



**ПОЛИТЕХ**  
Санкт-Петербургский  
политехнический университет  
Петра Великого



**ФИЗМЕХ**  
Физико-механический  
институт



**ТЕОРМЕХ**  
Высшая школа теоретической механики  
и математической физики

# Моделирование процесса диффузии в градиентной упругой среде

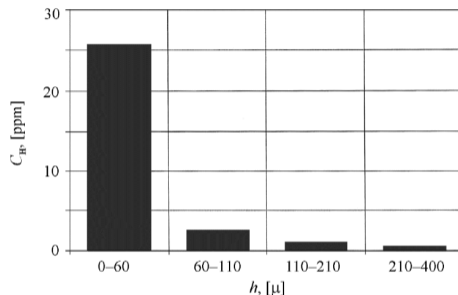
Выпускная квалификационная работа бакалавра

Выполнил:

студент гр. 5030103/80301 Фролов М.М.

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор ВШТМиМФ Вильчевская Е.Н.



Средние значения концентрации водорода в зависимости от расстояния  $h$  от границы слоя до поверхности образца<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Alekseeva E.L. et al. 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.

# Введение

---

**Цель работы:** исследовать возможность применения градиентной модели для описания пограничного слоя, возникающего в процессе насыщения металла водородом.

## **Основные гипотезы:**

1. концентрация водорода на боковой поверхности образца постоянна и не меняется со временем;
2. в процессе диффузии водород не оседает на решетке образца и не меняет его механические свойства;
3. единственная причина возникновения напряженно-деформированного состояния в образце – наличие в нем водорода;
4. напряженно-деформированное состояние образца квазистационарно;
5. гипотеза плоских сечений.

# Уравнение диффузии

---

Классическое уравнение диффузии

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (1)$$

$$\mu_H = \mu_H^0 + RT \ln \mathcal{C}, \quad (2)$$

$$\mathbf{J} = -\frac{D}{RT} \mathcal{C} \nabla \mu_H = -D \nabla \mathcal{C} \quad (3)$$

В цилиндрических координатах

$$\frac{\partial \mathcal{C}(r, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D \frac{\partial \mathcal{C}(r, t)}{\partial r} \right) \quad (4)$$

Граничные условия

$$\mathcal{C} \Big|_{R, t} = \mathcal{C}_{out}, \quad \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{0, t} = 0 \quad (5)$$

# Модификации уравнения диффузии

---

## 1) Тензодиффузия

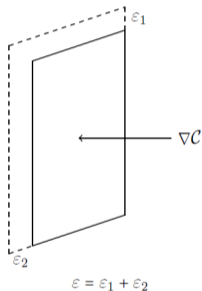
– зависимость коэффициента диффузии от деформации

$$D(\varepsilon) = D_0 + D_1\varepsilon, \quad (6)$$

в рассматриваемом случае  $\varepsilon = \varepsilon_\varphi + \varepsilon_z$ .

## 2) Зависимость коэффициента диффузии от давления

$$D(P) = D_0e^{-\gamma P}. \quad (7)$$



# Градиентная модель линейно-упругой среды

---

Линейно-упругая среда Гука – деформированное состояние задается линейным тензором деформации  $\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u})^S$ .

Линейно-упругая градиентная среда – деформированное состояние задается линейным тензором деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и градиентом объемной деформации  $\nabla \theta = \nabla \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}$ .

Определяющие соотношения получаются из формы внутренней энергии

$$U(\boldsymbol{\varepsilon}, \nabla \theta) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} A \nabla \theta \cdot \nabla \theta, \quad (8)$$

${}^4\mathbf{C}$  – тензор жесткости,  $A$  – микроструктурный параметр.

