

УДК 004.01:006.72 (470.22)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ СПЛАВОВ ДЛЯ МЕМБРАННОГО ГАЗОРАЗДЕЛЕНИЯ

К. В. Грудова

*Отдел комплексных научных исследований КарНЦ РАН,
ФИЦ «Карельский научный центр РАН» (ул. Пушкинская, 11,
Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910)*

Определение предельной растворимости водорода в гидридообразующих металлах и сплавах играет важную роль в обеспечении безопасности и надежности конструкций, изготовленных из этих материалов. Проведение комплексного исследования этого параметра позволяет разрабатывать более эффективные методы контроля за состоянием материалов и предотвращения разрушений, вызванных действием водорода. В связи с этим востребованными являются математические модели и алгоритмы обработки экспериментальных данных для оценки водородопроницаемости конструкционных материалов. В данной работе рассматривается краевая задача модели водородопроницаемости, которая в предположении квазистационарного равновесия сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Также предлагается алгоритм локализации начальных данных полученной системы, что позволяет найти ее решение и аппроксимировать экспериментальные графики давления водорода.

Ключевые слова: водородопроницаемость; нелинейные краевые задачи; численное моделирование; параметрическая идентификация

Для цитирования: Грудова К. В. Моделирование водородопроницаемости сплавов для мембранного газоразделения // Труды Карельского научного центра РАН. 2025. № 4. С. 5–16. doi: 10.17076/mat2101

Финансирование. Финансовое обеспечение исследований осуществлялось из средств федерального бюджета на выполнение государственного задания КарНЦ РАН (Отдел комплексных научных исследований КарНЦ РАН).

K. V. Grudova. MODELING OF HYDROGEN PERMEABILITY OF ALLOYS FOR MEMBRANE GAS SEPARATION

*Department of Multidisciplinary Scientific Research, Karelian Research Centre,
Russian Academy of Sciences (11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia,
Russia)*

Determination of the ultimate solubility of hydrogen in hydride-forming metals and alloys plays an important role in ensuring the safety and reliability of structures made of these materials. Conducting a comprehensive study of this parameter makes it possible to develop more effective methods for monitoring the condition of materials and preventing damage caused by the action of hydrogen. In this regard, there is demand for mathematical models and algorithms that process

experimental data for assessing the hydrogen permeability of structural materials. In this paper, we consider the boundary-value problem of the hydrogen permeability model, which, assuming quasi-stationary equilibrium, is reduced to a system of ordinary differential equations. An algorithm for localization of the input data of this system is also proposed, which makes it possible to find its solution and approximate the experimental graphs of hydrogen pressure.

Key words: hydrogen permeability; nonlinear boundary-value problems; numerical simulation; parametric identification

For citation: Grudova K. V. Modeling of hydrogen permeability of alloys for membrane gas separation. *Trudy Karelskogo nauchnogo tsentra RAN = Transactions of the Karelian Research Centre RAS*. 2025. No. 4. P. 5–16. doi: 10.17076/mat2101

Funding. The studies were funded from the federal budget through state assignment to the Karelian Research Centre RAS (Department for Multidisciplinary Research KarRC RAS).

ВВЕДЕНИЕ

Для успешного прогнозирования снижения свойств пластичности, ударной вязкости, трещиностойкости гидридообразующих металлов и сплавов при использовании их в водородосодержащей среде необходимо определить предельную растворимость водорода в рассматриваемых материалах. Данный параметр имеет решающее значение для оценки стойкости конструкционных сплавов к воздействию водорода. Подобные исследования позволяют разработать методы для предотвращения разрушения конструкций, изготовленных из таких материалов.

Предельная растворимость водорода в металлах и сплавах определяется множеством факторов, включая температуру, давление водорода, микроструктуру материала, наличие дефектов и примесей, а также скорость диффузии водорода. Исследование таких показателей позволяет более точно определить условия, при которых происходит насыщение материала водородом и возникают опасные явления (образование внутренних трещин, ускорение коррозии, изменение механических свойств и др.).

Для определения предельной растворимости водорода в гидридообразующих материалах применяются различные методы, включая измерение изменения объема образца под действием водорода, анализ изменения электрических свойств материала, наблюдение за изменением структуры при воздействии водорода и другие. Эти методы позволяют получить данные о количестве водорода, которое может быть адсорбировано материалом без нарушения его свойств.

