

Численное моделирование ТДС-спектра дегидрирования металлов с учетом теплопоглощения и сжатия¹²

Родченкова Наталья Ивановна

аспирант

*Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН,
Петрозаводск, Россия*

E-mail: rodchenk@krc.karelia.ru

В связи с возрастающими экологическими требованиями особое внимание уделяется перспективам использования водорода в качестве энергоносителя. Ведется интенсивный поиск материалов для эффективного решения задач хранения и транспортировки водорода и его изотопов. Экспериментальные исследования требуют разработки математических моделей взаимодействия водорода с твердым телом и методов их параметрической идентификации. В работе рассматривается численный метод решения краевой задачи с нелинейными динамическими граничными условиями и подвижными границами, моделирующей кинетику выделения водорода из гидрида металла с учетом динамики межфазового перехода, сжатия частиц порошка гидрида в процессе дегидрирования, десорбционных процессов на поверхности и теплопоглощения на границе раздела фаз металл-гидрид. Модель представлена применительно к экспериментальному методу термодесорбционной спектроскопии (ТДС): образец порошкообразного гидрида металла помещают в камеру с последующим постоянным вакуумированием и относительно медленным нагревом; внутреннее гидридное ядро частиц сжимается, а снаружи нарастает корка металла с растворенным водородом. При этом, в связи с перестройкой решетки на движущейся границе раздела фаз, происходит сжатие частиц порошка. Разложение гидрида сопровождается теплопоглощением. На поверхности атомы водорода рекомбинируют в молекулы и десорбируются. С помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток водорода и оцениваются кинетические параметры модели.

В докладе представлена разностная схема и итерационный вычислительный алгоритм для рассматриваемой нелинейной краевой задачи, результаты вычислительных экспериментов по оценке кинетических параметров модели. Исследовано влияние вариаций параметров на график выходного десорбционного потока. В результате сопоставления с экспериментальными данными выявлены лимитирующие факторы, сделан вывод о том, что модель адекватно описывает физико-химические процессы, происходящие при дегидрировании металлов, и может быть использована для решения обратных задач параметрической идентификации по экспериментальным данным.

Литература

1. Заика Ю.В., Родченкова Н.И. (2005) Моделирование ТДС-спектра дегидрирования с учетом сжатия и теплопоглощения // Обозрение прикладной и промышленной математики. Т. 12, вып. 4, с. 957-960.
2. Заика Ю.В., Родченкова Н.И. (2006) Моделирование высокотемпературного пика ТДС-спектра дегидрирования // Матем. моделирование. Т. 18, № 4, с. 100-112.
3. Zaika Yu. V., Rodchenkova N.I. (2006) TDS-Spectra of Hydride Powder Decomposition: Modelling with Size Reduction Effect // NATO Security through Science Series A: Chemistry and Biology, Springer, P. 585-596.

¹ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках Программы 3 фундаментальных исследований Отделения математических наук РАН «Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач».

² Автор выражает благодарность «Фонду содействия отечественной науке» за поддержку работы.