«Усилия» в градиентной среде:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \lambda \theta \mathbf{E} + 2\mu \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\Gamma} = \frac{\partial U}{\partial (\nabla \theta)} = A \nabla \theta = A \boldsymbol{\pi}. \quad (9)$$

# Граничная задача в градиентной среде

---

Напряжение и давление градиентной среды

$$\boldsymbol{\sigma}_g = \boldsymbol{\tau} - (\nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma})\mathbf{E} = \lambda\theta\mathbf{E} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} - A\Delta\theta\mathbf{E}, \quad P = -\frac{1}{3}\text{tr}\boldsymbol{\sigma}_g = -K\theta + A\Delta\theta. \quad (10)$$

Напряжение двухкомпонентной системы сталь-водород

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_g - 3\alpha K C \mathbf{E} \quad (11)$$

Уравнение равновесия градиентной среды

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \lambda\nabla\theta + 2\mu\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - A\nabla\Delta\theta - 3\alpha K\nabla C = 0. \quad (12)$$

Граничные условия

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Big|_S = \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad \text{или} \quad \mathbf{u} \Big|_S = \mathbf{U}, \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Gamma} \Big|_S = \Pi = 0 \quad \text{или} \quad \theta \Big|_S = \Theta. \end{aligned} \quad (13)$$

# Граничная задача в градиентной среде

---

Преобразование уравнения равновесия

$$\begin{cases} \boldsymbol{\pi} - l^2 \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \nabla \mathcal{C}, \\ \boldsymbol{\pi} = \nabla \theta \end{cases}, \quad l = \sqrt{\frac{A}{\lambda + 2\mu}}. \quad (14)$$

$l$  – характерный размер микроструктуры.

Проекция на оси цилиндрической системы координат

$$\mathbf{u} = u_r(r) \mathbf{e}_r + u_z(z) \mathbf{e}_z, \quad \theta = \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{du_r}{dr} + \frac{u_r}{r} + \frac{du_z}{dz}, \quad \nabla \mathcal{C} = \frac{\partial \mathcal{C}(r, t)}{\partial r} \mathbf{e}_r,$$
$$\begin{cases} \pi_r - l^2 \left( \frac{d^2 \pi_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\pi_r}{dr} - \frac{\pi_r}{r^2} \right) = \frac{3\alpha K}{\lambda + 2\mu} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r}, \\ \pi_r = \frac{d^2 u_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_r}{dr} - \frac{u_r}{r^2} \end{cases}, \quad \begin{cases} \pi_z - l^2 \frac{\partial^2 \pi_z}{\partial z^2} = 0 \\ \pi_z = \frac{d^2 u_z}{dz^2} \end{cases}. \quad (15)$$



# Начально-граничная задача

---

Система уравнений

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

Модели диффузии

$$D = D_0 + D_1 \frac{u_r}{r},$$

$$D = D_0 e^{-\gamma P}$$

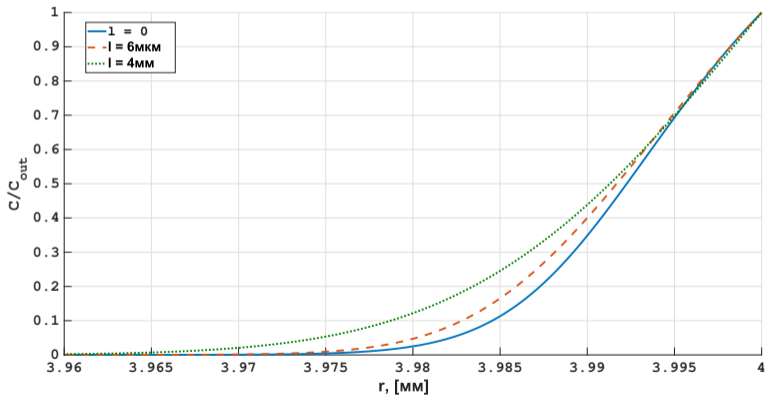
Граничные условия

$$u_r \Big|_0 = 0, \quad \sigma_r \Big|_R = \left[ \lambda \left( \frac{du_r}{dr} + \frac{u_r}{r} \right) + 2\mu \frac{du_r}{dr} - A \left( \frac{d\pi_r}{dr} + \frac{\pi_r}{r} \right) - 3\alpha K \mathcal{C} \right]_R = 0,$$

$$\pi_r \Big|_0 = 0, \quad \pi_r \Big|_R = 0, \quad \mathcal{C} \Big|_{R,t} = \mathcal{C}_{out}, \quad \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial r} \Big|_{0,t} = 0.$$

