

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Физико-механический институт  
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите  
Директор ВШТМиМФ,  
д.ф.-м.н., чл.корр. РАН

\_\_\_\_\_ А.М.Кривцов  
«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

## **ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ В ГРАДИЕНТНОЙ УПРУГОЙ СРЕДЕ**

По направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

профиль

01.03.03\_03 Математическое моделирование процессов нефтегазодобычи

Выполнил

студент гр.5030103/80301

М.М.Фролов

Руководитель

Профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

Е.Н. Вильчевская

Санкт-Петербург

2022

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**ПЕТРА ВЕЛИКОГО**  
**Физико-механический институт**  
**Высшая школа теоретической механики и математической физики**

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А.М.Кривцов

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

студенту Фролову Максиму Максимовичу, гр. 5030103/80301

1. Тема работы: Моделирование процесса диффузии в градиентной упругой среде
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 06.06.2022
3. Исходные данные по теме: научные публикации по теме работы. Классические модули (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль объемного сжатия, постоянный коэффициент диффузии) исследуемых материалов.
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Постановка задачи диффузии в градиентной среде, вывод уравнений для исследуемых моделей диффузии, построение численной схемы решения поставленной задачи, анализ результатов.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: отсутствуют
7. Дата выдачи задания 13.05.2022

Руководитель ВКР

Вильчевская Е.Н.

Задание принял к исполнению 13.05.2022

Студент

Фролов М.М.

## РЕФЕРАТ

На 37 с., 20 рисунков, 5 таблиц.

ТЕНЗОДИФФУЗИЯ, ДИФФУЗИЯ, НАСЫЩЕНИЕ ВОДОРОДОМ, НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ, ГРАДИЕНТНАЯ ТЕОРИЯ, ЭФФЕКТ РАЗМЕРА, ДВУХКОМПОНЕНТНАЯ СРЕДА, МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ.

Рассматривается процесс диффузии в градиентной упругой среде. Зависимость напряженно-деформированного состояния от концентрации вводится законом Дюамеля-Неймана. Зависимость диффузии от напряженно-деформированного состояния вводится двумя модификациями коэффициента диффузии: через зависимость от деформации и от давления. Поставленная задача решается численно с применением конечно-разностных схем. Результаты расчета сравниваются с экспериментальными данными.

## ABSTRACT

37 pages, 20 pictures, 5 tables.

TENSODIFFUSION, DIFFUSION, HYDROGEN SATURATION, STRESS-STRAIN STATE, STRAIN GRADIENT THEORY, SIZE EFFECT, TWO-COMPONENT CONTINUUM, FINITE DIFFERENCE METHOD.

We consider the process of diffusion in a gradient elastic continuum. The influence of the stress-strain state on concentration is introduced by Duhamel-Neumann's law. The influence of diffusion on the stress-strain state is introduced by two modifications of the diffusion coefficient: through the function of strain and pressure. The problem is solved numerically by using finite-difference schemes. The calculation results are compared with experimental data.

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>Введение</b>	<b>5</b>
<b>ГЛАВА 1 Постановка задачи</b>	<b>7</b>
1.1 Формулировка задачи . . . . .	7
1.2 Градиентная модель линейно-упругой среды . . . . .	9
1.3 Модели диффузии . . . . .	12
1.3.1 Зависимость коэффициента диффузии от деформации .	13
1.3.2 Зависимость коэффициента диффузии от давления . . .	13
1.4 Граничная задача . . . . .	14
<b>ГЛАВА 2 Построение численной схемы</b>	<b>18</b>
2.1 Разностная схема для уравнения равновесия . . . . .	19
2.2 Разностная схема для уравнения диффузии . . . . .	24
2.3 Заключительные замечания . . . . .	28
<b>ГЛАВА 3 Результаты расчета</b>	<b>29</b>
3.1 Определение параметров модели . . . . .	29
3.2 Сеточная и временная сходимость численного решения . . . . .	31
3.3 Зависимость от параметров . . . . .	35
3.4 Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными	38
<b>Заключение</b>	<b>41</b>
<b>Список использованных источников</b>	<b>42</b>

## Введение

Водород – наиболее распространенное в природе вещество. Он встречается в виде химических соединений, самым очевидным примером которого является вода, присутствует и в газообразной форме. Негативные эффекты, такие как хрупкость, растрескивание и разрушение металлов под действием водорода, достаточно распространены в промышленности. В отличие от других компонентов металлов, предельная допустимая концентрация которых составляет сотые доли процента, водород может оказывать влияние на механические свойства металла уже при концентрации порядка сотых долей. Обеспечение безопасных концентраций водорода при производстве возможно, хоть и представляет в отдельных случаях значительные трудности, однако последующая обработка и эксплуатация изделий во влажном воздухе, в воде или агрессивных водородсодержащих средах приводит к неизбежному увеличению концентрации водорода. Полное исключение влияния водорода на свойства материалов практически невозможно, следовательно необходимо изначально учитывать это влияние на стадии проектирования.

Построение универсальной модели взаимодействия водорода с твердыми телами в целом и металлами в частности для науки в современном её состоянии невозможно, вследствие чего велико разнообразие подходов к изучению влияния водорода на структуру и свойства материалов [10]. Основным способом исследования взаимодействия системы металл-водород является насыщения металлического образца водородом. Зачастую степень и равномерность насыщения при этом не контролируют, что ставит под сомнение надежность экспериментов, проводимых без прямых измерений концентрации. Результаты экспериментов [13, 17] по насыщению стальных образцов в электролите, одному из наиболее широко применяемых методов в промышленном тестировании на устойчивость к водородной хрупкости, показывают, что распределение концентрации в образце существенно неравномерно. В процессе насыщения образуется тонкий пограничный слой, концентрация в котором существенно превышает таковую в глубине образца.

Наиболее вероятной гипотезой, объясняющей данный феномен, является специфическое поведение микроструктуры материала в пограничном слое. Попытка объяснения в таком ключе приводит к необходимости формулировки модели влияния напряженно-деформированного состояния материала на

протекающий в нем процесс диффузии. Исследования процесса диффузии в рамках линейной теории упругости не приводит к желаемому результату, поэтому для описания применяются неклассические модели. Два основных подхода к модификации линейно-упругой среды – это микрополярная теория и градиентная теория. В микрополярной теории в рассмотрение вводятся вращательные степени свободы частиц, в градиентной теории поведение материала на микроуровне связывается градиентом деформации. Исследованию высокой локальной концентрации в микрополярной среде посвящена статья [14], а в рамках данной работы предлагается рассмотреть альтернативный подход с позиций градиентной теории.

Цель настоящей работы заключается в исследовании возможности применения градиентной теории упругости для описания эффекта высокой локальной концентрации, который наблюдается при насыщении металлических образцов.

Задачи, решаемые в ходе работы:

1. построение модели градиентной упругой среды, отвечающей специфике рассматриваемой задачи;
2. выбор и построение двух различных моделей диффузии в деформируемой среде;
3. постановка связанной задачи диффузии в градиентной среде;
4. выбор и реализация метода решения поставленной задачи;
5. сравнение результатов решения с экспериментальными данными.

## ГЛАВА 1. Постановка задачи

Так как для записи векторных и тензорных величин существуют разные нотации, начнем с определения того, что обозначают те или иные выделения величин в формулах. В данной работе для обозначения векторных и тензорных величин используется жирный шрифт, например

$\mathbf{u}$  — вектор перемещений,  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений.

Пояснение к тому, вектором или тензором является каждая конкретная выделенная жирным величина, даются в тексте работы. Для обозначения тензоров высших рангов используется верхний левый индекс

${}^n\mathbf{A}$  — тензор  $n$ -го ранга.

Двойное скалярное умножение тензоров определяется следующим образом

$$\mathbf{A} = \mathbf{ab}, \mathbf{B} = \mathbf{cd}, \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (\mathbf{ab}) \cdot \cdot (\mathbf{cd}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d}).$$

Все остальные скалярные и векторные операции выполняются общепринятым в математике образом.

### 1.1. Формулировка задачи

Рассматривается процесс диффузии водорода в цилиндрическом стальном образце. Изучение явления повышенного насыщения пограничного слоя водородом предлагается рассматривать с позиции движения двухкомпонентной среды сталь-водород, в которой *не происходит* обмена массой между компонентами, то есть водород не оседает в образце и не изменяет его физических свойств.

Предполагается, что среда, в которую помещен образец, имеет постоянную концентрацию водорода как в пространстве, так и во времени. В силу этого можно считать, что на боковой поверхности образца поддерживается постоянная концентрация  $C_{out}$ . Стальной образец предлагается рассматривать как однородную, изотропную, линейно-упругую сплошную среду,

напряженно-деформированное состояние которой описывается градиентной теорией упругости. Изложение данной теории рассматривается в следующем разделе.

Двухкомпонентная среда-сталь водород рассматривается как свободная, движение происходит только за счет *взаимодействия* компонент. Единственная причина напряженно-деформированного состояния, возникающего в стальном образце – концентрация водорода.

При рассмотрении цилиндрического образца логично представить все величины в цилиндрической системе координат  $\{r, \varphi, z\}$ . Начало системы координат расположим в геометрическом центре цилиндра. В силу постоянства концентрации на боковой поверхности образца искомое распределение концентрации изменяется только в радиальном направлении

$$C = C(r, t). \quad (1.1)$$

Вектор перемещений в цилиндрической системе координат имеет вид:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u_r(r, \varphi, z, t)\mathbf{e}_r + u_\varphi(r, \varphi, z, t)\mathbf{e}_\varphi + u_z(r, \varphi, z, t)\mathbf{e}_z,$$

$\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z$  – орты цилиндрической системы координат. Концентрация, единственная из рассматриваемых нагрузок, имеет осесимметричное распределение, поэтому и характеристики напряженно-деформированного предполагаются осесимметричными

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u_r(r, z, t)\mathbf{e}_r + u_z(r, z, t)\mathbf{e}_z.$$

Так как цилиндр достаточно длинный (по сравнению с толщиной), а распределение концентрации от длины не зависит, логично принять гипотезу плоских сечений. Данное предложение дает нам окончательную форму вектора перемещений

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u_r(r, t)\mathbf{e}_r + u_z(z, t)\mathbf{e}_z. \quad (1.2)$$

**Окончательная формулировка задачи:** Исследовать плоское осесимметричное нестационарное распределение (1.1) концентрации водорода в деформируемой среде, представляющей собой однородный изотропный



линейно-упругий цилиндр, поле перемещений которого может быть представлено в виде (1.2), в предположении о том, что на границе образца поддерживается постоянная концентрация и на систему сталь-водород не действуют никакие внешние нагрузки.

## 1.2. Градиентная модель линейно-упругой среды

Для описания напряженно-деформированного состояния образца используется модель градиентной линейно-упругой сплошной среды. Среда Гука позволяет описывать материалы, свойства которых достаточно гладко изменяются как в пространстве, так и во времени. В ней нет никаких параметров, позволяющих учитывать эффекты, влияющие на состояние среды на микроуровне, а для описания процессов, протекающих в телах малых размеров или в достаточно малых областях введение таких параметров необходимо.

В качестве одного из вариантов такой неклассической модели рассматривается градиентная теория, в которой поведение материала на микроуровне связывается с градиентом (или градиентами) деформации, который вводится в модель как независимая переменная. В зависимости от специфики поведения материала и конкретной задачи строятся различные как по количеству, так и по структуре градиентные модели [11]. В данной работе ограничимся рассмотрением простейшей градиентной модели [16], в которой в качестве дополнительной меры деформаций рассматривается градиент объемной деформации  $\nabla\theta$ . Альтернативно можно рассмотреть модель, изложенную в [12], отличие которой на первый взгляд минимально, однако подход, принимаемый автором этой работе неприменим к рассматриваемой задаче, а строгая формулировка такой модели существенно более сложна.

Приступим к построению выбранной градиентной модели. В линейной теории упругости внутренняя энергия среды может быть представлена как квадратичная форма тензора деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  – единственной «меры» деформации среды Гука. В градиентной модели градиенты вводятся как независимые от деформаций переменные, а внутренняя энергия аналогично рассматривается как квадратичная форма, только уже не одной, а всех введенных мер деформации. В рассматриваемой модификации таких мер всего две:  $(\boldsymbol{\varepsilon}, \nabla\theta)$ .

