j = 2, 3, \ldots, N_2$,

$$\alpha_{i,j} = \frac{1}{G - \alpha_{i,j-1}}, \ \ \beta_{i,j} = \frac{\bar{F}_{i,j-1} + \beta_{i,j-1}}{G - \alpha_{i,j-1}}.$$

Начальные коэффициенты при $r \leqslant r_0$ $(i \leqslant i_0)$ находим из (11) при $j = 0$ и условия (2): $\alpha_{i,1} = 0$, $\beta_{i,1} = c_0$. Начальные коэффициенты при $r > r_0$ $(i > i_0)$ определяем из (10) при $j = 1$ и условия (3): $\alpha_{i,1} = 2 - G/2$, $\beta_{i,1} = \bar{F}_{i,1}/2$.

Граничные значения, необходимые для реализации обратного хода метода прогонки, находим из условия (4): $\hat{c}_{i,N_2} = 0$. По формулам (9), (11) вычисляем $\hat{c}_{i,j}$, $i = 1, \ldots, N_1 - 1$, $j = 0, \ldots, N_2 - 1$.

Найдем оставшиеся приближения $\hat{c}_{i,j}$ при $i = 0$ и $i = N_1$, $j = 0, 1, \ldots, N_2$. Используя второе из граничных условий (5) $(c_r|_{+0} = 0)$, получаем $\hat{c}_{0,j} = (4\hat{c}_{1,j} - \hat{c}_{2,j})/3$. Согласно первому условию (5) $\hat{c}_{N_1,j} = (4\hat{c}_{N_1-1,j} - \hat{c}_{N_1-2,j})/3$.

Модификация модели с учетом объемной десорбции

Вместо краевых условий (2), (4) используем

$$\mu sp - bc^2(t,r,0) = -D\,\frac{\partial c}{\partial z}\Big|_{z=0}, \ \ r \in [0, r_0], \quad (12)$$

$$bc^2(t,r,H) = -D\frac{\partial c}{\partial z}\Big|_{z=H}, \ \ r \in [0, L], \quad (13)$$

$$J(t) = \int_0^L b\, c^2(t,r,H)\ 2\pi r\, dr.$$

Здесь b — коэффициент объемной десорбции (эффективной рекомбинации [Писарев и др., 2008]), μ — кинетическая константа, p — давление молекулярного водорода, s — коэффициент прилипания водорода к поверхности. При необходимости можно учесть различие входной и выходной поверхностей: $b = b_1$ при $z = 0$ и $b = b_2$ при $z = H$.

1. Метод встречных прогонок. Рассмотрим переход с $(k+1/2)$-го слоя на $(k+1)$-й. Для соотношений (8), (10), используя метод встречных прогонок [Самарский, Николаев, 1978], будем искать приближенные значения концентрации в следующем виде $(i = 1, \ldots, i_0,\ k \geqslant 0)$:

$$\hat{c}_{i,j} = \alpha_{i,j+1}\, \hat{c}_{i,j+1} + \beta_{i,j+1} + \gamma_{i,j+1}\, \hat{c}_{i,0}, \quad j = 0, 1, \ldots, N_2 - 1;$$

$$\hat{c}_{i,j} = \hat{\alpha}_{i,j-1}\, \hat{c}_{i,j-1} + \hat{\beta}_{i,j-1} + \hat{\gamma}_{i,j-1}\, \hat{c}_{i,N_2}, \quad j = 1, 2, \ldots, N_2.$$

Прогоночные коэффициенты:

$$\alpha_{i,j+1} = (G - \alpha_{i,j})^{-1}, \qquad \hat{\alpha}_{i,j-1} = \alpha_{i,N_2-(j-1)},$$
$$\beta_{i,j+1} = (\beta_{i,j} + \bar{F}_{i,j})\alpha_{i,j+1}, \quad \hat{\beta}_{i,j-1} = (\hat{\beta}_{i,j} + \bar{F}_{i,j})\hat{\alpha}_{i,j-1},$$
$$\gamma_{i,j+1} = \gamma_{i,j}\alpha_{i,j+1}, \qquad \hat{\gamma}_{i,j-1} = \gamma_{i,N_2-(j-1)}.$$