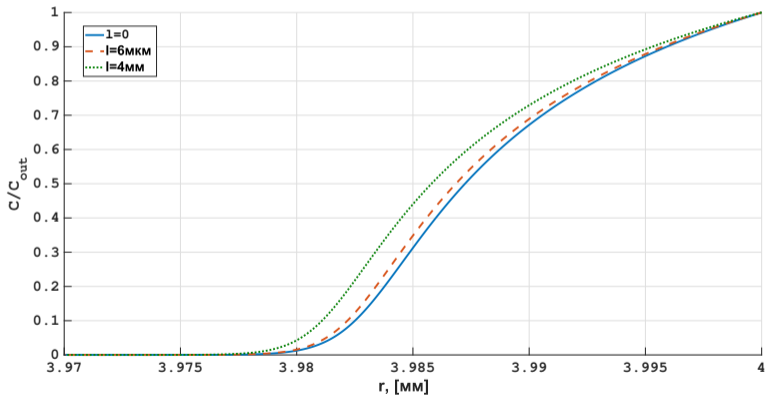
# Зависимость профиля концентрации от характерного размера микроструктуры $l$ ( $D(\varepsilon) = D_0 + D_1\varepsilon$ )

---



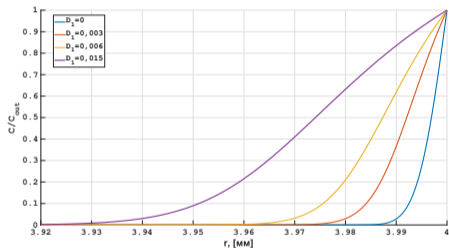
# Зависимость профиля концентрации от характерного размера микроструктуры $l$ ( $D(P) = D_0 \exp -\gamma P$ )

---

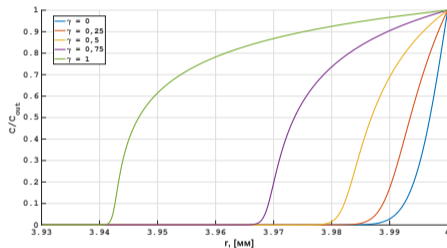


# Зависимость профиля концентрации от параметров моделей диффузии $D_1$ и $\gamma$

---



$$(D = D_0 + D_1 \varepsilon)$$

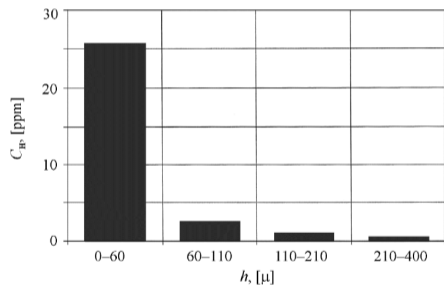


$$(D = D_0 \exp -\gamma P)$$

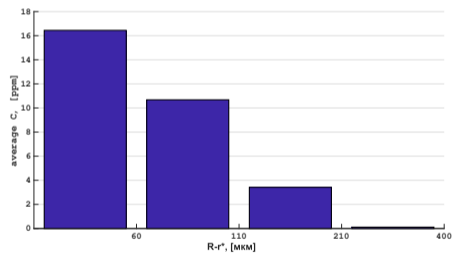
# Сравнение с экспериментом.