Запишем внутреннюю энергию следующим образом:

$$U(\boldsymbol{\varepsilon}, \nabla\theta) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2}A\nabla\theta \cdot \nabla\theta, \quad (1.3)$$

где  ${}^4\mathbf{C} = \lambda{}^4\mathbf{I}_1 + \mu({}^4\mathbf{I}_2 + {}^4\mathbf{I}_3)$  – тензор жесткости изотропной среды,  $A$  – параметр микроструктуры, имеющий размерность силы.

Необходимость положительной определенности данной формы накладывает ограничения на параметры среды

$$\lambda + \frac{2}{3}\mu > 0, \quad \mu > 0, \quad A > 0.$$

Частные производные от потенциальной энергии по соответствующим мерам деформации дают два вида напряжений:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \lambda\theta\mathbf{E} + 2\mu\mathbf{E}, \quad (1.4)$$

$$\boldsymbol{\Gamma} = \frac{\partial U}{\partial(\nabla\theta)} = A\nabla\theta = A\boldsymbol{\pi}, \quad (1.5)$$

где  $\boldsymbol{\tau}$  – тензор упругих напряжений<sup>1</sup>,  $\mathbf{E}$  – единичный тензор,  $\boldsymbol{\Gamma}$  – вектор напряжений, обусловленный наличием градиентных членов.

Строго говоря ни  $\boldsymbol{\tau}$ , ни  $\boldsymbol{\Gamma}$  по отдельности не имеют смысла напряжения градиентной среды, а лишь выполняют роль обобщенных усилий, на которых совершают работу меры деформации. Вариационная постановка задачи [16], показывает, что напряжением в градиентной среде является величина

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - A(\nabla \cdot \boldsymbol{\pi})\mathbf{E} = \lambda\theta\mathbf{E} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} - A\Delta\theta\mathbf{E}, \quad (1.6)$$

так как именно для нее записывается уравнение движения сплошной среды

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho\mathbf{f} = \rho\ddot{\mathbf{u}}. \quad (1.7)$$

Из-за введения градиентных членов общий порядок уравнения повысился, вследствие чего необходима формулировка дополнительных граничных условий, которые также получаются из вариационной постановки. Теперь на каждой границе ставится не одно кинематическое или силовое граничное

---

<sup>1</sup>не трудно заметить, что он полностью аналогичен тензору напряжений в среде Гука.

условие, а два. Первая пара условий задает поведение полного напряжения (или перемещения), вторая – только градиентной части.

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Big|_S = \mathbf{F} \quad \text{или} \quad \mathbf{u} \Big|_S = \mathbf{U}, \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Gamma} \Big|_S = \Pi \quad \text{или} \quad \theta \Big|_S = \Theta, \end{aligned}$$

$\mathbf{U}, \Theta$  – некоторые заданные поля перемещений и объемной деформации соответственно,  $\mathbf{f}, \mathbf{F}, \Pi$  – векторы внешних нагрузок,  $\mathbf{n}$  – вектор нормали к поверхности.

Так как рассматриваемый в данной работе процесс диффузии протекает несопоставимо медленнее распространения волн в среде, предполагается, что можно пренебречь инерцией и вместо уравнения движения (1.7) записать уравнение равновесия

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = 0. \quad (1.8)$$

Существуют разные способы введения зависимости от концентрации. Можно рассматривать концентрацию как внешнюю нагрузку, в таком случае определяющее соотношение для напряжений не изменится, а концентрация будет давать свой вклад в векторы нагрузок. Однако более распространенным [7, 14, 18] подходом является рассмотрение процесса диффузии не как взаимодействие двух *разных* сред, а как движение *единой* двухкомпонентной среды. В таком случае определяющее соотношение для напряжений модифицируется согласно закону Дюамеля-Неймана

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \theta \mathbf{E} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} - A \Delta \theta \mathbf{E} - 3\alpha K C \mathbf{E}. \quad (1.9)$$

В таком подходе концентрация не дает никакого вклада во внешние нагрузки, следовательно  $\mathbf{f} = 0$ ,  $\mathbf{F} = 0$ ,  $\Pi = 0$ .

Стоит отметить, что вне зависимости от способа введения концентрационных слагаемых в уравнение равновесия, результат получится совершенно аналогичным. Если выбрать первый подход, в котором концентрация играет роль объемной и поверхностной силы, то объемная сила даст дополнительное слагаемое в уравнение, а поверхностная – в граничное условие. В рассматриваемом здесь подходе двухкомпонентной среды эти же слагаемые получаются из определяющего соотношения для напряжений.

### 1.3. Модели диффузии

Классический закон Фика при отсутствии источников концентрации записывается следующим образом

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (1.10)$$

где  $\mathbf{J}$  – диффузионный поток, который вводится в соответствии со следующим феноменологическим соотношением

$$\mathbf{J} = -\frac{D}{RT} \mathcal{C} \nabla \mu, \quad (1.11)$$

$D$  – коэффициент диффузии,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – абсолютная температура,  $\mu$  – химический потенциал среды. В классической теории диффузии коэффициент диффузии считается постоянным, а химический потенциал среды отбрасывается. В итоге весь химический потенциал определяется диффундирующим веществом, содержащимся в образце. В рассматриваемой задаче это водород, для которого принимается модель идеального газа

$$\mu = \mu_H = \mu_H^0 + RT \ln \mathcal{C}, \quad (1.12)$$

где  $\mu_H^0$  – химический потенциал в недеформированном состоянии. Предполагается, что изначально образец не содержит водорода, поэтому  $\mu_H^0 = 0$ . Подставим данное выражение химического потенциала в уравнение диффузии (1.11) и получим классическое определение диффузионного потока

$$\mathbf{J} = -D \nabla \mathcal{C}, \quad (1.13)$$

которое, будучи подставленным в уравнение (1.10) дает классическое уравнение диффузии

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla \mathcal{C}). \quad (1.14)$$

Вводить в уравнение диффузии зависимость от напряженно-деформированного состояния вмещающей среды можно различными способами, например учетом химического потенциала не только водорода, но и вмещающей среды [14], добавлением дополнительной движущей силы

[5, 7, 8], связанной с напряжением среды, введением переменного коэффициента диффузии или комбинациями перечисленных способов. В данной работе ограничимся рассмотрением двух модификаций коэффициента диффузии.

### 1.3.1. Зависимость коэффициента диффузии от деформации

Коэффициент диффузии зависит от строения и свойств как вмещающей среды (среды *в которую* происходит диффузия), так и от диффундирующего вещества. В процессе движения по вмещающей среде она немного расширяется, следовательно изменяется и коэффициент диффузии. Один из способов это учесть – модель тензодиффузии [3], в которой коэффициент диффузии предполагается зависящим от деформации в направлениях, ортогональных диффузионному потоку. Так как концентрация зависит только от радиуса, диффузионный поток (1.13) будет иметь только радиальную составляющую, а значит коэффициент диффузии зависит от деформаций  $\varepsilon_\varphi, \varepsilon_z$

$$D = D(\varepsilon_\varphi, \varepsilon_z).$$

В соответствии с введенными предположениями<sup>2</sup> в любом поперечном сечении образца наблюдается одинаковый по величине диффузионный поток, а значит и коэффициент диффузии не может зависеть от  $z$ <sup>3</sup>

$$D = D(\varepsilon_\varphi).$$

Для малых деформаций можно рассматривать линейную зависимость

$$D = D_0 + D_1\varepsilon_\varphi. \quad (1.15)$$

### 1.3.2. Зависимость коэффициента диффузии от давления

Альтернативным способом учета зависимости коэффициента диффузии от напряженно-деформированного состояния является введение зависимости не от деформации, а от напряжения. В задачах об объемной деформации, в

<sup>2</sup>гипотеза плоских сечений и постоянство концентрации на стенке.

<sup>3</sup>Позже будут показаны условия, при которых это возможно

частности, используется зависимость от давления [3] следующего вида

$$D = D_0 e^{-\gamma P}. \quad (1.16)$$

Давление определяется шаровой частью тензора напряжений (1.9)

$$P = -\frac{1}{3} \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} = -K\theta + A(\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}). \quad (1.17)$$

При рассмотрении данной зависимости возникает то же противоречие, что и в тензодиффузии – концентрация от  $z$  зависеть не должна, а коэффициент диффузии, очевидно, от  $z$  зависит. Устранение этого противоречия достигается правильным заданием граничных условий.

## 1.4. Граничная задача

Вычислим тензор деформации и объемную деформацию

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u})^S = \frac{du_r}{dr} \mathbf{e}_r \mathbf{e}_r + \frac{u_r}{r} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_\varphi + \frac{du_z}{dz} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z, \quad \theta = \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{du_r}{dr} + \frac{u_r}{r} + \frac{du_z}{dz}.$$

Рассматриваемый случай удобен тем, что выполняется соотношение

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \theta,$$

которое нетрудно проверить прямым вычислением. Благодаря этому уравнение равновесия можно полностью переписать через вектор  $\boldsymbol{\pi} = \nabla \theta$ , ранее упомянутый в (1.5). Распишем уравнение равновесия (1.8):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = (\lambda + 2\mu) \boldsymbol{\pi} - A \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} - 3\alpha K \nabla C = 0.$$

Фигурирующий в данном выражении параметр  $A$  не очень удобен с практической точки зрения, поэтому вместо него вводится другой параметр

$$l = \sqrt{\frac{A}{\lambda + 2\mu}}, \quad (1.18)$$

имеющий смысл характерного размера микроструктуры образца.

Получим окончательный результат в векторной форме

$$\boldsymbol{\pi} - l^2 \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \nabla \mathcal{C}.$$

Распишем в проекциях на  $r$  и  $z$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi} &= \nabla \theta(r, z, t) = \pi_r(r, t) \mathbf{e}_r + \pi_z(z, t) \mathbf{e}_z, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} &= \left( \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (\pi_r \mathbf{e}_r + \pi_z \mathbf{e}_z) = \frac{\partial \pi_r}{\partial r} + \frac{\pi_r}{r} + \frac{\partial \pi_z}{\partial z}, \\ \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} &= \mathbf{e}_r \left( \frac{\partial^2 \pi_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \pi_r}{\partial r} - \frac{\pi_r}{r^2} \right) + \mathbf{e}_z \frac{\partial^2 \pi_z}{\partial z^2}. \\ \nabla \mathcal{C} &= \mathbf{e}_r \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r}. \end{aligned}$$

Проекция на  $r$ :

$$\begin{cases} \pi_r - l^2 \left( \frac{d^2 \pi_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\pi_r}{dr} - \frac{\pi_r}{r^2} \right) = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \\ \pi_r = \frac{d^2 u_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_r}{dr} - \frac{u_r}{r^2} \end{cases}. \quad (1.19)$$

Проекция на  $z$ :

$$\begin{cases} \pi_z - l^2 \frac{d^2 \pi_z}{dz^2} = 0 \\ \pi_z = \frac{d^2 u_z}{dz^2} \end{cases}. \quad (1.20)$$

Как было сказано выше, рассматриваемые зависимость коэффициента диффузии, строго говоря, возможны только если коэффициент диффузии не зависит от  $z$ . Для реализации такого случая необходимо подобрать такие условия, при которых проекция на  $z$  будет давать только тривиальное решение. В частности, достаточно задать условия заземления на торцы цилиндра

$$\varepsilon_z \Big|_{z=-L/2} = 0, \quad \varepsilon_z \Big|_{z=L/2} = 0. \quad (1.21)$$

Преобразуем (1.20) уравнению в деформациях

$$\frac{\partial \varepsilon_z}{\partial z} - l^2 \frac{\partial^3 \varepsilon_z}{\partial z^3} = 0,$$

решение которого можно записать в следующей форме

$$\varepsilon_z = A + B \operatorname{sh} \frac{z}{l} + C \operatorname{ch} \frac{z}{l}.$$

Подставим в граничные условия

$$\begin{cases} A - \tilde{B} + \tilde{C} = 0 \\ A + \tilde{B} + \tilde{C} = 0 \end{cases} \implies -\tilde{B} + \tilde{C} = \tilde{B} + \tilde{C} \implies \tilde{B} = \tilde{C} = 0, A = 0,$$

где  $\tilde{B} = B \operatorname{sh} \frac{L}{l}$ ,  $\tilde{C} = C \operatorname{ch} \frac{L}{l}$ . В дальнейшем проекция на  $z$  не рассматривается. Для краткости также опускаются индексы и принимаются обозначения  $u = u_r, \pi = \pi_r$ .

