УДК 620.197.5: 669.788

ВПЛИВ ПАРАМЕТРІВ ДИСКРЕТИЗАЦІЇ НА ТОЧНІСТЬ ЧИСЛОВОГО РОЗВ'ЯЗКУ ТРИВИМІРНОЇ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ ВОДНЮ

О. В. ГЕМБАРА [1], *О. Я. ЧЕПІЛЬ* [1], *Н. Т. ГЕМБАРА* [2]

[1] *Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, Львів;*

[2] *Львівський національний університет ім. Івана Франка*

Розроблено алгоритм та програми розв'язування тривимірної задачі дифузії водню. Апробовано числові розв'язки задач теплопровідності та дифузії водню в тривимірному формулюванні на тестових задачах, для яких отримано аналітичні розв'язки. Побудовано залежність відносної похибки від густини сітки розбиття та часових проміжків за використання методу скінченних елементів.

Ключові слова: *теплопровідність, дифузія водню, метод скінченних елементів, тривимірна задача, відносна похибка.*

Під час експлуатації сталевих конструкцій водень, що надходить у метал внаслідок реакцій з навколишнім або технологічним середовищем, полегшує зародження і ріст мікротріщин у конструкційних сталях завдяки фізико-хімічним процесам і електрохімічній дії. Експериментальним шляхом [1] оцінити у робочому елементі конструкції рівень наводнювання за товщиною металу практично неможливо. Тому актуальними є розрахункові методи. Нижче розроблено алгоритм і відповідні програми для визначення температурного поля та концентрації водню у всьому об'ємі елемента конструкції з урахуванням впливу силових та теплових чинників.

Формулювання задачі. У загальному випадку неоднорідного матеріалу і наявності неоднорідних полів рушійними силами дифузії можуть бути градієнти концентрації, механічних напружень або температури. Згідно з літературними даними [1], розподіл усередненого значення концентрації водню C в макроізотропному матеріалі описують рівнянням Фіка:

$$\vec{J}_{\rm H} = -DC\left(\operatorname{grad}\ln\frac{C}{k_S} + \frac{1}{RT}\operatorname{grad}(V_{\rm H}\sigma_h) + \frac{Q}{RT}\operatorname{grad}T\right), \quad \frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div}\vec{J}_{\rm H}. \qquad (1)$$

Тут $\vec{J}_{\rm H}$ – густина дифузійного потоку водню; D – коефіцієнт дифузії водню в металі; k_s – коефіцієнт розчинності водню в металі; R – універсальна газова стала; T – абсолютна температура; $V_{\rm H}$ – парціальний молярний об'єм водню в металі; σ_h – гідростатична компонента тензора напружень у металі; Q – теплота перенесення водню в металі; t – час.

Аналітично розв'язати рівняння (1) у тривимірному формулюванні проблематично. Тому його розв'язували числово за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ).

У математиці рівняння теплопровідності є частковим випадком рівняння дифузії, коли в останньому деякі з коефіцієнтів дорівнюють нулю або є сталими. Тому надалі розглядаємо алгоритм тільки для рівняння дифузії.

Алгоритм розв'язання задачі МСЕ. Вивчаючи дифузію водню в елементах конструкцій за дії зовнішнього силового навантаження та температурного поля, важ-

Контактна особа: О. Я. ЧЕПІЛЬ, e-mail: hembara@ipm.lviv.ua

ливо врахувати вплив механічних напружень та температури. Тому для визначення концентрації водню у тілі об'ємом V, обмеженого поверхнею S, необхідно розв'язати рівняння Фіка (1) у такому вигляді [2, 3]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \vec{\nabla}(D(T)\vec{\nabla}C) - \vec{\nabla}\left(\frac{DV_{\text{H}}}{RT}\vec{\nabla}\sigma_h\right) \tag{2}$$