Одним из основных преимущественных методов исследования параметров взаимодей-

ствия водорода с материалами является метод водородопроницаемости. Это преимущество заключается в возможности измерения в одном эксперименте коэффициента диффузии, констант растворимости и проницаемости [2]. Более подробное описание метода рассмотрим в следующем разделе.

С целью повышения эффективности экспериментальных исследований, решения прикладных задач и обобщений возникает потребность в построении математической модели взаимодействия изотопов водорода с конструкционными материалами и методов их идентификации. Моментальное определение значений параметров, коэффициентов, необходимых для дальнейших исследований, во время проведения эксперимента водородопроницаемости представляет собой практически нерешаемую проблему. Составление математических моделей для процессов, происходящих в ходе эксперимента, позволяет решить этот вопрос.

На основе экспериментального опыта можно сделать вывод, что в технологических задачах, как правило, диффузионные процессы и физико-химические явления на поверхности являются лимитирующими. Технологические особенности получения партии материала влияют на параметры переноса водорода, а это значит, что нужны эффективные алгоритмы обработки экспериментальных кривых. Вместе с тем возникает потребность автоматизировать процесс определения параметров переноса, используя современные вычислительные технологии. Основой для данной работы послужила статья [4].

Таким образом, в рамках текущего исследования была поставлена цель – разработать алгоритм и его программную реализацию для

оценки параметров в краевой задаче переноса водорода в сплавах для мембранного газоразделения.

МОДЕЛЬ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ

В данной работе рассматривается экспериментальное исследование модифицированного метода водородопроницаемости. Эксперимент проводился с использованием вакуумной камеры, разделенной на две емкости перегородкой из исследуемого материала. Мембрана представляет собой разогретую до фиксированной температуры пластину толщиной ℓ и площадью поверхностей S (торцами можно пренебречь, поскольку $\ell \ll 1$ мм). Предварительно проводится полная дегазация системы для исключения влияния газовых примесей на результаты эксперимента.

В начале эксперимента на входе в вакуумную камеру создается скачкообразное давление молекулярного водорода путем порционного впрыскивания газа. Затем измеряется падающее давление на входе и растущее давление в выходной емкости камеры, которая изолирована. Далее фиксируются полученные кривые давлений (см. рис. 1).

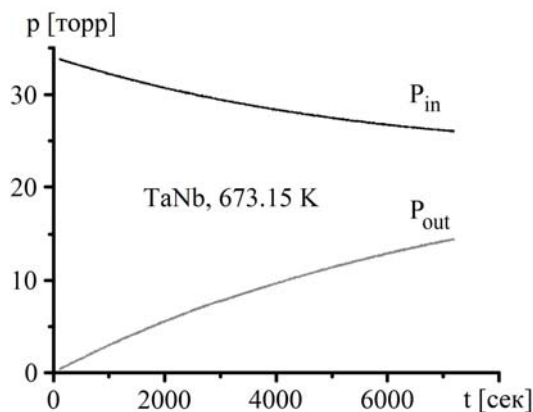


Рис. 1. Экспериментальные данные
Fig. 1. Experimental data

Информативность эксперимента ограничена, поэтому в модели водородопроницаемости учитываются только основные факторы для задачи фильтрации.

Уравнение диффузии с обратимым захватом

Рассмотрим процесс переноса водорода сквозь образец. В течение одного эксперимента температура T постоянна. Концентрация растворенного водорода в атомарном состоянии относительно мала, и можно считать, что

диффузионный поток пропорционален градиенту концентрации.

Образец может содержать в себе микродефекты различной природы (например, микрополости), которые могут удерживать водород. Очевидно, что некоторая часть атомов взаимодействует с ними. Ориентируясь на прикладной смысл задачи и возможности метода проницаемости, в качестве модели диффузии с ограниченным захватом в объеме принимается нелинейная система уравнений:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - f(T, z, c),$$

$$\frac{\partial z}{\partial t} = f(T, z, c),$$

$$f(T, z, c) \equiv a(T) \left[1 - \frac{z}{z_{\max}} \right] c - a_{\text{out}}(T) z,$$

где $c \equiv c(t, x)$ – концентрация диффундирующего водорода (атомарного); $z \equiv z(t, x)$ – концентрация захваченного диффузанта; $D \equiv D(T)$ – коэффициент диффузии; $a \equiv a_{\text{in}}$ и a_{out} – коэффициенты поглощения и высвобождения атомов H ловушками ($[a] = 1/c$); $f(T, z, c)$ – функция стока.