На оси цилиндра ставится традиционное для цилиндрических задач условие ограниченности решения

$$u \Big|_{r=0} < \infty,$$

которое при условии отсутствия перемещения тела как твердого целого приводит к нулевому условию на перемещения

$$u \Big|_{r=0} = 0. \quad (1.22)$$

Также в нуле необходимо поставить дополнительное условие, связанное с «градиентной» частью решения. По аналогии задаем нулевое условие

$$\pi \Big|_{r=0} = 0. \quad (1.23)$$

Внешняя граница полагается свободной от нагрузок

$$\pi \Big|_{r=R} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Big|_{r=R} = 0. \quad (1.24)$$

Последнее из этих условий стоит расписать подробно.

$$\mathbf{n} \Big|_{r=R} = \mathbf{e}_r, \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \sigma_r \mathbf{e}_r \Big|_{r=R} = 0 \implies \sigma_r \Big|_{r=R} = 0;$$



$$\sigma_r \Big|_{r=R} = \left[ \lambda \left( \frac{du}{dr} + \frac{u}{r} \right) + 2\mu \frac{du}{dr} - A \left( \frac{d\pi}{dr} + \frac{\pi}{R} \right) \right] \Big|_{r=R} - 3\alpha K \mathcal{C}_{out} = 0. \quad (1.25)$$

Распишем уравнение диффузии в цилиндрических координатах

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \right). \quad (1.26)$$

Коэффициент диффузии в обоих моделях зависит только от  $r$

$$D = D_0 + D_1 \varepsilon_\varphi = D_0 + D_1 \frac{u}{r},$$

$$D = D_0 e^{-\gamma P}, \quad P = -K \left( \frac{du}{dr} + \frac{u}{r} \right) + A \left( \frac{d\pi}{dr} + \frac{\pi}{r} \right) + 3\alpha K \mathcal{C}.$$

На внешней границе поддерживается постоянная концентрация

$$\mathcal{C} \Big|_{r=R} = \mathcal{C}_{out}. \quad (1.27)$$

На оси цилиндра, в силу симметрии задачи, должен равняться нулю диффузионный поток

$$\nabla \mathcal{C} \Big|_{r=0} = \mathbf{e}_r \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (1.28)$$

Предполагается, что до начала насыщения образец не содержал водорода, поэтому его начальное значение равно нулю

$$\mathcal{C} \Big|_{t=0} = 0. \quad (1.29)$$

Получаем две модели для дальнейшего решения:

1. Модель тензодиффузии, состоящая из уравнений (1.19), (2.10) и (1.15) с граничными условиями (1.23), (1.24), (1.22), (1.25), (1.28), (1.27) и начальным условием (1.29);
2. Модель зависимости коэффициента диффузии от давления, состоящая из уравнений (1.19), (2.10) и (1.16) с аналогичными граничными и начальными условиями.

## ГЛАВА 2. Построение численной схемы

В данной главе стоит пояснить, с какой целью было сделано преобразование уравнения равновесия (1.19) к системе уравнений второго порядка. Исходное уравнение равновесия, будучи записанным в перемещениях, имеет четвертый порядок. Для него можно построить численную схему точно так же, как это будет проделано ниже. Забегая немного вперед отметим, что результатом такого построения будет СЛАУ с пятидиагональной матрицей. Для решения таких СЛАУ существует модификация метода прогонки, проблема которой заключается в критически малом запасе устойчивости, что не позволяет применять его также универсально, как метод для трехдиагональных матриц. Более общие методы решения СЛАУ имеют существенно большую вычислительную сложность, чем прогонка, поэтому в данной работе было решено полностью перейти к уравнениям второго порядка. На этом можно перейти к теме данной главы.

Система (1.19), распадается на два уравнения, которые можно решать последовательно. Строго говоря, если нет необходимости получить результат в перемещениях, то достаточно решить только первое уравнение, но в рассматриваемой задаче необходимо решить и второе, так как деформация определяется перемещениями. Полную систему модели, состоящую из уравнения равновесия и уравнения диффузии, также предлагается решать последовательно. Такой подход позволяет существенно сэкономить вычислительные ресурсы, т.к. решение каждого уравнения в отдельности есть достаточно простая задача.

Каждое уравнение в отдельности будем решать методом конечных разностей, для чего в рассматриваемой области вводится равномерная сетка

$$r_n = (n - 1)dr, \quad n \in [1, N], \quad dr = \frac{R}{N - 1}.$$

$$t_k = kdt, \quad k \in [0, T], \quad dt = \frac{\tau}{T}.$$

Здесь  $dr$ ,  $dt$  – шаг по координате и по времени соответственно,  $N$  – количество узлов координатной сетки,  $T$  – количество элементов временной сетки,  $R$  – радиус расчетной области,  $\tau$  – время расчета. Все входящие в уравнения

функции аппроксимируем сеточными функциями вида:

$$F_n^k = F(r_n, t_k).$$

Также для вычислений понадобятся значения функций в полужелых точках, которые можно вычислить линейной интерполяцией

$$F_{n\pm 1/2}^k = \frac{F_{n\pm 1}^k + F_n^k}{2}.$$

## 2.1. Разностная схема для уравнения равновесия

Система уравнений (1.19) разделяется на два отдельных уравнения. Граничные условия также разделяются, за исключением (1.25) – в нем содержатся обе переменные ( $\pi$ , и  $u$ ). Благодаря тому, что уравнения разделяются, возможно отдельно решить первое уравнение, а затем подставить полученные значения во второе уравнение и в упомянутое граничное условие.

Для построения конечно-разностных схем используем следующие аппроксимации для производных

$$\left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{n,k} = \frac{f_{n+1}^k - f_{n-1}^k}{2dr} + o(dr^2), \quad \left. \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \right|_{n,k} = \frac{f_{n+1}^k - 2f_n^k + f_{n-1}^k}{dr^2} + o(dr^2). \quad (2.1)$$

Построим численную схему первого уравнения системы (1.19)

$$\pi - l^2 \left( \frac{d^2 \pi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\pi}{dr} - \frac{\pi}{r^2} \right) = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r}.$$

Во внутренних точках области справедливы аппроксимации (2.1)

$$\begin{aligned} \left[ 1 + \frac{l^2}{r_n^2} \right] \pi_n^k - \frac{l^2}{dr^2} [\pi_{n+1}^k - 2\pi_n^k + \pi_{n-1}^k] - \frac{l^2}{2r_n dr} [\pi_{n+1}^k - \pi_{n-1}^k] = \\ = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \frac{\mathcal{C}_{n+1}^k - \mathcal{C}_{n-1}^k}{2dr}. \end{aligned}$$

Приведенное уравнение можно записать в виде

$$a_n^k \pi_{n-1}^k + b_n^k \pi_n^k + c_n^k \pi_{n+1}^k = f_n^k, \quad n \in [2, N-1], \quad (2.2)$$

если ввести следующие обозначения

$$a_n^k = -\frac{l^2}{dr^2} + \frac{l^2}{2r_n dr}, \quad b_n^k = \frac{2l^2}{dr^2} + \frac{l^2}{r_n^2} + 1,$$

$$c_n^k = -\frac{l^2}{dr^2} - \frac{l^2}{2r_n dr}, \quad f_n^k = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \frac{C_{n+1}^k - C_{n-1}^k}{2dr}.$$

Данную систему необходимо дополнить двумя уравнениями, которые получаются из граничных условий (1.23), (1.24)

$$\pi \Big|_{r=0} = \pi_1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad b_1^k = 1, \quad c_1^k = 0, \quad f_1^k = 0. \quad (2.3)$$

$$\pi \Big|_{r=R} = \pi_N = 0 \quad \Longrightarrow \quad a_N^k = 0, \quad b_N^k = 1, \quad f_N^k = 0. \quad (2.4)$$

Система уравнений (2.2) примечательна тем, что матрица ее коэффициентов имеет трехдиагональную структуру. Для решения СЛАУ такого вида широко применяется метод прогонки [2, с.26], основное преимущество которого заключается в экономичности (вычислительная сложность метода  $O(N)$ ). Достаточные условия метода прогонки – ненулевые значения всех коэффициентов главной диагонали ( $B_n$ ), первых над- и поддиагоналей ( $A_n, C_n$ ) и наличие диагонального преобладания, что формально записывается следующим образом

$$|A_n| > 0, \quad |B_n| > 0, \quad |C_n| > 0,$$

$$|B_n| \geq |A_n| + |C_n|,$$

причем хотя бы для одного значения  $n$  неравенство должно выполняться строго. Зачастую условия можно ослабить, разрешив некоторым значениям  $A_n$  и  $C_n$  быть нулевыми. Например, если  $C_1 = 0$ , можно рассмотреть систему, полученную из изначальной исключением первой строки и столбца

$$\begin{bmatrix} B_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \Longrightarrow \begin{bmatrix} B_2 & C_2 & 0 & \cdots & 0 \\ A_3 & B_3 & C_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \pi_2 \\ \pi_3 \\ \vdots \end{bmatrix}.$$

Решение такой системы (если дополнить его известным значением  $\pi_1$ ) эк-

вивалентно решению исходной системы. Поэтому если для преобразованной системы имеет место устойчивость, то же выполняется и для изначальной.

Проверим, что система (2.2) удовлетворяет достаточным условиям метода прогонки. Очевидно, что при  $n \in [2, N - 1]$   $a_n^k$  и  $c_n^k$  меньше нуля, а  $b_n^k$  – больше нуля.

$$|a_n^k| + |c_n^k| = -a_n^k - c_n^k = \frac{2l^2}{dr^2} < |b_n^k| = b_n^k = \frac{2l^2}{dr^2} + \frac{l^2}{r_n^2} + 1.$$

Для первой и последней строки аналогичное неравенство очевидно. Как только что было отмечено, некоторые из над и поддиагональных элементов могут обращаться в нуль без ущерба для устойчивости метода (здесь это  $c_1^k$  и  $a_N^k$ ), и в данном случае это можно доказать строго. Для этого необходимо применить подход, изложенный в примере выше, и исключить первые и последние строку и столбец. Полученная таким образом система будет удовлетворять условиям устойчивости. Устойчивость системы (2.2) доказана.

Построим численную схему для второго уравнения системы (1.19)

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} = \pi,$$

что делается совершенно аналогично первому. Подставим в уравнение аппроксимации (2.1)

$$\frac{1}{dr^2} [u_{n+1}^k - 2u_n^k + u_{n-1}^k] + \frac{1}{2r_n dr} [u_{n+1}^k - u_{n-1}^k] - \frac{1}{r_n^2} u_n^k = \pi_n^k.$$

Соберем подобные и введем обозначения

$$\hat{a}_n^k = \frac{1}{dr^2} - \frac{1}{2r_n dr}, \quad \hat{b}_n^k = -\frac{2}{dr^2} - \frac{1}{r_n^2}, \quad \hat{c}_n^k = \frac{1}{dr^2} + \frac{1}{2r_n dr}, \quad \hat{f}_n^k = \pi_n^k.$$

Получаем систему

$$\hat{a}_n^k u_{n-1}^k + \hat{b}_n^k u_n^k + \hat{c}_n^k u_{n+1}^k = \hat{f}_n^k, \quad n \in [2, N - 1]. \quad (2.5)$$

Левое граничное условие (1.22), как и в предыдущем случае, точное, поэтому нет никаких препятствий к его использованию

$$u \Big|_{r=0} = u_1 = 0 \quad \implies \quad \hat{b}_1^k = 1, \quad \hat{c}_1^k = 0, \quad \hat{f}_1^k = 0. \quad (2.6)$$

Правое граничное условие (1.25) необходимо аппроксимировать. Вся полученная ранее схема может иметь второй порядок точности, если аппроксимировать граничное условие со вторым порядком. Для получения необходимой точности аппроксимации рассмотрим два разложения

$$f(r - dr, t) = u(r, t) - \left. \frac{df}{dr} \right|_{r,t} dr + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 f}{dr^2} \right|_{r,t} dr^2 + o(dr^2),$$

$$f(r - 2dr, t) = f(r, t) - 2 \left. \frac{df}{dr} \right|_{r,t} dr + 2 \left. \frac{d^2 f}{dr^2} \right|_{r,t} dr^2 + o(dr^2).$$