Отметим, что выражения для величин $\bar{F}_{1,j}$ и $\bar{F}_{i,j}$, $i > 1$, различны. Начальные прогоночные коэффициенты: $\alpha_{i,1} = \beta_{i,1} = \hat{\beta}_{i,N_2-1} = 0$, $\gamma_{i,1} = 1$.

В обозначениях $\Delta = \alpha_{i,N_2-1} - 4$,

$$\mathbb{A} = 3 + \alpha_{i,N_2}\Delta, \qquad \mathbb{B} = \beta_{i,N_2-1} + \beta_{i,N_2}\Delta,$$
$$\hat{\mathbb{B}} = \hat{\beta}_{i,1} + \hat{\beta}_{i,0}\Delta, \qquad \mathbb{G} = \gamma_{i,N_2-1} + \gamma_{i,N_2}\Delta$$

получаем аппроксимацию граничных условий (12), (13) с точностью до $O(h_z^2)$ в виде

$$\begin{cases} \dfrac{2h_z}{D}\, b\, \hat{c}_{i,0}^2 + \mathbb{A}\hat{c}_{i,0} + \Big[\mathbb{G}\hat{c}_{i,N_2} + \hat{\mathbb{B}} - \dfrac{2h_z}{D}\mu sp\Big] = 0, \\ \dfrac{2h_z}{D}\, b\, \hat{c}_{i,N_2}^2 + \mathbb{A}\hat{c}_{i,N_2} + \big[\mathbb{G}\hat{c}_{i,0} + \mathbb{B}\big] = 0. \end{cases}$$

Система уравнений имеет единственное решение $\hat{c}_{i,0} > 0$, $\hat{c}_{i,N_2} > 0$, по крайней мере, при малых $h_r \sim h_z$ (сравнимых по порядку).

Осталось получить значения концентрации $\hat{c}_{i,j}$ при $i > i_0$. Изменения коснутся лишь границы $z = H$. В объеме выполняется соотношение (10), прогоночные коэффициенты остаются без изменений. Модификация появляется после выполнения прямого хода прогонки. Для нахождения $\hat{c}_{i,N_2}$ аппроксимируем (13) с точностью до $O(h_z^2)$ и используем (11):

$$2h_z bD^{-1}\hat{c}_{i,N_2}^2 + \mathbb{A}\hat{c}_{i,N_2} + \mathbb{B} = 0,$$

где $i > i_0$, $\mathbb{A} = 3 + \alpha_{i,N_2}\Delta$, $\mathbb{B} = \beta_{i,N_2-1} + \beta_{i,N_2}\Delta$, $\Delta = \alpha_{i,N_2-1} - 4$. При малых $h_r \sim h_z$ корни квадратного уравнения имеют разные знаки, по физическому смыслу задачи выбираем положительный.

При переходе с k-го на $(k+1/2)$-й слой оставшиеся граничные значения $\bar{c}_{i,0}$, $\bar{c}_{i,N_2}$ для $i = 0, ..., N_1$ определяются как положительные корни квадратных уравнений, полученных после подстановки в (12), (13) выражений

$$\bar{c}_z(t, r_i, 0) \approx \frac{-\bar{c}_{i,2} + 4\bar{c}_{i,1} - 3\bar{c}_{i,0}}{2h_z}, \quad (14)$$

$$\bar{c}_z(t, r_i, H) \approx \frac{\bar{c}_{i,N_2-2} - 4\bar{c}_{i,N_2-1} + 3\bar{c}_{i,N_2}}{2h_z},$$

где $\bar{c}_{i,1}$, $\bar{c}_{i,2}$, $\bar{c}_{i,N_2-1}$, $\bar{c}_{i,N_2-1}$ уже известны по результатам прогонки по r.