Вважаємо, що поверхня S складається із поверхні S_c, де задана концентрація водню C_s, та поверхні S_Φ, де заданий потік водню Φ

$$\vec{J}\vec{n} = \Phi \tag{3}$$

Помножимо рівняння (1) на довільну функцію C_L, яка є диференційована та інтегрована в межах об'єму V. Отримаємо:

$$\iiint_V C_L\left[\frac{\partial C}{\partial t} - \nabla(D\nabla C) + \nabla\left(\frac{DV_{\text{H}}}{RT}\nabla\sigma_h\right)\right]dV = 0\,. \tag{4}$$

Враховуючи вираз (3), рівняння (2) можна записати у вигляді [4]

$$\iiint_V\left[\delta C\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla\delta C D\nabla C - \nabla\delta C\frac{DV_{\text{H}}}{RT}C\nabla\sigma_h\right]dV + \iint_{S_\Phi}\delta C\Phi dS = 0\,. \tag{5}$$

Надалі розглядаємо рівняння (5) у декартовій системі координат (тривимірна задача).

Для розрахунку використовували просторові восьмикутні скінченні елементи.

Нехай концентрацію водню та гідростатичні напруження у елементі визначають через їх значення у вузлах елемента, згідно з такими формулами [5]:

$$C^{(e)}(x,y,z,t) = \sum_{i=1}^{8} N_i(x,y,z)C_i^{(e)}(t)\,, \tag{6}$$

$$\sigma_h^{(e)}(x,y,z) = \sum_{i=1}^{8} N_i(x,y,z)C_i^{(e)}(t)\,. \tag{7}$$

Для обчислення інтегралів у співвідношенні (5) введемо в лінійному восьмикутному елементі локальну координатну систему q, s, p, яка задовольняє такі умови:

$$-1 \le q \le 1,\ -1 \le s \le 1,\ -1 \le \text{p} \le 1\,.$$

Ця система пов'язана з глобальною (декартовою) системою координат за допомогою таких співвідношень:

$$x = \sum_{i=1}^{8} N_i(q,s,p)\,x_i,\ \ y = \sum_{i=1}^{8} N_i(q,s,p)\,y_i,\ \ z = \sum_{i=1}^{8} N_i(q,s,p)\,z_i\ ; \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
&N_1 = \frac{1}{8}(1-r)(1-s)(1+t);\ \ N_2 = \frac{1}{8}(1+r)(1-s)(1+t);\\
&N_3 = \frac{1}{8}(1+r)(1+s)(1+t);\ \ N_4 = \frac{1}{8}(1-r)(1+s)(1+t);\\
&N_5 = \frac{1}{8}(1-r)(1-s)(1-t);\ \ N_6 = \frac{1}{8}(1+r)(1-s)(1-t);\\
&N_7 = \frac{1}{8}(1+r)(1+s)(1-t);\ \ N_8 = \frac{1}{8}(1-r)(1+s)(1+t).
\end{aligned} \tag{9}$$

Використавши співвідношення (8) та (9) для (6) та (7), рівняння (5) звели до вигляду

$$\left[M^{(e)}\right]\left[\frac{\partial C}{\partial t}\right]+\left[K^{(e)}\right][C]=\left[F^{(e)}\right], \tag{10}$$

де $[M^{(e)}]$ – матриця ємкості концентрації; $[K^{(e)}]$ – матриця дифузності, яку можна записати у вигляді суми $[K^{(e)}]=[K_1^{(e)}]+[K_2^{(e)}]$.