Сложив первое разложение, умноженное на  $-4$ , со вторым и преобразовав результат, получим

$$\left. \frac{df}{dr} \right|_{r,t} = \frac{f(r - 2dr, t) - 4f(r - dr, t) + 3f(r, t)}{2dr},$$

или в терминах сеточных функций

$$\left. \frac{df}{dr} \right|_{n,k} = \frac{f_{n-2}^k - 4f_{n-1}^k + 3f_n^k}{2dr}. \quad (2.7)$$

Используем полученный результат для аппроксимации граничного условия (1.25)

$$\begin{aligned} \sigma_r \Big|_{r=R,t} &= \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} [u_{N-2}^k - 4u_{N-1}^k + 3u_N^k] + \frac{\lambda}{R} u_N^k - \\ &\quad - \frac{A}{2dr} [\pi_{N-2}^k - 4\pi_{N-1}^k + 3\pi_N^k] - \frac{A}{R} \pi_N^k - 3\alpha K \mathcal{C}_{out} = 0. \end{aligned}$$

В этом выражении  $\pi_i^k$  – это значения, полученные в ходе решения СЛАУ (2.2). Соберем подобные

$$\begin{aligned} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} u_{N-2}^k - 2 \frac{\lambda + 2\mu}{dr} u_{N-1}^k + \left( 3 \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} + \frac{\lambda}{R} \right) u_N^k &= \\ = \frac{A}{2dr} \pi_{N-2}^k - \frac{2A}{dr} \pi_{N-1}^k + \left( \frac{3A}{2dr} + \frac{A}{R} \right) \pi_N^k + 3\alpha K \mathcal{C}_{out}. \end{aligned}$$

Чтобы добавить полученную строку в систему (2.5) и не нарушить её трехдиагональность, её необходимо преобразовать к виду

$$\hat{a}_N^k u_{N-1}^k + \hat{b}_N^k u_N^k = \hat{f}_N^k.$$

С помощью  $(N - 1)$ -ой строки системы (2.5) исключим из аппроксимации граничного условия величину  $u_{N-2}^k$ . В результате получим

$$\begin{aligned} & - \left( 2 \frac{\lambda + 2\mu}{dr} + \frac{\hat{b}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} \right) u_{N-1}^k + \left( 3 \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} + \frac{\lambda}{R} - \frac{\hat{c}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} \right) u_N^k = \\ & = \frac{A}{2dr} \pi_{N-2}^k - \frac{2A}{dr} \pi_{N-1}^k + \left( \frac{3A}{2dr} + \frac{A}{R} \right) \pi_N^k + 3\alpha K \mathcal{C}_{out} - \frac{\hat{f}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr}. \end{aligned}$$

Сравнив с ожидаемым результатом, введем обозначения

$$\begin{aligned} \hat{a}_N^k &= -2 \frac{\lambda + 2\mu}{dr} - \frac{\hat{b}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr}, \quad \hat{b}_N^k = 3 \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} + \frac{\lambda}{R} - \frac{\hat{c}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr}, \\ f_N^k &= \frac{A}{2dr} \pi_{N-2}^k - \frac{2A}{dr} \pi_{N-1}^k + \left( \frac{3A}{2dr} + \frac{A}{R} \right) \pi_N^k + 3\alpha K \mathcal{C}_{out} - \frac{\hat{f}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr}. \end{aligned}$$

В таком виде уравнение может быть использовано для дополнения системы (2.5), без нарушения трехдиагональности.

Проверим достаточные условия прогонки. Очевидно, что при  $n \in [2, N-1]$   $\hat{a}_n^k$  и  $\hat{c}_n^k$  больше нуля, а  $\hat{b}_n^k$  – меньше нуля.

$$|\hat{a}_n^k| + |\hat{c}_n^k| = \hat{a}_n^k + \hat{c}_n^k = \frac{2}{dr^2} < |\hat{b}_n^k| = -\hat{b}_n^k = \frac{2}{dr^2} + \frac{1}{r_n^2}.$$

Для первой строки выполнение условия очевидно, последнюю необходимо исследовать дополнительно.  $\hat{a}_N^k$  меньше нуля, знак  $\hat{b}_N^k$  следует определить

$$\hat{b}_N^k = \left( \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{\hat{c}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \right) + \frac{\lambda}{R}.$$

Рассмотрим отношение  $\hat{c}_{N-1}^k / \hat{a}_{N-1}^k$

$$\frac{\hat{c}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} = \frac{\frac{1}{dr^2} + \frac{1}{2r_{N-1}dr}}{\frac{1}{dr^2} - \frac{1}{2r_{N-1}dr}} = \frac{2(N-2) + 1}{2(N-2) - 1} = \frac{2N-3}{2N-5}.$$

Если  $N \geq 3$ , эта дробь монотонно убывает. При  $N = 3$  она достигает своего максимального значения, равного 3, при этом  $\hat{b}_N^k = \lambda/R > 0$ . Следовательно,  $\hat{b}_N^k$  всегда положителен. Вычислим следующую разность:

$$\begin{aligned} |\hat{b}_N^k| - |\hat{a}_N^k| &= \frac{3\lambda + 2\mu}{2} \frac{1}{dr} + \frac{\lambda}{R} - \frac{\hat{c}_{N-1}^k \lambda + 2\mu}{\hat{a}_{N-1}^k 2dr} - 2 \frac{\lambda + 2\mu}{dr} - \frac{\hat{b}_{N-1}^k \lambda + 2\mu}{\hat{a}_{N-1}^k 2dr} = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\lambda + 2\mu}{dr} + \frac{\lambda}{R} - \frac{\hat{c}_{N-1}^k + \hat{b}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} = -\frac{\hat{a}_{N-1}^k + \hat{b}_{N-1}^k + \hat{c}_{N-1}^k}{\hat{a}_{N-1}^k} \frac{\lambda + 2\mu}{2dr} + \frac{\lambda}{R}. \end{aligned}$$

Отдельно посчитаем числитель первой дроби

$$-\left(\hat{a}_{N-1}^k + \hat{b}_{N-1}^k + \hat{c}_{N-1}^k\right) = \frac{1}{r_{N-1}^2} > 0.$$

Имеем

$$|\hat{b}_N^k| - |\hat{a}_N^k| = \frac{1}{r_{N-1}^2} + \frac{\lambda}{R} > 0 \quad \implies \quad |\hat{b}_N^k| > |\hat{a}_N^k|.$$

Диагональное преобладание выполняется во всех строках рассматриваемой системы. Как и в предыдущем случае, в данной системе есть наддиагональный коэффициент равный нулю. Данный случай соответствует рассмотренному ранее примеру доказательства устойчивости, поэтому отдельно проводить доказательство нет необходимости. На этом устойчивость метода прогонки для системы (2.5) доказана.

## 2.2. Разностная схема для уравнения диффузии

Уравнение диффузии, в отличие от уравнения равновесия<sup>1</sup>, является дифференциальным уравнением в частных производных. Для него возникает вопрос аппроксимации не только по координате, но и по времени. В зависимости от выбора аппроксимации производной по времени можно получить явную (вида  $\mathcal{C}^{k+1} = f(\mathcal{C}^k)$ ) или неявную (вида  $\mathcal{C}^{k+1} = f(\mathcal{C}^{k+1})$ ) конечно-разностную схему [9]. Неявные схемы, как правило, более устойчивы, поэтому в данной работе будут использоваться именно они. Дополнительную сложность в построение схемы привносит тот факт, что уравнение нелинейно за счет переменного коэффициента диффузии. С этой трудностью предлагается теми же

<sup>1</sup>фактически уравнение равновесия является обыкновенным дифференциальным. Временная зависимость в нем полявляется только за счет правой части, фактически время входит в качестве параметра.



способами, которые используются при решении параболических уравнений с переменными коэффициентами, зависящими от значений функции (например [6]).

Для аппроксимации первой производной по времени используем одностороннюю конечную разность

$$\left. \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} \right|_{n,k+1} = \frac{\mathcal{C}_n^{k+1} - \mathcal{C}_n^k}{dt} + o(dt). \quad (2.8)$$

Для аппроксимации производной по координате применим центральную разность, построенную по полуцелым точкам

$$\left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{n,k} = \frac{f_{n+1/2}^k - f_{n-1/2}^k}{dr} + o(dr^2). \quad (2.9)$$

Такой выбор аппроксимации по координате обусловлен тем, что при аппроксимации второй производной по координате мы получим значения искомой функции в точках с целыми индексами. Получаемая по данным аппроксимациям конечно-разностная схема будет иметь первый порядок точности по времени. Чтобы улучшить этот результат, можно построить обобщенную шеститочечную схему или ее частный случай - схему Кранка-Николсона [9], но в данном случае в этом нет необходимости.

Преобразуем правую часть уравнения (1.26)

$$\begin{aligned} \left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \right) \right|_{n,k+1} &= \\ &= \frac{1}{r_n dr} \left[ r_{n+1/2} D_{n+1/2}^k \left. \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \right|_{n+1/2,k+1} - r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k \left. \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \right|_{n-1/2,k+1} \right] = \\ &= \frac{1}{r_n dr^2} \left[ r_{n+1/2} D_{n+1/2}^k (\mathcal{C}_{n+1}^{k+1} - \mathcal{C}_n^{k+1}) - r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k (\mathcal{C}_n^{k+1} - \mathcal{C}_{n-1}^{k+1}) \right] = \\ &= \frac{r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k}{r_n dr^2} \mathcal{C}_{n-1}^{k+1} - \frac{r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k + r_{n+1/2} D_{n+1/2}^{k+1}}{r_n dr^2} \mathcal{C}_n^{k+1} + \frac{r_{n+1/2} D_{n+1/2}^k}{r_n dr^2} \mathcal{C}_{n+1}^{k+1}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Подставим аппроксимации левой (2.8) и правой (2.10) частей уравнения и

соберем подобные, получив конечно-разностную схему вида

$$\tilde{a}_n^{k+1} \mathcal{C}_{n-1}^{k+1} + \tilde{b}_n^{k+1} \mathcal{C}_n^{k+1} + \tilde{c}_n^{k+1} \mathcal{C}_{n+1}^{k+1} = \tilde{f}_n^k, \quad n \in [2, N-1], \quad (2.11)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{a}_n^{k+1} &= \frac{r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k}{r_n dr^2}, & \tilde{b}_n^{k+1} &= -\frac{r_{n-1/2} D_{n-1/2}^k + r_{n+1/2} D_{n+1/2}^k}{r_n dr^2} - \frac{1}{dt}, \\ \tilde{c}_n^{k+1} &= \frac{r_{n+1/2} D_{n+1/2}^k}{r_n dr^2}, & \tilde{f}_n^k &= -\frac{1}{dt} \mathcal{C}_n^k. \end{aligned}$$

Для замыкания системы необходимо получить еще два уравнения из граничных условий. Условие (1.27) на внешней границе аппроксимируется точно

$$\mathcal{C} \Big|_{r=R,t} = \mathcal{C}_N^{k+1} = \mathcal{C}_{out} \quad a_N^{k+1} = 0, b_N^{k+1} = 1, f_N^k = \mathcal{C}_{out}.$$

Как было отмечено выше, система *может* иметь второй порядок точности по координате, однако если использовать для аппроксимации граничного условия менее точное выражение, то и порядок точности схемы понизится. Получим аппроксимацию второго порядка точности из разложения в ряды Тейлора в окрестности границы

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(r+dr, t) &= \mathcal{C}(r, t) + \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{r,t} dr + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial r^2} \Big|_{r,t} dr^2 + o(dr^2), \\ \mathcal{C}(r+2dr, t) &= \mathcal{C}(r, t) + 2 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{r,t} dr + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial r^2} \Big|_{r,t} dr^2 + o(dr^2). \end{aligned}$$

Сложив первую строку, умноженную на  $-4$ , со второй и преобразовав результат, получим

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{r,t} = \frac{3\mathcal{C}(r, t) + 4\mathcal{C}(r+dr, t) - \mathcal{C}(r+2dr, t)}{2dr} + o(dr^2),$$

или в терминах сеточных функций

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{n,k} = \frac{-3\mathcal{C}_n^k + 4\mathcal{C}_{n+1}^k - \mathcal{C}_{n+2}^k}{2dr} + o(dr^2). \quad (2.12)$$

Полученное соотношение позволяет аппроксимировать граничное условие со вторым порядком точности.

$$\left. \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \implies -3\mathcal{C}_1^{k+1} + 4\mathcal{C}_2^{k+1} - \mathcal{C}_3^{k+1} = 0. \quad (2.13)$$

Как и в случае с внешним граничным условием для уравнения равновесия, полученная аппроксимация нарушает трехдиагональность. Используем вторую строку системы, чтобы исключить  $\mathcal{C}_3^{k+1}$  из аппроксимации.

$$\begin{aligned} -3\mathcal{C}_1^{k+1} + 4\mathcal{C}_2^{k+1} - \mathcal{C}_3^{k+1} &= 0, \\ a_2^{k+1}\mathcal{C}_1^{k+1} + b_2^{k+1}\mathcal{C}_2^{k+1} + c_2^{k+1}\mathcal{C}_3^{k+1} &= f_2^k. \end{aligned}$$

Разделим вторую строку на  $\tilde{c}_2^{k+1}$  и сложим с первой

$$\left( \frac{\tilde{a}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} - 3 \right) \mathcal{C}_1^{k+1} + \left( \frac{\tilde{b}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} + 4 \right) \mathcal{C}_2^{k+1} = \frac{\tilde{f}_2^k}{\tilde{c}_2^{k+1}}.$$

Обозначим

$$\tilde{b}_1^{k+1} = \frac{\tilde{a}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} - 3, \quad \tilde{c}_1^{k+1} = \frac{\tilde{b}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} + 4, \quad \tilde{f}_1^k = \frac{\tilde{f}_2^k}{\tilde{c}_2^{k+1}}.$$

Подстановка полученного уравнения в первую строку СЛАУ не нарушает трехдиагональность.