Знак тождества используется как равенство по определению. Остановимся более подробно на функции стока. Скорость поглощения атомов водорода увеличивается с ростом концентрации диффузанта и уменьшается по мере заполнения ловушек. Величину $z_{\max}$ в физически разумном диапазоне можно считать независимым параметром модели. Полагается, что она достаточно мала, так как в эксперименте рассматривается металлический сплав с высокой водородопроницаемостью. Учитывая, что материал для мембранного газоразделения достаточно однороден и захват носит характер малой поправки, принимается пропорция $z_{\max} = \sigma \bar{c}$, где $\bar{c}$ – равновесная концентрация растворенного атомарного диффузионно подвижного водорода. Общая растворимость определяется концентрацией $\bar{c} + z_{\max}$. Эффект захвата учтен без дополнительных параметров в соответствии с ограниченной информативностью метода проницаемости. Температура лежит в диапазоне $T \in [400, 900]$ K. При таких температурах слабое $a_{\text{out}} z$ несущественно. Ловушки в тонких мембранах быстро насыщаются и не оказывают значимого влияния на проникающий поток. Поэтому можно считать, что $a_{\text{out}} = 0$, и в качестве функции стока рассматривать: $f(T, z, c) = a \left[1 - \frac{z}{z_{\max}} \right] c$. Задание значения $a_{\text{out}} > 0$, в случае, когда коэффициент оказывает существенное влияние, технически не усложняет численное решение краевой зада-

чи. Величины D , a зависят от температуры T образца по закону Аррениуса с предэкспоненциальными множителями D_0 , a_0 и энергиями активации E_D , E_a (R – универсальная газовая постоянная): $D = D_0 \exp\{-E_D/[RT(t)]\}$, $a = a_0 \exp\{-E_a/[RT(t)]\}$.

Предварительно образец был дегазирован, поэтому начальные данные примут следующий вид: $c(0, x) = 0$, $z(0, x) = 0$, $x \in [0, \ell]$.

Динамические граничные условия

Из баланса потоков получаются следующие нелинейные граничные условия:

$$-\frac{dQ_{\text{in}}}{dt} = [J_{p_0} - J_0]S = -SD \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad (1)$$

$$-\frac{dQ_{\text{out}}}{dt} = [J_{p_\ell} - J_\ell]S = SD \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=\ell}, \quad (2)$$

где $Q_{\text{in}}(t)$, $Q_{\text{out}}(t)$ – количество атомов водорода во входной емкости (объем V_{in}) и выходной емкости (объем V_{out}), $c_0(t) \equiv c(t, 0)$, $c_\ell(t) \equiv c(t, \ell)$, $J_{p_{0,\ell}}$ – плотности потоков абсорбции (потоки частиц, падающих на поверхности мембраны), $J_{0,\ell}$ – плотности потоков десорбции (выхода) из образца.

Сквозь пластину сплава проходит атомарный водород, поэтому расчет водорода ведется в атомах. Для определения связи между плотностью потока J_p и давлением p обратимся к формуле Герца–Кнудсена: $J_p = p/\sqrt{2\pi m k T}$, где k – постоянная Больцмана; m – масса молекулы водорода.

Основываясь на экспериментальных данных, в качестве единиц измерения примем $[\ell] = \text{см}$, $[p] = \text{торр}$. Следовательно, формулу Герца–Кнудсена можно представить в виде $J_p = \mu p$, где $\mu \equiv \mu(T) \approx 2,474 \cdot 10^{22}/\sqrt{T}$ ($[\mu] = 1_{\text{H}_2}/(\text{торр см}^2 \text{ с})$, $[T] = \text{К}$).

Под воздействием атомов водорода на поверхности мембраны происходят различные процессы: физическая адсорбция, хемосорбция (поглощение водорода, сопровождающееся образованием химического соединения), диссоциация молекул на атомы, растворение и др. [6]. При этом большая часть атомов водорода либо отражается от поверхности пластины, либо прикрепляется к ней, но не проникает внутрь. Таким образом, из всего поступающего потока атомов только малая доля абсорбируется в объем мембраны. В математической модели этот момент отразим множителем s (коэффициент абсорбции). Тогда в качестве результирующего потока абсорбции атомов водорода сквозь поверхность принимается $J_{p_{0,\ell}} = \mu s p_{0,\ell}(t)$.

