ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ГИДРИДООБРАЗОВАНИЯ: МЕТОД СОПРЯЖЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

И.А. Чернов

Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН,
Пушкинская 11, 185910 Петрозаводск, Россия
IAChernov@yandex.ru

Математическое моделирование гидрирования порошков приводит к диффузионным краевым задачам с подвижной границей и нелинейными граничными условиями: первая связана с фазовым переходом металл-гидрид, а вторые — с нелинейными процессами на поверхностях раздела фаз. Опыт показывает, что несколько процессов (сорбция, десорбция, диффузия, формирование гидрида) сравнимы по скорости, то есть выделение одного лимитирующего процесса приводит к неадекватным моделям. Актуальность таких задач связана с перспективами водородной энергетики, так как гидридные аккумуляторы водорода рассматриваются как возможное решение проблемы хранения и транспортировки водородного топлива [1]. В этой связи особую важность приобретает кинетика (как быстро?) и, следовательно, математическая задача определения кинетических констант — параметров краевой задачи — по дополнительной информации: измерениям.

В докладе предлагается подход к решению обратной коэффициентой задачи на основе техники сопряженных уравнений [2] применительно к следующей краевой задаче — модели гидридообразования (описание модели в [3]):

$$Ac(\cdot,\cdot) = \left(\partial_t - D\partial_x^2\right) c(t,x) = 0, \quad (t,x) \in Y = \left\{t \in (0,T),\ x \in \left(\rho(t), L\right)\right\}$$

$$c(t,L) = I\left(D\partial_x c(t,L)\right), \quad D\partial_x c(t,\rho) = k \cdot \left(c(t,\rho) - 1\right),$$

$$c(t,\rho)\dot{\rho} = -D\partial_x c(t,\rho), \quad c(0,x) = c_0(x), \quad \rho(0) = \rho_0 \in (0,L).$$

Измеряется плотность потока сорбции $J(t)$, которая вследствие отсутствия накопления на поверхности равна плотности диффузионного потока: $J(t) = D\partial_x c(t,L)$.

Идея метода: интегрируя по частям в тождестве $\langle Ac, u\rangle_{L_2(Y)} = 0$ получим тождество вида $\langle A^*u, c\rangle_{L_2(Y)} = F\left(c_0(\cdot), c(T,\cdot), c(\cdot,\rho(\cdot)), u(\cdot,\cdot)|_{\partial Y}, J(\cdot)\right)$, где $A^* = \partial_t + D\partial_x^2$, а функционал F обусловлен терминальными членами. Левую часть обнуляют решения сопряженного уравнения, в числе которых $\exp(-Da^2t + ax)$. Выбрав несколько таких решений, получаем систему алгебраических уравнений для параметров. Сложность рассматриваемого случая по сравнению с классическим в том, что уравнения содержат неизвестные функции $c(T,x)$ и $c(t,\rho(t))$, поэтому нужны дополнительные предположения, оправдывающие себя на практике, в том числе выбор констант a. Отметим, впрочем, что подвижная граница $\rho(t)$ явно в уравнения не входит. В докладе приведены примеры применения описанного метода.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы ОМН РАН «Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач».

Литература

1. *Вербецкий В.Н. Митрохин С.И.* Гидриды интерметаллических соединений — синтез, свойства и применение для аккумулирования водорода // Альтернат. энергетика и экология. 2005. № 10(30). С. 41–61
2. *Марчук Г.И.* Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992.
3. *Чернов И.А.* Определение кинетических параметров изотермического формирования гидридов урана и магния // Третья междунар. конф. «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами», ред. А.А. Юхимчук, А.А. Курдюмов и И.Л. Малков. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 194–200.