Проверим выполнение достаточных условий метода прогонки.

$$|\tilde{b}_n^{k+1}| = \frac{r_{n-1/2}D_{n-1/2}}{r_n dr^2} + \frac{r_{n+1/2}D_{n+1/2}}{r_n dr^2} + \frac{1}{dt} = \tilde{a}_n^{k+1} + \tilde{c}_n^{k+1} + \frac{1}{dt}.$$

Так как  $D > 0$ , то  $\tilde{a}_n^{k+1} > 0$ ,  $\tilde{c}_n^{k+1} > 0$ ,

$$|\tilde{b}_n^{k+1}| > |\tilde{a}_n^{k+1}| + |\tilde{c}_n^{k+1}|, \quad n \in [2, N-1].$$

Для последней строки аналогичное равенство не вызывает сомнений, а вот первую строку необходимо проверить. Положительность  $\tilde{c}_1^{k+1}$  не вызывает сомнений, знак  $\tilde{b}_n^{k+1}$  необходимо установить.

$$\tilde{b}_1^{k+1} = \frac{\tilde{a}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} - 3, \quad \frac{\tilde{a}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} = \frac{r_{3/2} D_{3/2}^k}{r_{5/2} D_{5/2}^k} < 1 \quad \implies \quad \tilde{b}_1^{k+1} < 0.$$

Вычислим разность

$$|\tilde{b}_1^{k+1}| - |\tilde{c}_1^{k+1}| = -\frac{\tilde{a}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} + 3 - \frac{\tilde{b}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} - 4 = -\frac{\tilde{a}_2^{k+1} + \tilde{b}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}} - 1 = -\frac{\tilde{a}_2^{k+1} + \tilde{b}_2^{k+1} + \tilde{c}_2^{k+1}}{\tilde{c}_2^{k+1}}.$$

Отдельно вычислим числитель полученной дроби

$$\tilde{a}_2^{k+1} + \tilde{b}_2^{k+1} + \tilde{c}_2^{k+1} = \tilde{a}_2^{k+1} - \tilde{a}_2^{k+1} - \tilde{c}_2^{k+1} - \frac{1}{dt} + \tilde{c}_2^{k+1} = -\frac{1}{dt}.$$

Имеем

$$|\tilde{b}_1^{k+1}| - |\tilde{c}_1^{k+1}| = \frac{1}{dt \tilde{c}_2^{k+1}} > 0 \quad \implies \quad |\tilde{b}_1^{k+1}| > |\tilde{c}_1^{k+1}|.$$

Аналогично системам, полученным для конечно-разностных схем уравнения равновесия, строгое доказательство устойчивости для данной схемы возможно, если из ее системы исключить последние строку и столбец. Все оставшиеся коэффициенты ненулевые, а диагональное преобладание имеется во всех строках, поэтому устойчивость не вызывает сомнений. На этом устойчивость прогонки для системы (2.11) доказана.

### 2.3. Заключительные замечания

В данной главе был построен набор численных схем, позволяющий решить задачу последовательно, разделив систему уравнений на независимые уравнения. Данный подход крайне экономичен, так как решение сводится к троекратному применению метода прогонки. Устойчивость каждого из методов прогонки доказана. Однако устойчивость метода еще не означает устойчивости самой численной схемы. Также без ответа оставлен вопрос оценки точности полученной схемы и её сходимости.

Поскольку целью данной работы является исследование общих закономерностей решения, необходимости в построении максимально точной схемы нет. Сходимость схемы и ее устойчивость будут проверены экспериментально в следующей главе.

## ГЛАВА 3. Результаты расчета

### 3.1. Определение параметров модели

Прежде чем говорить непосредственно о результатах решения задачи, необходимо определить значения параметров модели. Основой для данной работы послужил эксперимент [13, 17], в котором цилиндрический образец стали 14ХГНДЦ радиусом  $R = 4$  мм, длиной  $L = 100$  мм в течение 96 часов подвергался наводороживанию в камере с постоянной плотностью сероводорода, равной 2500 мг/л (2,5 кг/м<sup>3</sup>). Нетрудно посчитать, что плотность водорода в камере равна  $\rho_H^{out} = 0,1479$  кг/м<sup>3</sup>. Определим концентрацию водорода следующим образом

$$C = \frac{\rho_H}{\rho_S}, \quad (3.1)$$

где  $\rho_H$  – актуальное значение плотности водорода,  $\rho_S$  – отсчетное значение плотности стали. При таком определении граничное значение концентрации равно  $C_{out} = \frac{\rho_H^{out}}{\rho_S} = 1,8956 \times 10^{-5}$ .

Ни один из необходимых расчетных параметров стали 14ХГНДЦ не стандартизирован, поэтому для расчета принимаются усредненные значения для сталей. Положим модуль Юнга  $E = 2 \times 10^{11}$  Па, коэффициент Пуассона  $\nu = 0,3$ , плотность  $\rho_S = 7800$  кг/м<sup>3</sup>. Для задания однородной изотропной среды достаточно двух приведенных модулей, все остальные значения могут быть получены из табл. 3.1.

Таблица 3.1

Связь между модулями упругости [1, с.114]

Модули	Основные пары		
	$k, \mu$	$\mu, \nu$	$E, \nu$
$\lambda$	$k - \frac{2}{3}\mu$	$\frac{2\mu\nu}{1-2\nu}$	$\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$
$\mu$	$\mu$	$\mu$	$\frac{E}{2(1+\nu)}$
$k$	$k$	$\frac{2\mu(1+\nu)}{3(1-2\nu)}$	$\frac{E}{2(1-2\nu)}$

По поводу величин неклассических модулей материала нет единого мнения. Даже в микрополярной теории, которая в этом плане разработана

несколько лучше градиентной, характерные размеры на кручение и на изгиб имеют существенный разброс в значениях. К тому же, величины модулей могут изменяться от образца к образцу, даже если они выполнены из одного материала. Изначально введенный в определении внутренней энергии (1.3) параметр  $A$ , имеющий размерность силы, трудно напрямую связать с каким-нибудь практическим значением, поэтому его обычно разлагают на произведение двух других модулей, например следующим образом<sup>1</sup>

$$A = Kh,$$

$h$  – новый характерный параметр микроструктуры, имеющий размерность площади. Также удобно оперировать введенным в (1.18) параметром  $l$ , величина которого предполагается приблизительно равной характерной длине на изгиб  $l_b$  в микрополярной теории [12, 16].

Коэффициент линейного концентрационного расширения  $\alpha$  имеет разброс от 0 до  $0,5 \times 10^{-6}$ . Корректировка значения  $\alpha$  в большую сторону приводит к увеличению концентрации (см. рис. 3.1), поэтому разумно взять наибольшее из приведенных значений  $\alpha = 0,5 \times 10^{-6}$ .

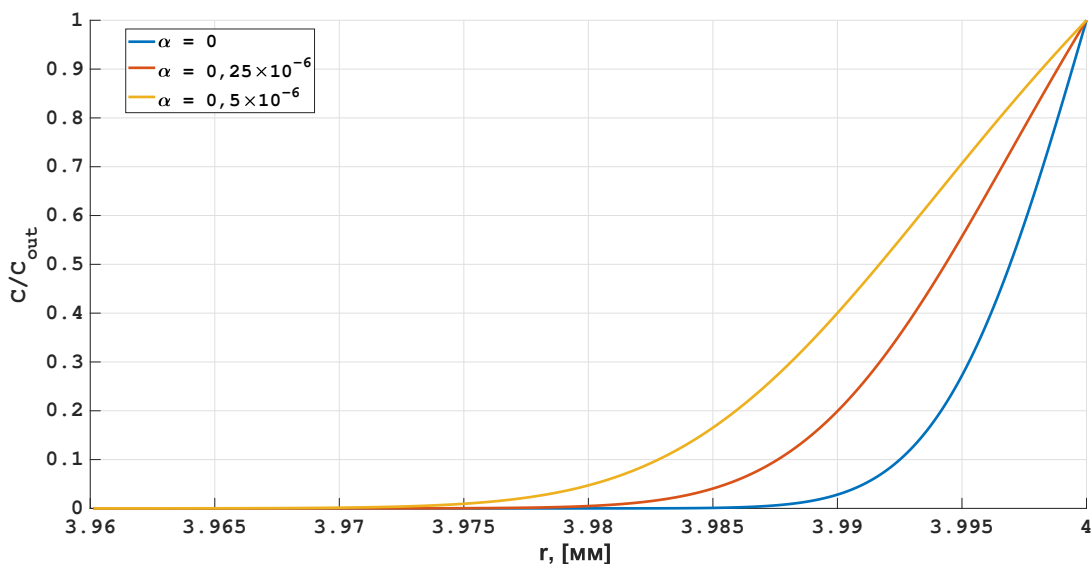


Рис. 3.1. Зависимость профиля концентрации водорода от коэффициента линейного концентрационного расширения  $\alpha$ .

Коэффициент диффузии  $D_0$  водорода в сталях также имеет значительный разброс значений. Вслед за [14], положим  $D_0 = 3 \times 10^{-17}$  м<sup>2</sup>/с.

<sup>1</sup>В [12], например, используется  $A = \mu h$

Коэффициенты  $D_1$  и  $\gamma$ , определяющие рассматриваемые модели диффузии, в данной работе определяются не предварительно, а путем исследования получаемого решения при различных величинах данных коэффициентов. Для удобства обзора, сведем все полученные значения в табл. 3.2.

Таблица 3.2

Перечень параметров рассматриваемых моделей

Название параметра	Обозначение	Величина	Размерность
Модуль Юнга	$E$	$2 \times 10^{11}$	Па
Коэффициент Пуассона	$\nu$	0,3	-
Модуль сдвига	$\mu$	$7,6923 \times 10^{10}$	Па
Модуль объемного сжатия	$K$	$2,5 \times 10^{11}$	Па
Параметр Ламе	$\lambda$	$1,1538 \times 10^{11}$	Па
Плотность стали	$\rho_S$	7800	$\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
Коэфф. линейного концентрац. расш.	$\alpha$	$0,5 \times 10^{-6}$	-
Коэффициент диффузии	$D_0$	$3 \times 10^{-17}$	$\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$
Радиус цилиндрического образца	$R$	4	мм
Длина образца	$L$	100	мм
Время насыщения	$t$	96	ч
Граничное значение концентрации	$C_{out}$	$1,8956 \times 10^{-5}$	-

### 3.2. Сеточная и временная сходимость численного решения

Для исследования сходимости необходимо зафиксировать значения всех параметров модели, в том числе и неклассических. По предварительным расчетам были выбраны следующие значения параметров:

$$l = 6 \text{ мкм}, \quad D_1 = 0,003, \quad \gamma = 0,5 \text{ Па}^{-1}.$$

Исследование сходимости проводится стандартным способом – измельчением сетки и шага по времени. Феномен высокой локальной концентрации водорода, который исследуется в данной работе, наблюдается в слое толщиной порядка 10 – 110 мкм, а значит шаг по координате необходимо выбирать так, чтобы сетка покрывала данный интервал хотя бы несколькими точками.