2. Итерационный метод. На $(k+1)$-м слое по времени аппроксимируем $c_z(t_{k+1}, r, 0) \approx [-3\hat{c}_{i,0} + 4\hat{c}_{i,1} - \hat{c}_{i,2}]/2h_z$. Подставляя в граничное условие (12) при $z = 0$, находим $\hat{c}_{i,0} = f_0(\hat{c}_{i,1}, \hat{c}_{i,2})$ как положительный корень квадратного уравнения. Аналогичным образом определяем $\hat{c}_{i,N_2} = f_{N_2}(\hat{c}_{i,N_2-1}, \hat{c}_{i,N_2-2})$ как положительный корень из (13) при $z = H$. Значения $\hat{c}_{i,1}$, $\hat{c}_{i,2}$, $\hat{c}_{i,N_2-1}$, $\hat{c}_{i,N_2-2}$ предварительно подсчитываются по явной разностной схеме, аппроксимирующей уравнение диффузии (1). С текущими $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ решаем методом прогонки по переменной z трехдиагональную систему линейных алгебраических уравнений и находим новые приближения концентраций $\hat{c}_{i,1}$, $\hat{c}_{i,2}$, $\hat{c}_{i,N_2-1}$, $\hat{c}_{i,N_2-2}$ (и остальные значения $\hat{c}_{i,j}$ для $j = 3, \ldots, N_2 - 3$, $i = 0, ..., i_0$). Снова решаем квадратные уравнения относительно $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ и повторяем вычисления до установления граничных значений (обычно 2–3 итерации). Нахождение приближений $\hat{c}_{i,j}$ при $i > i_0$ описано в предыдущем пункте. Затем переходим к следующему слою по времени.

Модификация модели с учетом поверхностной десорбции

Вместо условий (2), (4) используем

$$\frac{\partial q_0}{\partial t} = \mu sp - bq_0^2(t,r) + D\frac{\partial c}{\partial z}\Big|_0, \; r \in [0, r_0], \quad (15)$$

$$\frac{\partial q_H}{\partial t} = -bq_H^2(t,r) - D\frac{\partial c}{\partial z}\Big|_{z=H}, \; r \in [0, L], \quad (16)$$

$$c(t,r,0) = gq_0(t,r), \; c(t,r,H) = gq_H(t,r),$$

$$J(t) = \int_0^L b\, q_H^2(t,r)\; 2\pi r\, dr.$$

Здесь q_0, q_H — поверхностные концентрации на входной и выходной поверхности, $g = \mathrm{const}$ — коэффициент соответствия концентраций атомов водорода в объеме и на поверхности (коэффициент быстрого растворения).

1. Метод встречных прогонок. Остановимся на вычислении граничных концентраций $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$, $i \leqslant i_0$. Чтобы сохранить порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h_z^2)$, для краевых условий (15), (16), будем использовать схему с весами:

$$\frac{\hat{c}_{i,0} - c_{i,0}}{g\tau} = \sigma\Big[\mu sp - b\Big(\frac{\hat{c}_{i,0}}{g}\Big)^2 + D\partial_z\hat{c}_{i,0}\Big] + (1-\sigma)\Big[\mu sp - b\Big(\frac{c_{i,0}}{g}\Big)^2 + D\partial_z c_{i,0}\Big],$$

$$\frac{\hat{c}_{i,N_2} - c_{i,N_2}}{g\tau} = \sigma\Big[-b\Big(\frac{\hat{c}_{i,N_2}}{g}\Big)^2 - D\partial_z\hat{c}_{i,N_2}\Big] + (1-\sigma)\Big[-b\Big(\frac{c_{i,N_2}}{g}\Big)^2 - D\partial_z c_{i,N_2}\Big].$$