Теперь рассмотрим плотности потоков десорбции ($J_{0,\ell}$), которые можно записать как

$J_{0,\ell} = b c_{0,\ell}^2$, где b – коэффициент десорбции (отклонение от квадратичности существенно лишь при экстремальных температурах). Коэффициенты s и b имеют аррениусовскую зависимость от температуры.

В условиях постоянного давления насыщения $\bar{p}$ молекулярного водорода с обеих сторон мембраны и постоянной температуры устанавливается равновесная концентрация $\bar{c}$ растворенного атомарного диффузионно подвижного водорода. Тогда, если в модели (1), (2) приравнять производные к нулю, получим $\mu s \bar{p} - b \bar{c}^2 = 0 \Rightarrow \bar{c} \propto \sqrt{\bar{p}}$: $\bar{c} = \Gamma \sqrt{\bar{p}}$, где $\Gamma \equiv \sqrt{\mu s/b}$.

Предложенная модель имеет упрощенный вид, и при необходимости ее можно детализировать [3]. Однако более подробное описание (учет емкости поверхности, образования слоя другого материала, деформации пластины и т. д.) требует большего количества параметров с неизвестными значениями. Исходная задача связана с улучшением технологий газоразделения, для этого достаточно оценить совокупность показателей, фиксируемых в экспериментах проницаемости. В то же время из-за весьма подвижной фазы внедрения водорода измерения с высокой точностью затруднительны. Поэтому в данной работе остановимся на принятой модели, учитывающей лишь лимитирующие факторы.

Уточним условия эксперимента. Объемы входной и выходной емкостей $V_{\text{in,out}}$ несколько литров, толщина мембраны ℓ меньше 1 мм, площадь S около 1 см², давление напуска $p_0(0)$ несколько десятков торр. Диапазон давлений $[p_{\text{min}}, p_{\text{max}}]$ невелик, для концентрации захваченного диффузанта ограничимся $z_{\text{max}} = \sigma \bar{c}$, где $\sigma \leq 0,1$. При этом будет выполняться закон Сиверса [7] ($\bar{c} + z_{\text{max}} \propto \sqrt{\bar{p}}$), а точнее в пределах экспериментальной точности: $\bar{c} + z_{\text{max}} \approx \bar{c} = \Gamma \sqrt{\bar{p}}$. Известно, что в масштабе времени переноса газ находится в термодинамическом квазиравновесии с поверхностью, поэтому для определения Q_{in} , Q_{out} воспользуемся формулой $N = pV/(kT)$, где N – количество частиц газа, занимаемого объемом V при температуре T и давлении p . При необходимости, в зависимости от конкретных условий, можно уточнить $T = T_V$. Единицы измерения в системе СИ $[p] = \text{Па}$, $[V] = \text{м}^3$, $[k] = \text{Дж/К}$ [8]. Учитывая торр = 133,322 Па, Па = Дж/м³ (формально), можем получить для соответствующих давлений и объемов в граничных условиях (1), (2) следующие выражения $Q = 2N = \alpha pV/T$, $\alpha \approx 1,931 \cdot 10^{19}$, где p , V , T – численные значения в выбранных единицах измерения (торр, см³, К).

Безразмерная форма краевой задачи

Учитывая вышесказанное, мы получим следующую модель:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - a(T) \left[1 - \frac{z}{z_{\max}} \right] c, \\ \frac{\partial z}{\partial t} &= a(T) \left[1 - \frac{z}{z_{\max}} \right] c,\end{aligned}$$

где начальные данные и граничные условия запишутся в виде:

$$\begin{aligned}c(0, x) &= 0, \quad z(0, x) = 0, \quad x \in [0, \ell], \\ \mu s p_{0,\ell}(t) - b c_{0,\ell}^2 &= \mp D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0,\ell}, \\ \frac{dQ_{\text{in,out}}}{dt} &= -[\mu s p_{0,\ell}(t) - b c_{0,\ell}^2] S, \\ Q_{\text{in,out}} &= \alpha p_{0,\ell}(t) V_{\text{in,out}} T^{-1}.\end{aligned}$$