Начнем рассмотрение с количества элементов  $N = 100$ ,  $dr = 40$  мкм, и будем постепенно уменьшать шаг. Критерии, по которым оценивается сходимость:

1. толщина насыщенного слоя,
2. средняя концентрация в насыщенном слое.

Предложенные критерии, как не трудно заметить, имеют интегральный характер, а значит по ним можно судить о некоторых общих тенденциях решения, чего в рассматриваемом случае оказывается достаточно.

Масса водорода вычисляется следующим образом

$$m_H = \int_V \rho_S dV = 2\pi L \rho_S \int_0^R \mathcal{C}(r) r dr.$$

Для определения толщины насыщенного слоя построим оценку массы. Т.к. концентрация неотрицательная, монотонно неубывающая<sup>2</sup> (по крайней мере, на некотором удалении от стенки) функция, то для оценки можно воспользоваться свойством монотонности определенного интеграла

$$m_H^* = 2\pi L \rho_S \int_0^{r_*} \mathcal{C}(r) r dr \leq 2\pi L \rho_S \int_0^{r_*} \mathcal{C}(r_*) r dr = \pi L \rho_S \mathcal{C}(r_*) r_*^2.$$

Будем называть величину  $R - r_*$  толщиной насыщенного слоя, если

$$\pi L \rho_S \mathcal{C}(r_*) r_*^2 < \varepsilon^*,$$

где  $\varepsilon^*$  – некоторое наперед заданное значение. Такая оценка позволяет узнать, какое количество водорода может содержаться в образце, если с его поверхности удалить слой толщины  $R - r_*$ .  $\varepsilon^*$  есть величина погрешности, с которой определяется масса, будь то экспериментальное определение (приборная погрешность) или численный расчет (погрешность вычислений). Соответственно величина массы, не превосходящая погрешности, в определении толщины слоя просто не учитывается. В эксперименте и по предварительным расчетам установлено, что при насыщении масса водорода в образце достигает величин

---

<sup>2</sup>на данном этапе это достаточно вольное заявление, однако полученные в дальнейшем профили концентрации это подтверждают.



порядка микрограмма. Чтобы получить результат с точностью в два знака, положим  $\varepsilon^* = 0,01$  мкг.

Средняя концентрация  $\langle C \rangle$  вычисляется как масса водорода в насыщенном слое, отнесенная к массе самого слоя

$$\langle C \rangle = \frac{m_H}{\pi L \rho_S (R^2 - r_*^2)}. \quad (3.2)$$

В данном случае не важно, какая именно масса имеется ввиду – общая или только в насыщенном слое, потому как какую из них ни взять – результат будет получен с достаточной точностью. Далее везде подразумевается, что средние значения концентрации вычислены по полной массе водорода в образце, если явно не указано иного.

**Временная сходимость.** Зафиксируем количество точек координатной сетки  $N = 10^5$  и исследуем зависимость толщины насыщенного слоя и средней концентрации от величины шага по времени. По результатам расчета, представленным на графиках рис. 3.2 и рис. 3.3 можно заключить, что для обеих моделей шаг  $dt = 10$  минут является достаточным для получения надежного результата. При дальнейшем измельчении шага средняя концентрация и толщина слоя изменяются в допустимых пределах.

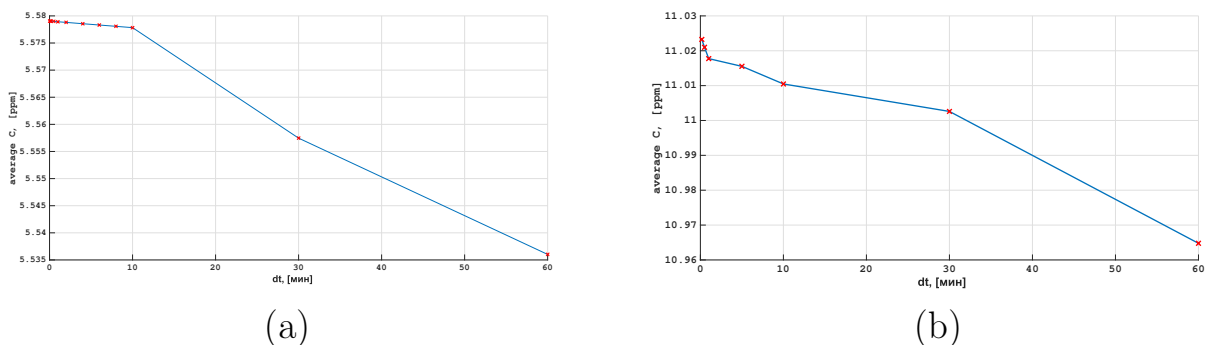


Рис. 3.2. Временная сходимость моделей диффузии по средней концентрации.  
(a)  $D = D_0 + D_1 \varepsilon$ , (b)  $D = D_0 \exp -\gamma P$ .

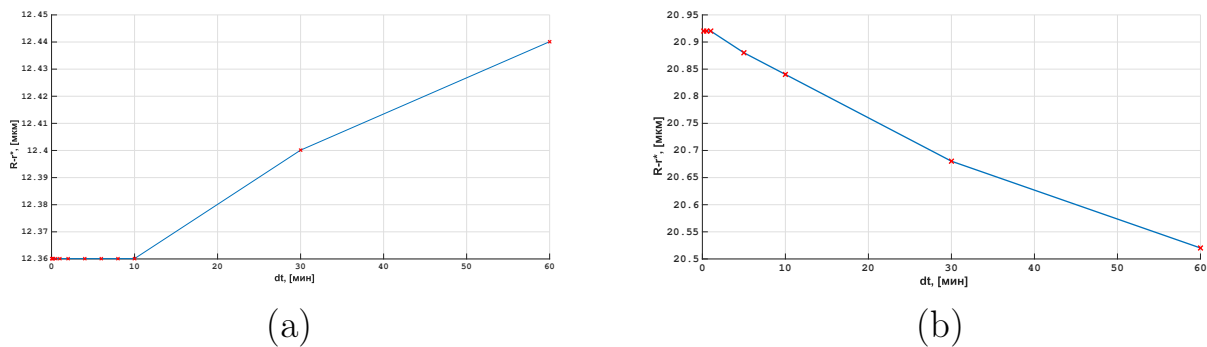


Рис. 3.3. Временная сходимость по толщине насыщенного слоя для моделей:  
(a)  $D = D_0 + D_1\epsilon$ , (b)  $D = D_0 \exp -\gamma P$ .

**Сеточная сходимость.** Возьмем установленное выше оптимальное значение шага по времени и исследуем зависимость толщины насыщенного слоя и средней концентрации от мелкости координатной сетки. Обе зависимости очень быстро выходят на асимптотическое значение, что легко увидеть на соответствующих графиках рис. 3.4 и рис. 3.5. Для дальнейших расчетов берутся значения с запасом, для тензодиффузии  $N = 30000$ , для модели с зависимостью от давлений  $N = 50000$ .

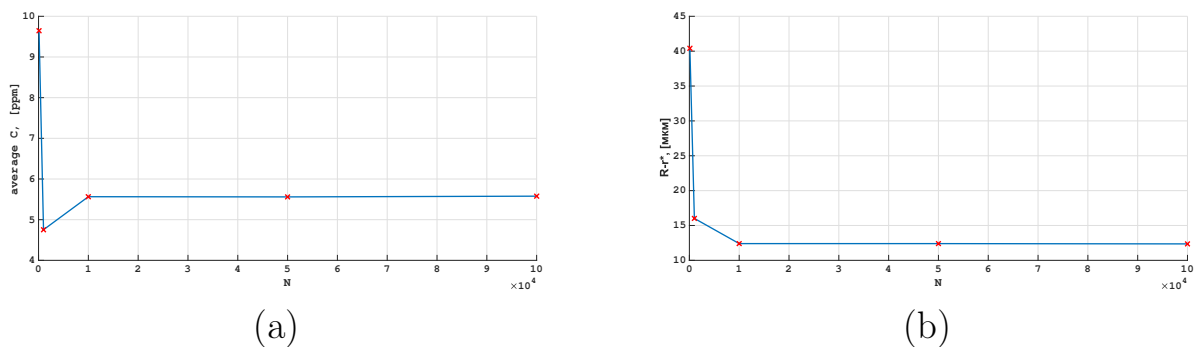


Рис. 3.4. Сеточная сходимость по средней концентрации (a) и толщине насыщенного слоя (b),  $D = D_0 + D_1\epsilon$ .

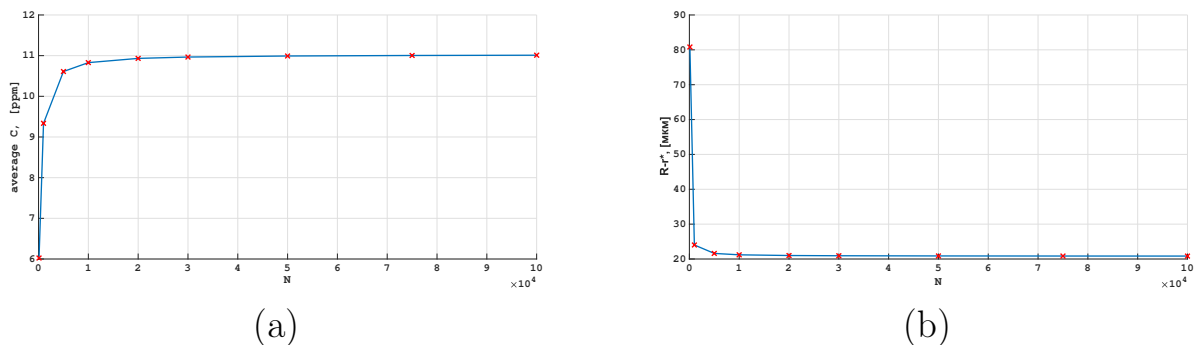


Рис. 3.5. Сеточная сходимость по средней концентрации (a) и толщине насыщенного слоя (b),  $D = D_0 \exp -\gamma P$ .

### 3.3. Зависимость от параметров

Зафиксируем некоторые значения  $D_1$  и  $\gamma$ , чтобы исследовать зависимость профиля концентрации от характерного размера  $l$ . По результатам, представленным на рис. 3.6 и рис. 3.7, мы видим, что в целом профиль концентрации достаточно мало чувствителен к изменению характерного размера. Даже при значении  $l = 4$  мм, равном радиусу образца, профиль уклоняется получаемого в среде Гука (при  $l = 0$ ) незначительно. Отметим существенно различный характер поведения данных профилей. В тензодиффузии процесс формирования зоны повышенной концентрации выражен очень слабо, более глубокие слои содержат в себе достаточно большую часть общей массы. На профиле, соответствующем зависимости от давления формируется четко локализованная зона повышенной концентрации, вне которой водорода практически нет.

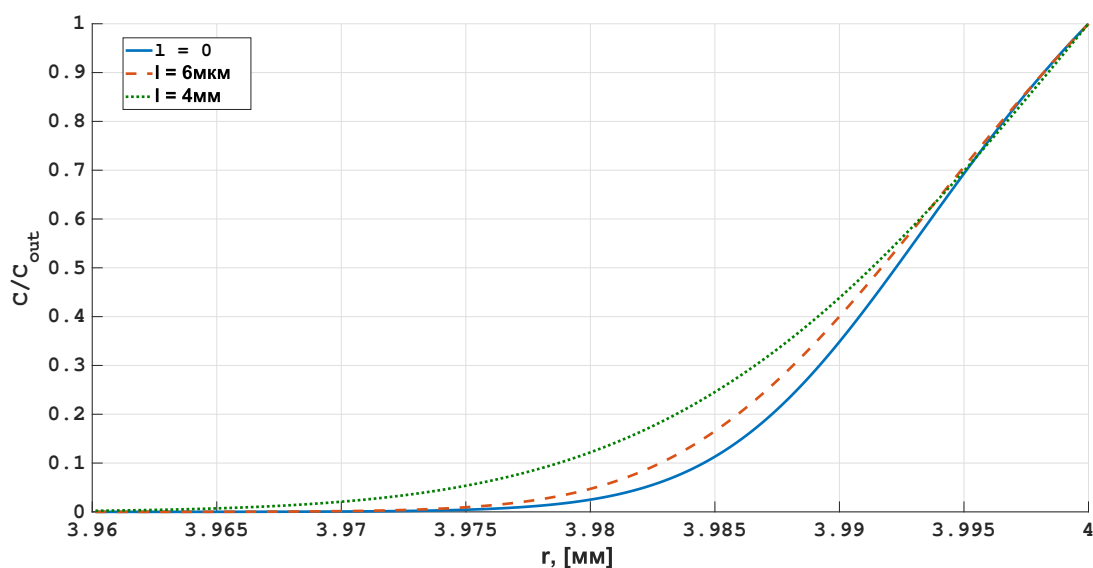


Рис. 3.6. Зависимость профиля концентрации от характерного размера  $l$  (Модель  $D = D_0 + D_1\varepsilon$ ,  $D_1 = 0,003$ ).