Модель  $D = D_0 + D_1\varepsilon$ , градиентная среда

---



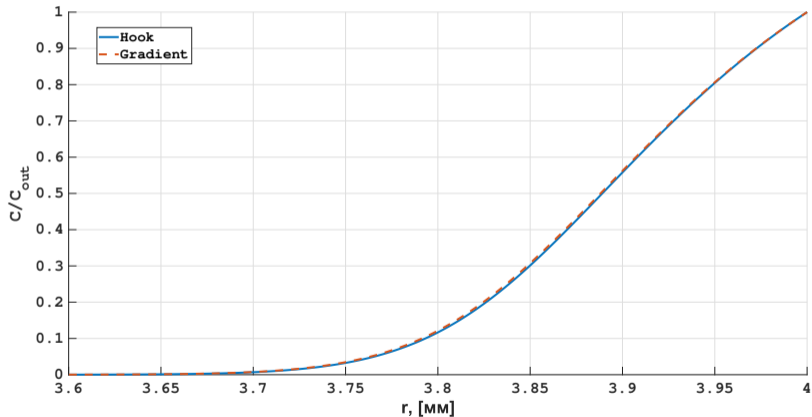
эксперимент



тензодиффузия, градиентная среда

# Модель $D = D_0 + D_1\varepsilon$ в градиентной среде и среде Гука

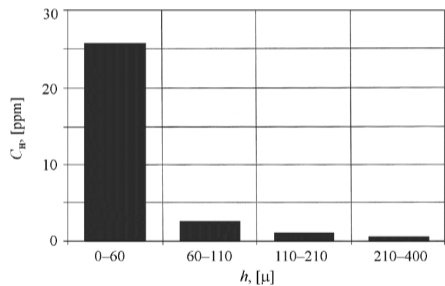
---



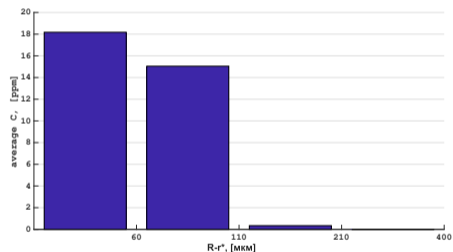
# Сравнение с экспериментом.

Модель  $D = \exp -\gamma P$ , градиентная среда

---



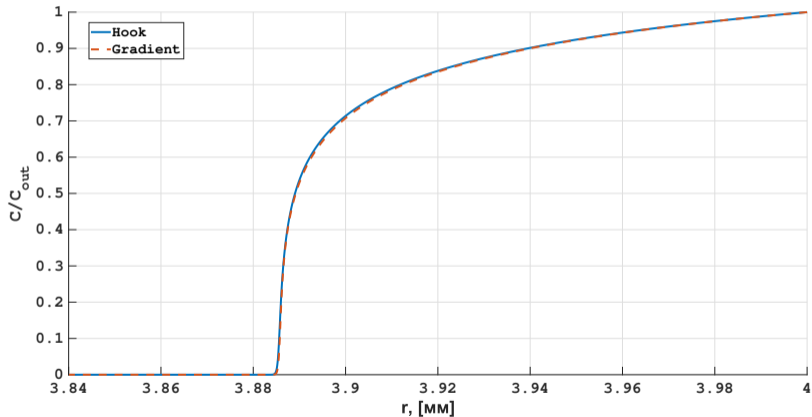
эксперимент



зависимость от давления, градиентная среда

# Модель $D = \exp -\gamma P$ в градиентной среде и среде Гука

---





# Заключение

---

Выводы по полученным результатам:

1. рассмотренные модели не могут адекватно описать исследуемый феномен высокого локального увеличения концентрации вблизи границы образца;
2. в рассмотренных моделях наблюдается существенно большее насыщение более глубоких слоев и меньшее – пограничного слоя;
3. данный недостаток внутренне присущ обоим рассмотренным моделям и не может быть устранен регулировкой параметров;
4. градиентная теория не дает практически никакого вклада в полученное решение.

# Заключение

---

Направления дальнейших исследований:

1. рассмотрение энергетических зависимостей для коэффициента диффузии;
2. введение дополнительной движущей силы, связанной с давлением среды;
3. введение в модель «запирающих» эффектов (оседание водорода на решетке образца).

Спасибо за внимание!