Здесь $\partial_z c_{i,0}$, $\partial_z c_{i,N_2}$ определяются выражениями, аналогичными (14). В дальнейшем полагаем $\sigma = 1/2$. Как и в модификации модели для объемной десорбции (сохраняя обозначения), нахождение $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ сводится к решению системы квадратных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{b}{g^2}\hat{c}_{i,0}^2 + \Big(\dfrac{D\mathbb{A}}{2h_z} + \dfrac{2}{g\tau}\Big)\hat{c}_{i,0} + \dfrac{D\mathbb{G}}{2h_z}\hat{c}_{i,N_2} + C_1 = 0, \\[2ex] \dfrac{b}{g^2}\hat{c}_{i,N_2}^2 + \Big(\dfrac{D\mathbb{A}}{2h_z} + \dfrac{2}{g\tau}\Big)\hat{c}_{i,N_2} + \dfrac{D\mathbb{G}}{2h_z}\hat{c}_{i,0} + C_2 = 0, \end{cases}$$

$$C_1 \equiv \frac{D\hat{\mathbb{B}}}{2h_z} + \frac{b}{g^2}c_{i,0}^2 - \frac{2}{g\tau}c_{i,0} - D\partial_z c_{i,0} - 2\mu sp,$$

$$C_2 \equiv \frac{D\mathbb{B}}{2h_z} + \frac{b}{g^2}c_{i,N_2}^2 - \frac{2}{g\tau}c_{i,N_2} + D\partial_z c_{i,N_2}.$$

Все значения $c_{i,j}$ на k-м слое известны.

2. Итерационный метод. Для краевых условий (15), (16) используется схема с весами (при $t = t_{k+1/2} + \tau/4$ порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h_z^2)$):

$$\frac{\hat{c}_{i,0} - \bar{c}_{i,0}}{0{,}5\,\tau g} = 0{,}5\Big[\mu sp - b\Big(\frac{\hat{c}_{i,0}}{g}\Big)^2 + D\partial_z\hat{c}_{i,0}\Big] + 0{,}5\Big[\mu sp - b\Big(\frac{\bar{c}_{i,0}}{g}\Big)^2 + D\partial_z\bar{c}_{i,0}\Big],$$

$$\frac{\hat{c}_{i,N_2} - \bar{c}_{i,N_2}}{0{,}5\,\tau g} = 0{,}5\Big[-b\Big(\frac{\hat{c}_{i,N_2}}{g}\Big)^2 - D\partial_z\hat{c}_{i,N_2}\Big] + 0{,}5\Big[-b\Big(\frac{\bar{c}_{i,N_2}}{g}\Big)^2 - D\partial_z\bar{c}_{i,N_2}\Big].$$

Граничные значения $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ $(i \leqslant i_0)$ определяются как положительные корни квадратных уравнений:

$$\frac{b}{g^2}\hat{c}_{i,0}^2 + \Big(\frac{3D}{2h_z} + \frac{4}{g\tau}\Big)\hat{c}_{i,0} + C_1 = 0,$$

$$\frac{b}{g^2}\hat{c}_{i,N_2}^2 + \Big(\frac{3D}{2h_z} + \frac{4}{g\tau}\Big)\hat{c}_{i,N_2} + C_2 = 0,$$

$$C_1 \equiv \frac{D}{2h_z}\big(\hat{c}_{i,2} - 4\hat{c}_{i,1}\big) + \frac{b}{g^2}\bar{c}_{i,0}^2 - \frac{4}{g\tau}\bar{c}_{i,0} - D\partial_z\bar{c}_{i,0} - 2\mu sp,$$

$$C_2 \equiv \frac{D}{2h_z}\big(\hat{c}_{i,N_2-2} - 4\hat{c}_{i,N_2-1}\big) + \frac{b}{g^2}\bar{c}_{i,N_2}^2 + D\partial_z\bar{c}_{i,N_2} - \frac{4}{g\tau}\bar{c}_{i,N_2}.$$