Перейдем к безразмерной координате $y = x/\ell$ с концентрациями $u = c/\bar{c}$, $v = z/\bar{c}$, $v_{\max} = z_{\max}/\bar{c}$ ($z_{\max} = \sigma \bar{c} \ll \bar{c}$) и временем τ : $t = D^{-1} \ell^2 \tau$ ($[D] = \text{см}^2/\text{с}$). Температура T фиксирована. Равновесную концентрацию диффундирующего водорода $\bar{c} = \Gamma \sqrt{\bar{p}_0}$ и количества атомов $\bar{Q}_{\text{in}} = \alpha \bar{p}_0 V_{\text{in}}/T$, $\bar{Q}_{\text{out}} = \alpha \bar{p}_0 V_{\text{out}}/T$ определяют по соответствующему максимальному давлению $\bar{p}_0 = p_0(0)$. Таким образом, получаем следующую краевую задачу:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \tilde{a} \left[1 - \frac{v}{v_{\max}} \right] u, \quad \frac{\partial v}{\partial \tau} = \tilde{a} \left[1 - \frac{v}{v_{\max}} \right] u, \\ u, v &\in [0, 1], \quad y \in (0, 1), \quad \tau > 0;\end{aligned}$$

$$u(0, y) = 0, \quad v(0, y) = 0, \quad y \in [0, 1],$$

$$W[\tilde{p}_0 - u_0^2] = -\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0}, \quad W[\tilde{p}_1 - u_1^2] = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=1}$$

$$\bar{Q}_{\text{in}} \frac{d\tilde{p}_0}{d\tau} = -\bar{Q}_m W[\tilde{p}_0 - u_0^2], \quad \tilde{p}_0(0) = 1,$$

$$\bar{Q}_{\text{out}} \frac{d\tilde{p}_1}{d\tau} = -\bar{Q}_m W[\tilde{p}_1 - u_1^2], \quad \tilde{p}_1(0) = 0,$$

где используются следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\tilde{a} &\equiv a(T) \ell^2 D^{-1}, \quad u_{0,1} \equiv u(\tau, y)|_{y=0,1}, \\ W &\equiv b \bar{c} \ell D^{-1} = \bar{P}_0 \ell [D \bar{c}]^{-1}, \quad \bar{P}_0 \equiv \mu s \bar{p}_0, \\ \bar{Q}_{\text{in}} &\equiv \alpha V_{\text{in}} \bar{p}_0 T^{-1}, \quad \bar{Q}_{\text{out}} \equiv \alpha V_{\text{out}} \bar{p}_0 T^{-1} \\ \tilde{p}_{0,1} &\equiv p_{0,\ell}(t) \bar{p}_0^{-1}, \quad \bar{Q}_m \equiv S \bar{c} \ell \equiv V_m \bar{c}.\end{aligned}$$

Величина $\bar{Q}_m$ обозначает количество атомов диффузионно подвижного водорода в образце в режиме равновесного насыщения ($\bar{p}_0 = p_0(0)$, температура T постоянна). Транспортный параметр W немаловажен при исследовании метода прорыва (такой вариант метода

проницаемости, когда на выходе производится постоянная откачка водорода).

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результат аппроксимации экспериментальных данных входного и выходного давления молекулярного водорода по сплаву Ta₇₇Nb₂₃ [9] (рис. 1) модельными кривыми представлен на рис. 2. Условия эксперимента: $T = 673,15 \text{ K}$, $\ell = 0,014 \text{ см}$, $S = 0,785 \text{ см}^2$, $V_{\text{in}} = 3000 \text{ см}^3$, $V_{\text{out}} = 1750 \text{ см}^3$.

Как было ранее сказано, в условиях насыщения ($p = \text{const}$, $T = \text{const}$) равновесная концентрация $\bar{c} = \Gamma \sqrt{p}$, где $\Gamma \equiv \sqrt{\mu s/b}$ – коэффициент растворимости. Однако в этом случае учитывается только диффузионно подвижный растворенный атомарный водород. При полной дегазации $\bar{c} + z_{\max} = \Gamma_{\max} \sqrt{p}$, где в условиях сохранения закона Сиверта $\Gamma_{\max} = \Gamma[1 + \sigma]$. В таком случае аппроксимация кривых давления примет вид как на рис. 3.