В обоих моделях при увеличении характерного размера растет общая масса водорода (профиль очевидно «поднимается») и толщина насыщенного слоя. В табл. 3.3 приведены средние концентрации, массы и толщины насыщенных слоев при некоторых значениях характерного размера. В тензодиффузии толщина насыщенного слоя растет быстрее массы, т.к. средняя концентрация падает. Из общего ряда выбиваются только величины при  $l = 2$  мкм, что легко объясняется ошибкой округления. При зависимости от давления все

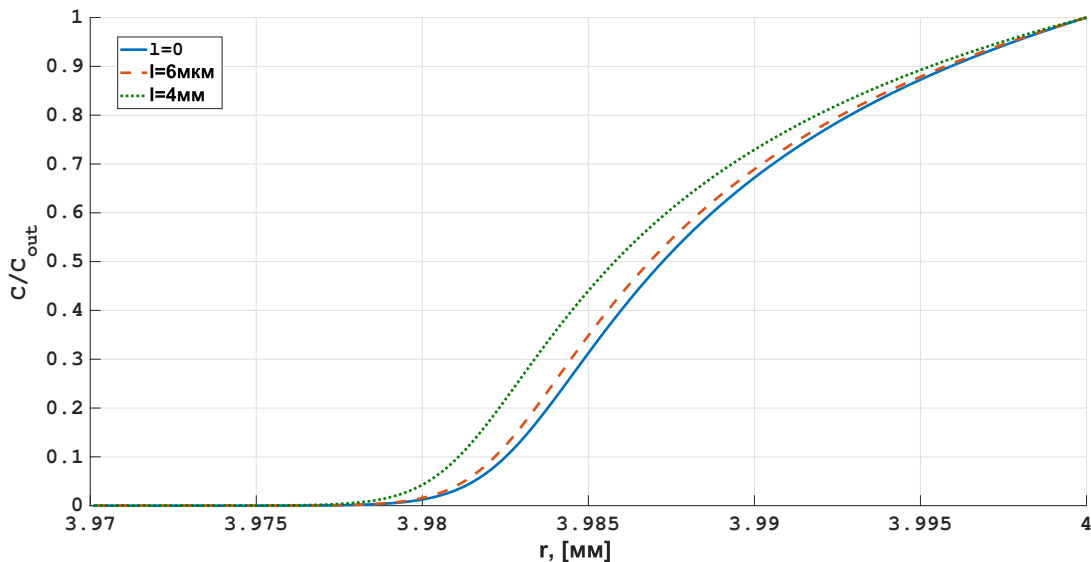


Рис. 3.7. Зависимость профиля концентрации от характерного размера  $l$  (Модель  $D = D_0 \exp -\gamma P$ ,  $\gamma = 0,5$ ).

рассматриваемые величины растут, но немного в разной пропорции. Толщина слоя практически не изменяется, но увеличивается масса, за счет чего растет и средняя концентрация. В целом можно сделать вывод, что характерный размер влияет на исследуемые величины незначительно.

Таблица 3.3

Исследуемые величины при различных значениях характерного размера

$l$ , [мкм]	$D = D_0 + D_1 \varepsilon$			$D = D_0 \exp -\gamma P$		
	$\langle C \rangle$ , [ppm]	$R - r_*$ , [мкм]	$m_H$ , [мг]	$\langle C \rangle$ , [ppm]	$R - r_*$ , [мкм]	$m_H$ , [мг]
0	6,61	24	0,0031	10,86	21	0,0044
2	6,67	24	0,0032	10,86	21	0,0044
6	6,60	26	0,0035	10,99	21	0,0045
12	6,41	28	0,0035	11,12	21	0,0046
72	5,79	32	0,0037	11,23	22	0,0048
4000	5,57	35	0,0038	11,26	22	0,0048

Изучим зависимости моделей диффузии от их параметров. Изменение параметра  $D_1$  сказывается на результатах благоприятно, т.к. толщина слоя и общая масса растут в такой пропорции, что растет и средняя концентрация (см. табл. 3.4). На рис. 3.8 видно, что по мере увеличения общей массы водорода в образце центр тяжести его распределения смещается внутрь.

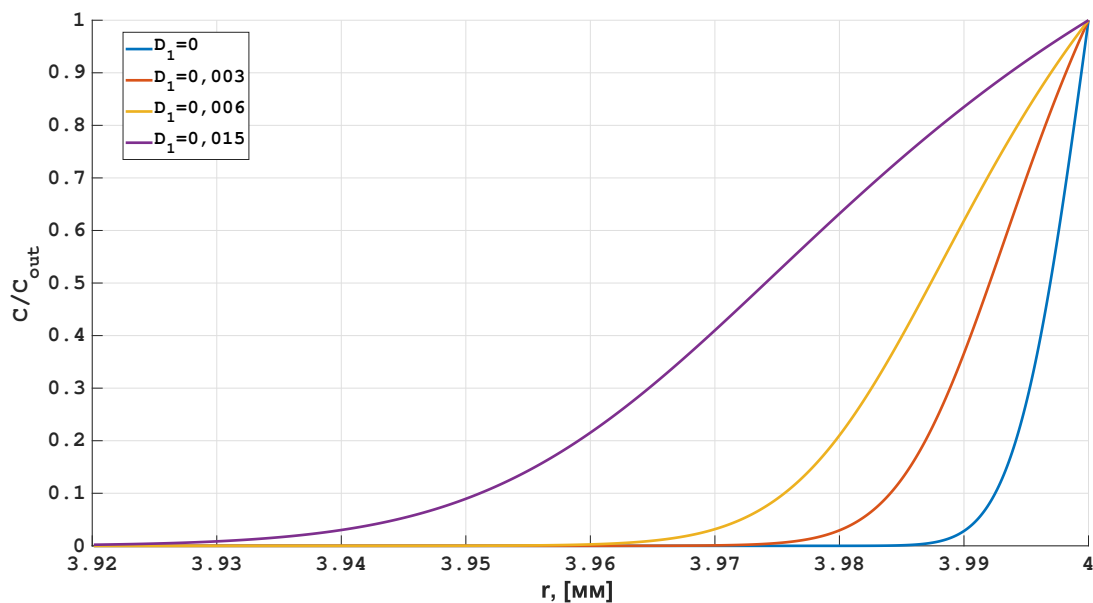


Рис. 3.8. Зависимость профиля концентрации от параметра  $D_1$  модели тензодиффузии ( $l = 6$  мкм).

Таблица 3.4

Исследуемые величины в зависимости от параметра тензодиффузии  $D_1$

$D_1$	$\langle C \rangle$ , [ppm]	$R - r^*$ , [мкм]	$m_H$ , [мк]
0	5,56	12	0,0013
0,003	6,60	26	0,0034
0,006	6,96	39	0,0052
0,015	7,23	74	0,0104

Зависимость от давления демонстрирует аналогичный результат в том смысле, что все исследуемые величины растут (см. табл. 3.5). Заметное отличие видно на графике рис. 3.9 – при увеличении параметра профиль концентрации начинает постепенно «выгибаться». Это следствие того, что вблизи границы образуется зона высокой концентрации. С дальнейшим увеличением параметра концентрация наиболее близких к границе слоев растет незначительно по сравнению с более глубокими слоями. Данный результат можно хорошо согласовать с экспериментальными данными в том случае, если общая масса в полученном распределении будет приблизительно соответствовать экспериментальной. Проверке этого соответствия посвящен следующий раздел.

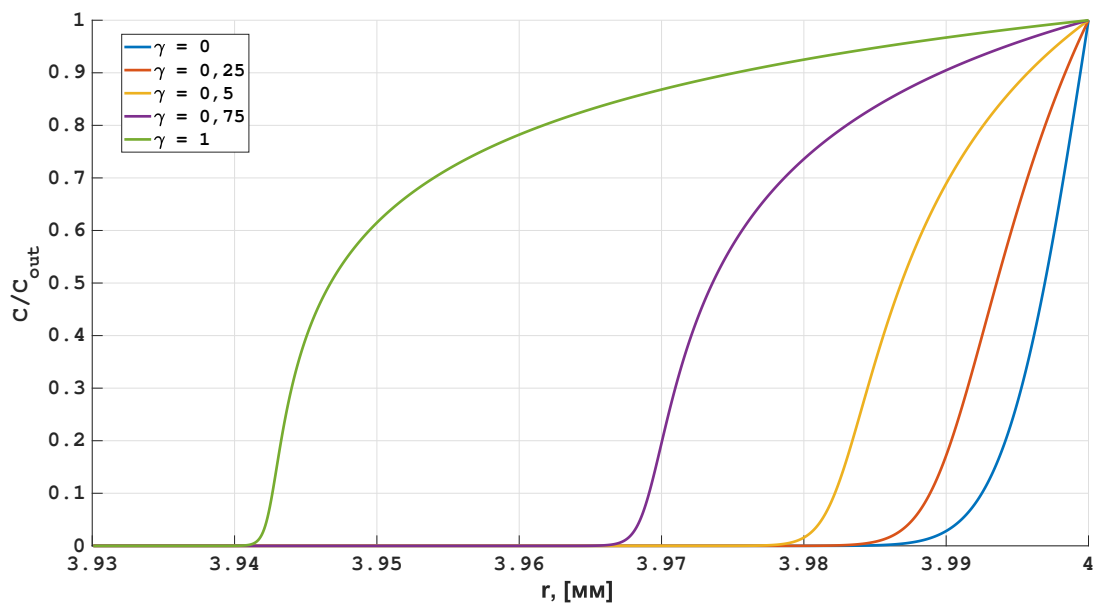


Рис. 3.9. Зависимость профиля концентрации от параметра  $\gamma$  модели зависимости от давления ( $l = 6$  мкм).

Таблица 3.5

Исследуемые величины в зависимости от параметра зависимости от давления  $\gamma$

$\gamma$	$\langle C \rangle$ , [ppm]	$R - r^*$ , [мкм]	$m_H$ , [мг]
0	5,56	12	0,0014
0,25	8,08	15	0,0024
0,5	10,99	21	0,0045
0,75	13,53	33	0,0087
1	15,22	58	0,0173

### 3.4. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными

Из неоднократно упоминавшегося ранее эксперимента [13] известно распределение средней концентрации водорода, представленное на рис. 3.10. Распределение в слое 60 мкм, представляющее наибольший интерес, из эксперимента неизвестно. По формуле (3.2) можно рассчитать массу водорода в экспериментальном образце, которая составляет приблизительно 0,036 мг. В рассматриваемых в данной работе моделях практически аналогичные значения массы достигаются при  $D_1 = 0,0651$  (0,0360 мг для градиентной среды и 0,0357 мг для среды Гука) и  $\gamma = 1,26$  (0,0361 мг в обеих средах).