Елементи матриць скінченно-елементного рівняння подамо у вигляді

$$m_{ij}^{(e)}=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} N_i(q,s,p)\,N_j(q,s,p)\det\left|J(q,s,p)\right|dqdsdp; \tag{11}$$

$$\begin{aligned}k_{1ij}^{(e)}=D(T)\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\Bigg[&\left(I_{11}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{12}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{13}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\left(I_{11}\frac{\partial N_j}{\partial q}+I_{12}\frac{\partial N_j}{\partial s}+I_{13}\frac{\partial N_j}{\partial p}\right)+\\&+\left(I_{21}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{22}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{23}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\left(I_{21}\frac{\partial N_j}{\partial q}+I_{22}\frac{\partial N_j}{\partial s}+I_{23}\frac{\partial N_j}{\partial p}\right)+\\&+\left(I_{31}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{32}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{33}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\left(I_{31}\frac{\partial N_j}{\partial q}+I_{32}\frac{\partial N_j}{\partial s}+I_{33}\frac{\partial N_j}{\partial p}\right)\Bigg]\det\left|J\right|dqdsdp;\end{aligned} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}k_{2ij}^{(e)}=-\frac{D(T)V_H}{RT}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}N_j\sum_{m=1}^{8}\sigma_{hm}\Bigg[&\left(I_{11}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{12}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{13}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\times\\&\times\left(I_{11}\frac{\partial N_m}{\partial q}+I_{12}\frac{\partial N_m}{\partial s}+I_{13}\frac{\partial N_m}{\partial p}\right)+\left(I_{21}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{22}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{23}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\times\\&\times\left(I_{21}\frac{\partial N_m}{\partial q}+I_{22}\frac{\partial N_m}{\partial s}+I_{23}\frac{\partial N_m}{\partial p}\right)+\left(I_{31}\frac{\partial N_i}{\partial q}+I_{32}\frac{\partial N_i}{\partial s}+I_{33}\frac{\partial N_i}{\partial p}\right)\times\\&\times\left(I_{31}\frac{\partial N_m}{\partial q}+I_{32}\frac{\partial N_m}{\partial s}+I_{33}\frac{\partial N_m}{\partial p}\right)\Bigg]\det\left|J\right|dqdsdp,\end{aligned} \tag{13}$$

де

$$[J]=\begin{bmatrix}\frac{\partial x}{\partial q} & \frac{\partial y}{\partial q} & \frac{\partial z}{\partial q}\\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s}\\ \frac{\partial x}{\partial p} & \frac{\partial y}{\partial p} & \frac{\partial z}{\partial p}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial q}x_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial q}y_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial q}z_i\\ \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial s}x_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial s}y_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial s}z_i\\ \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial p}x_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial p}y_i & \sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial p}z_i\end{bmatrix}, \tag{14}$$

I_{ij} – елементи матриці оберненої до $[J]$.

Для обчислення розподілу концентрації водню запропоновано програму для реалізації МСЕ відповідно до розробленого алгоритму.

Апробація алгоритму і програми розв'язання задачі дифузії водню. Апробацію виконано на прикладі розв'язування задачі дифузії водню (2) у паралелепіпеді $-l_1 < x < l_1$, $-l_2 < y < l_2$, $-l_3 < z < l_3$ (рис. 1) за таких початкових і крайових умов:

$$\begin{aligned}&C(x,y,z,0)=C_0;\\&C(\pm l_1,y,z,t)=C(x,\pm l_2,z,t)=C(x,y,\pm l_3,t)=C_1.\end{aligned} \tag{15}$$

Для такої задачі відомий аналітичний розв'язок [6]:

$$\frac{C(x,y,z,t)-C_1}{C_0-C_1}=8\sum_{i,j,k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{i+j+k+1}}{\beta_i\beta_j\beta_k}\cos\frac{\beta_i x}{l_1}\cos\frac{\beta_j y}{l_2}\cos\frac{\beta_k z}{l_3}\times$$
$$\times\exp\left[-(\beta_i^2K_1^2+\beta_j^2K_2^2+\beta_k^2K_3^2)\left(\frac{1}{l_1^2}+\frac{1}{l_2^2}+\frac{1}{l_3^2}\right)Dt\right], \qquad (16)$$