В выражениях, аналогичных (14), значения $\hat{c}_{i,\{1,2\}}$, $\hat{c}_{i,\{N_2-1,N_2-2\}}$ предварительно подсчитываются по явной разностной схеме, аппроксимирующей уравнение диффузии (1). С текущими $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ решаем методом прогонки трехдиагональную систему линейных алгебраических уравнений и находим новые приближения $\hat{c}_{i,\{1,2\}}$, $\hat{c}_{i,\{N_2-1,N_2-2\}}$ (и остальные значения $\hat{c}_{i,j}$, $j = 3, \dots, N_2 - 3$, $i = 0, ..., i_0$). Снова решаем квадратные уравнения относительно $\hat{c}_{i,0}$, $\hat{c}_{i,N_2}$ и повторяем вычисления до установления граничных значений (обычно 2–3 итерации). Для нахождения граничной концентрации $\hat{c}_{i,N_2}$ при $i > i_0$ аппроксимируем (16) с точностью до $O(\tau^2 + h_z^2)$ и используем прогоночные коэффициенты, найденные прямой прогонкой при использовании условия (3):

$$bg^{-2}\hat{c}_{i,N_2}^2 + [D(2h_z)^{-1}\mathbb{A} + 2(\tau g)^{-1}]\hat{c}_{i,N_2} + \mathbb{B} = 0,$$

где $\mathbb{A} = 3 + \alpha_{i,N_2}\Delta$, $\Delta = \alpha_{i,N_2-1} - 4$, $\mathbb{B} = -2\bar{c}_{i,N_2}/(\tau g) + D(\beta_{i,N_2-1} + \beta_{i,N_2}\Delta)/(2h_z)$. При малых h_z, τ корни квадратного уравнения разных знаков, по физическому смыслу задачи выбираем положительный. Вычисленные аппроксимации $c_z(t, r, H)$ в модели (1)–(5); концентрация $c(t, r, H)$ в случае граничных условий (12), (13); поверхностная концентрация $q_H(t, r)$ для модификации модели (15), (16) дают возможность приближенно вычислить $J(t)$.

Заключение

Таким образом, представленный вычислительный алгоритм позволяет по входным данным краевых задач водородопроницаемости (с учетом различных лимитирующих факторов) численно моделировать проникающий поток водорода сквозь перегородку из конструкционного материала при наличии дефекта защитного покрытия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-01-00439).

Литература

Косарев В. И. 12 лекций по вычислительной математике. М.: МФТИ, 2000. 224 с.

Писарев А. А., Цветков И. В., Маренков Е. Д., Ярко С. С. Проницаемость водорода через металлы. М.: МИФИ, 2008. 144 с.

Родченкова Н. И., Заика Ю. В. Численное моделирование десорбции водорода с цилиндрической поверхности // Труды Карельского научного центра РАН. 2010. № 3. С. 72–82.

Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.

Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.

Rajendran L., Sangaranarayanan M. V. A two-point Pade approximation for the non-steady-state chronoamperometric current at ultramicrodisc electrodes // Journal of Electroanalytical Chemistry. Elsevier, 1995. Vol. 392. P. 75–78.

Warrick A. W., Broadbridge P., Lomen D. O. Approximations for diffusion from a disc source // Applied Mathematical Modelling. Elsevier, 1992. Vol. 16. P. 155–161.

Zajec B. Hydrogen permeation barrier – recognition of defective barrier film from transient permeation rate // International Journal of Hydrogen Energy. Elsevier, 2011. Vol. 36. P. 7353–7361.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Родченкова Наталья Ивановна
научный сотрудник, к. ф.-м. н.
Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: nirodchenkova@yandex.ru
тел.: (8142) 766312

Rodchenkova, Natalia
Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia
e-mail: nirodchenkova@yandex.ru
tel.: (8142) 766312

Костикова Екатерина Константиновна
младший научный сотрудник
Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: fedorova@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 766312

Kostikova, Ekaterina
Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia
e-mail: fedorova@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 766312