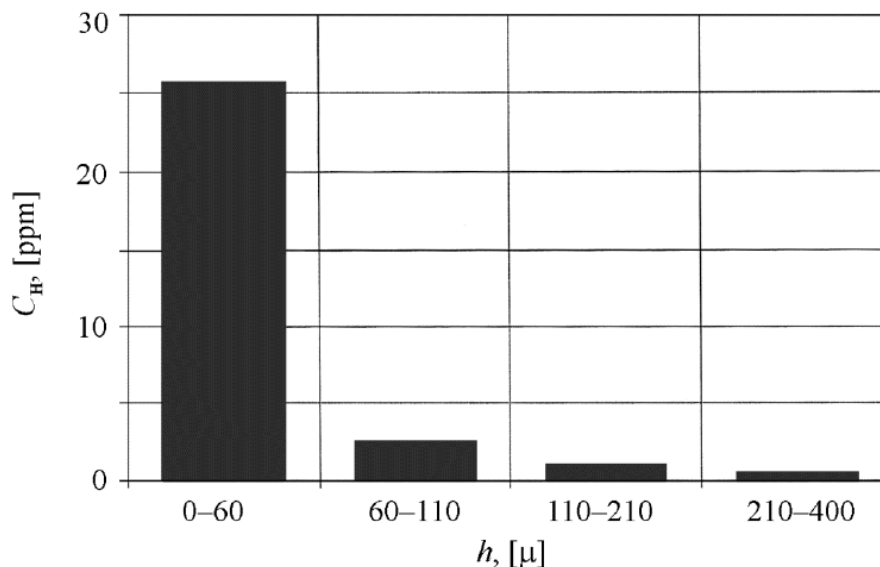


Рис. 3.10. Расчетные средние значения полной концентрации водорода в поверхностных слоях цилиндрических образцов в зависимости от расстояния  $h$  от границ слоя до поверхности образца.

На рис. 3.11 представлены распределения средней концентрации, полученные в результате расчета. Профили построены по аналогичному рис. 3.10 принципу.

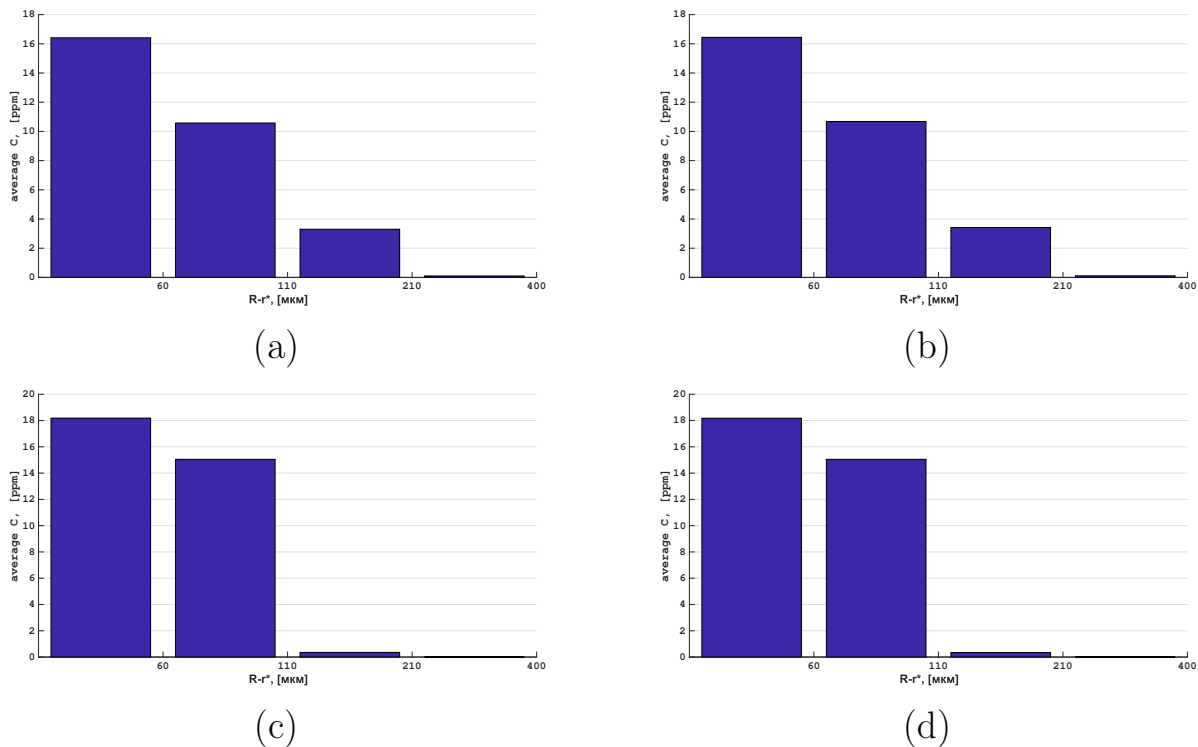


Рис. 3.11. Расчетные средние значения концентрации водорода в зависимости от расстояния от границы слоя. (a) –  $D = D_0 + D_1\varepsilon$ , среда Гука; (b) –  $D = D_0 + D_1\varepsilon$ , градиентная среда; (c) –  $D = D_0 \exp -\gamma P$ , среда Гука; (d) –  $D = D_0 \exp -\gamma P$ , градиентная среда.

На представленных изображениях видно, что при массе, сопоставимой с экспериментальной, распределения водорода отличаются достаточно сильно. Во всех моделях пристеночный слой насыщен существенно меньше, а внутренние больше чем ожидалось. Особенно сильно это проявляется при зависимости от давления. Также стоит отметить, что в рассматриваемых результатах практически не прослеживается отличие градиентной среды от среды Гука, разница в результатах на уровне погрешности. Для более наглядной демонстрации этого факта построены профили концентрации рис. 3.12.

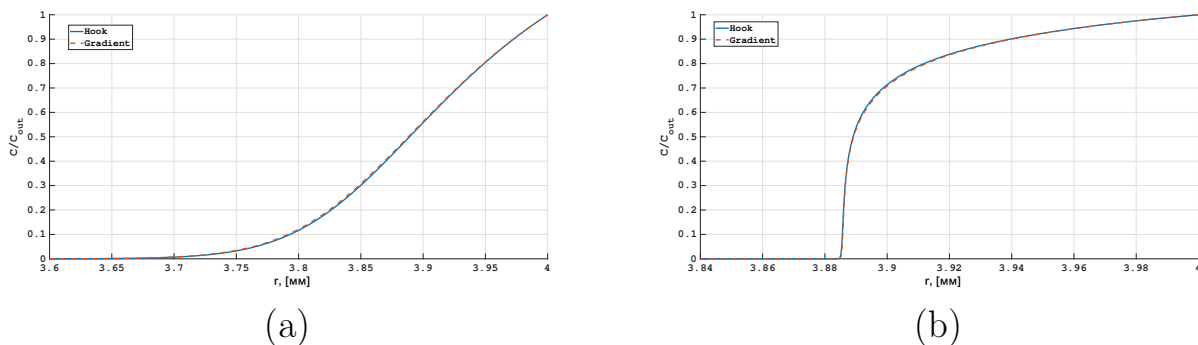


Рис. 3.12. Сравнение профилей концентрации в среде Гука и градиентной среде.  
(a)  $D = D_0 + D_1\varepsilon$ , (b)  $- D = D_0 \exp -\gamma P$ .

Соответствие результатов расчета эксперименту весьма условно. Обе предложенные модели позволяют получить заданную массу водорода в образце за счет регулировки параметров, однако распределение этой массы существенно уклоняется от экспериментального. Профиль концентрации, соответствующий экспериментальному распределению, должен иметь область вблизи границы, в которой величина концентрации превышает граничное значение. Это легко проверить простым вычислением: допустим, что у нас имеется профиль концентрации, в котором на протяжении 60 мкм наблюдается величина концентрации  $C_{out}$ . Средняя концентрация в ppm равна

$$\langle C \rangle = C_{out} \times 10^6 = 18,956 \text{ ppm},$$

а это меньше необходимого. Значит концентрация в слое должна превосходить величину  $C_{out}$ . От предложенных моделей диффузии такого превышения добиться невозможно. Для корректного описания феномена высокой локальной концентрации необходима модификация рассмотренных моделей или формулировка альтернативных.



## Заключение

В работе был рассмотрен процесс диффузии в деформируемой среде. В качестве модели среды была предложена градиентная теория, упрощенная для случая объемной деформации. Для учета зависимости процесса диффузии от напряженно-деформированного состояния были рассмотрены две модели диффузии, одна из которых вводит зависимость от деформации, другая – от напряжения. Была поставлена и решена связанная задача диффузии в градиентной упругой среде, исследована зависимость решения от параметров моделей, выявлены основные закономерности полученных профилей концентрации.

Сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными показывает, что полученная модель не может адекватно описать исследуемый феномен высокого локального увеличения концентрации вблизи границы образца. В рассматриваемых моделях наблюдается существенно большее насыщение более глубоких слоев образца и меньшее – пограничного слоя. Для обоих рассматриваемых моделей данный недостаток не может быть устранен без введения дополнительных модификаций. Также было обнаружено, что градиентная теория не дает практически никакого вклада в полученное решение. Это выражается в том, что получаемое распределение водорода не отличается от такового в среде Гука.

В качестве продолжения исследования можно рассмотреть дальнейшее насыщение образцов и получить зависимость распределения концентрации от времени. Отдельный интерес представляет рассмотрение построенных на основе градиентной теории моделей, вводящих дополнительную движущую силу, связанную с градиентом давления или химического потенциала. Такая модель может быть рассмотрена отдельно или в совокупности с предложенными в данной работе.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] **Лурье А.И.** Теория упругости — М.: Наука, 1970. — 940 с.
- [2] **Формалёв В.Ф., Ревизников Д.Л.** Численные методы — М.: Физматлит, 2004. — 400 с.
- [3] **Григорьева П.М., Вильчевская Е.Н.** Влияние выбора модели диффузии на кинетику химической реакции./ *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. 2018, Iss.6, p.59–82.
- [4] **Индейцев Д.А., Мочалова Ю.А.** Диффузия примеси в материале под действием вибрационных нагрузок./ *Чебышевский сборник*. 2017, Т.18, Вып.3, с.290–303.
- [5] **Князева А.Г.** Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике./ *Математическое моделирование систем и процессов*. 2005, №13, с.45–60.
- [6] **Лобко В.Н., Бекман И.Н.** Моделирование одномерной диффузии в металлах. Часть 1./ *Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология»*. 2010, №10(90), с.36–42.
- [7] **Миколайчук М.А., Князева А.Г.** Влияние напряжений и деформаций на перераспределение примеси в пластине в условиях одноосного нагружения./ *Прикладная механика и техническая физика*. 2010, Т.51, №3, с.147–157.
- [8] **Никольская Н.А., Проскура А.В.** Зависимость коэффициента диффузии от напряжения./ *Вестник ТГУ*. 1998, Т.3, Вып.3, с.258–260.
- [9] **Чермошнцева А.А., Плотников И.С.** Численные схемы решения двумерного уравнения теплопроводности в цилиндрических координатах./ *Вестник Камчатского государственного технического университета*. 2011, №15, с.21–25.
- [10] **Яковлев Ю.А., Полянский В.А., Седова Ю.С., Беляев А.К.** Модели влияния водорода на механические свойства металлов и сплавов./

Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2020, №3, с.136–160.

- [11] **Abali B.E., Müller W.H., dell’Isola F.** Theory and computation of higher gradient elasticity theories based on action principles./ *Archive of Applied Mechanics*. 2017, 87, p.1495–1510.
- [12] **Aifantis E.C.** Strain gradient interpretation of size effects./ *International Journal of Fracture*. 1999, 95, p.299–314.
- [13] **Alekseeva E.L., Belyaev A.K., Zegzhda A.S., Polyanskiy A.M., Polyanskiy V.A., Frolova K.P., Yakovlev Yu.A.** Boundary layer influence on the distribution of hydrogen concentrations during hydrogen-induced cracking test of steels. / *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. 2018, 3, p.43–57.
- [14] **Frolova K.P., Vilchevskaya E.N., Bessonov N.M.** On modeling the diffusion process in the vicinity of the sample surface within micropolar and classical approaches. *ZAMM*, 2016.
- [15] **Konopel’ko L.A., Polyanskiy A.M., Polyanskiy V.A., Yakovlev Yu.A.** New Metrological Support for Measurements of the Concentration of Hydrogen in Solid Samples./ *Measurement Techniques*. 2018, Vol.60, №12, p.1222–1227.
- [16] **Lurie S.A., Kalamkarov A.L., Solyaev Yu.O., Volkov A.V.** Dilatation gradient elasticity theory. // *European Journal of Mechanics / A Solids* 88, 2021.
- [17] **Polyanskiy V.A., Belyaev A.K., Alekseeva E.L., Polyanskiy A.M., Tretyakov D.A., Yakovlev Yu.A.** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption./ *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2019, 31(6), p.1961–1975.
- [18] **Stashchuk M.H.** Mutual influence of the stress-strain state and hydrogen concentrations in the metal-hydrogen system./ *Materials Science*. 2012, Vol. 47, №4, p.499–508.