де $\beta_i=(2i-1)\frac{\pi}{2}$; $\beta_j=(2j-1)\frac{\pi}{2}$; $\beta_k=(2k-1)\frac{\pi}{2}$; $K_i=\frac{1}{l_i\sqrt{\frac{1}{l_1^2}+\frac{1}{l_2^2}+\frac{1}{l_3^2}}}$, $i=1,2,3.$

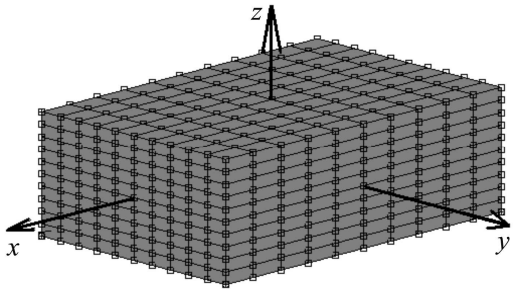

Рис. 1. Схематичне зображення паралелепіпеда розбитого на скінченні елементи.

Fig. 1. Schematic representation of the box broken into finite elements.

Вплив густини сітки розбиття на скінченні елементи та часового проміжку на точність числового розв'язку. Розв'язували задачу теплопровідності, а потім дифузії водню у сталевому зразку (сталь 22К) у формі паралелепіпеда з розмірами 3×2×1 m. Зразок нагрівали до початкової рівномірно розподіленої температури 100°C, а далі охолоджували до 20°C. Зображено (рис. 2*a*) зміну температури у центральній точці зразка з координатами (0;0;0). Аналогічно дослідили розподіл концентрації водню у цьому ж зразку, попередньо наводненому до рівномірно розподіленої концентрації C_0, під час дегазації водню. Показано (рис. 2*b*) зміну концентрації водню з часом у центральній точці тіла. Отримані числові результати порівняно з аналітичними (16).

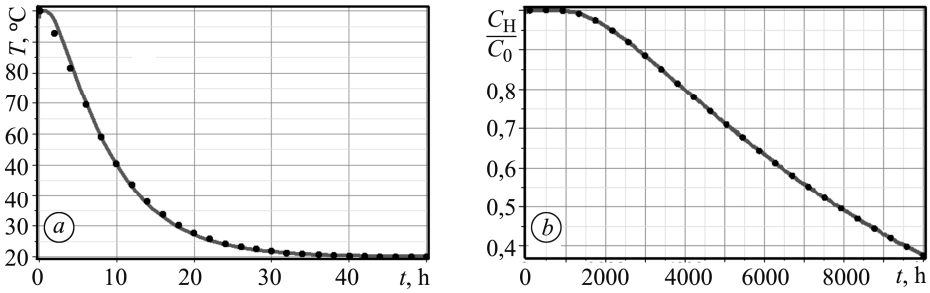

Рис. 2. Часова залежність температури (*a*) та відносної концентрації водню (*b*) у центральній точці зразка (суцільна лінія – аналітичний розв'язок (16); точки – розв'язок, отриманий МСЕ).

Fig. 2.Time dependence of temperature (*a*) and relative concentration of hydrogen (*b*) in the central point of the sample (solid line – analytical solution (16) points – solution, obtained by FEM).

Оцінено вплив густоти сітки розбиття на скінченні елементи і часового кроку на точність отриманих числових результатів. Показано (рис. 3*a*) залежність відносної похибки *e* від кількості скінченних елементів *N*, а на рис. 3*b* – від часового інтервалу.

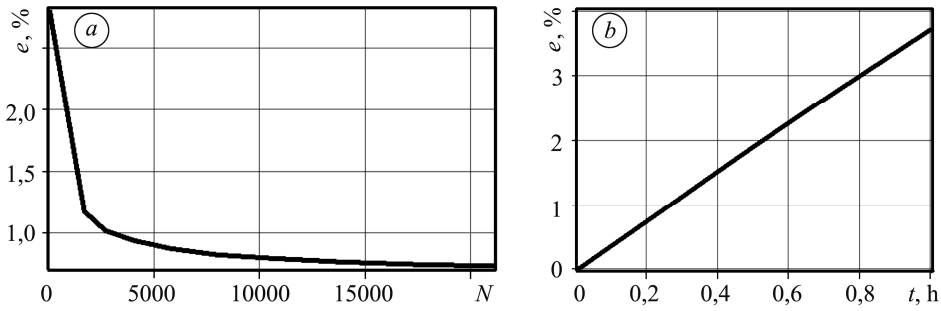

Рис. 3. Залежність відносної похибки від кількості скінченних елементів (*a*) та часового кроку (*b*).

Fig. 3. Dependence of the relative error on the number of finite elements (*a*) and a time step (*b*).

ВИСНОВКИ

Розроблено алгоритм для обчислення розподілу концентрації водню методом скінченних елементів для тривимірних тіл за термосилового навантаження. Апробовано числові розв'язки на прикладі відомих аналітичних у часткових випадках. Отримано задовільну кореляцію числових та аналітичних розв'язків, відносна похибка становить 2,5…4%. Оцінено вплив густоти сітки розбиття на скінченні елементи і часового кроку на точність отриманих числових результатів. Показано, що завдяки збільшенню густоти сітки в 5 разів відносна похибка зменшується в 2,5 рази, а зменшення часового кроку в 2 рази призводить до зниження похибки в 2–3 рази.

РЕЗЮМЕ. Разработан алгоритм и программы решения трехмерной задачи диффузии водорода. Проведена апробация численных решений задач теплопроводности и диффузии водорода в трехмерной постановке на тестовых задачах, для которых получены аналитические решения. Построена зависимость относительной погрешности от плотности сетки разбивки и временных промежутков при использовании метода конечных элементов.

SUMMARY. The algorithm and the program for solving the three-dimensional problem of hydrogen diffusion are developed. Verification of the numerical solutions of the problems of heat conduction and diffusion of hydrogen in a three-dimensional formulation on test problems, for which the analytical solutions are obtained, is carried out. The dependence of the relative error of the density mesh partitioning and time frames is constructed using the finite element method.

1. *Андрейків О. Є., Гембара О. В.* Механіка руйнування та довговічність металічних матеріалів у водневмісних середовищах. – К.: Наук. думка, 2008. – 344 с.
2. *Іваницький Я. Л., Гембара О. В., Чепіль О. Я.* Оцінювання довговічності елементів енергетичного обладнання з урахуванням впливу експлуатаційного середовища // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2015. – **51**, № 1. – С. 93–101.

   (*Ivanyts'kyi Ya. L., Hembara O. V., and Chepil' O. Ya.* Determination of the durability of elements of power-generating equipment with regard for the influence of working media // Materials Science. – 2015. – **51**, № 1. – P. 104–113.)
3. *Hydrogen* influence on fracture of sheet carbon steel / Y. Ivanytskyj, S. Shtayura, Y. Molkov, T. Lenkovskiy // Int. J. Fracture. – 2012. – **176**, № 1. – P. 17–23.
4. *Hutton D. V.* Fundamentals of finite element analysis. – N.-Y.: McGraw-Hill Companies, 2004. – 506 p.
5. *Вплив* напружено-деформованого стану на розподіл концентрації водню у зоні передруйнування / В. В. Панасюк, Я. Л. Іваницький, О. В. Гембара, В. М. Бойко // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2014. – **50**, № 3. – С. 7–14.

   (*Panasyuk V. V., Ivanyts'kyi Ya. L., Hembara O. V., Boiko V. M.* Influence of the stress-strain state on the distribution of hydrogen concentration in the process zone // Materials Science. – 2014. – **50**, № 3. – P. 315–323.)
6. *Райченко А. И.* Математическая теория диффузии в приложениях. – К.: Наук. думка, 1981. – 398 с.

Одержано 12.10.2015