Можно заметить, что на рис. 3 с гипотетическим значением $z_{\max} = 10 \bar{c}$ (в отличие от рис. 2) общая растворимость на порядок больше. Если в эксперименте прорыва ($p_0(t) = p = \text{const}$, на выходе – вакуум) рассматривать установившийся поток водородопроницаемости $J = -D \partial_x c$, то при условии $c_0 = \bar{c}_0 = \Gamma \sqrt{p}$, $c_\ell = 0$ получим $J = \Phi \sqrt{p}/\ell$, $\Phi \equiv D \Gamma = D \sqrt{\mu s/b}$. Исходя из формулы, можно провести серию экспериментов при $T = \text{const}$, варьируя p и фиксируя пропорциональность $J \propto \sqrt{p}$. Далее по полученным значениям p , J определить коэффициент водородопроницаемости Φ , который характеризуется диффундирующим водородом (в модели $\Phi = D \Gamma$).

Если же Φ вычислять напрямую, по имеющимся независимым значениям коэффициентов диффузии и растворимости (эксперименты различны и растворимость общая, с учетом захваченного водорода), то можем получить $D \Gamma_{\max} \gg D \Gamma$. Возможно, это является одной из причин расхождения литературных данных по растворимости и проницаемости. Проблема заключается в том, что для режима проницаемости в тонких мембранах сложно определить количество водорода, захваченного в ловушки, даже при большой их емкости, хотя они оказывают значительное влияние на общую растворимость в материале (при пересчете на см^3 и м^3 в условиях $\ell, S \ll 1$).

Рассмотрим динамику объемных концентраций в эксперименте. Проанализируем приповерхностные концентрации ($x = 0, \ell$), изображенные на рис. 4, 5.

Ловушки заполняются в течение минуты $z_0 \approx z_\ell \approx z_{\max}$, и концентрации $c_0(t) = c(t, 0)$, $c_\ell(t) = c(t, \ell)$ быстро приходят в состояние равновесия. Однако в масштабе двух часов заметна смена переходного режима всплеска на медленный тренд. За счет малой толщины мембраны ($\ell \ll 1$ мм) и быстрой водородопроницаемости сплава время стабилизации c_ℓ сравнимо по отношению к c_0 . Диффузия ℓ^2/D ($D \sim 10^{-5}$) происходит в пределах десяти секунд, поэтому переходные процессы происходят с достаточно высокой скоростью. Общая концентрация задается суммой $c + z$.

Из соотношений $\mu s p_{0,\ell} = b c_{0,\ell}^2$ можно определить квазиравновесные концентрации диф-

фундирующего водорода $\bar{c}_{0,\ell}(t) = \Gamma \sqrt{p_{0,\ell}(t)}$. С учетом захвата водорода ловушками в качестве концентраций будем рассматривать их суммы $\bar{c}_{0,\ell}(t) + z_{\max}$ и $c_{0,\ell}(t) + z_{0,\ell}(t)$.

Ориентируясь на рис. 5, можно оценить разницу между рассогласованием концентраций на выходе ($c_\ell - \bar{c}_\ell$) и входе ($\bar{c}_0 - c_0$). Заметно, что первое больше последнего. Однако по мере приближения к равновесию происходит сближение этих величин.

В текущей задаче газоразделения нас интересует проникающий поток. Но переход к квазиравновесным оценкам ухудшает применение системы разностных схем для аппроксимации градиента $\partial_x c$ как на входе ($\bar{c}_0 > c_0$), так и на выходе ($\bar{c}_\ell < c_\ell$).

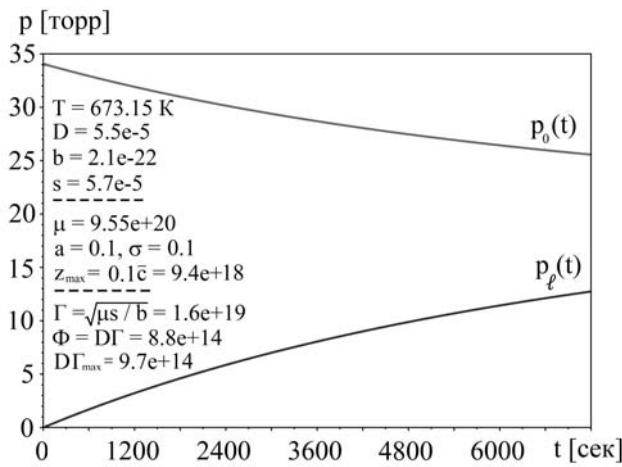


Рис. 2. Аппроксимация давлений, 673,15 К
Fig. 2. Pressure approximation, 673.15 K

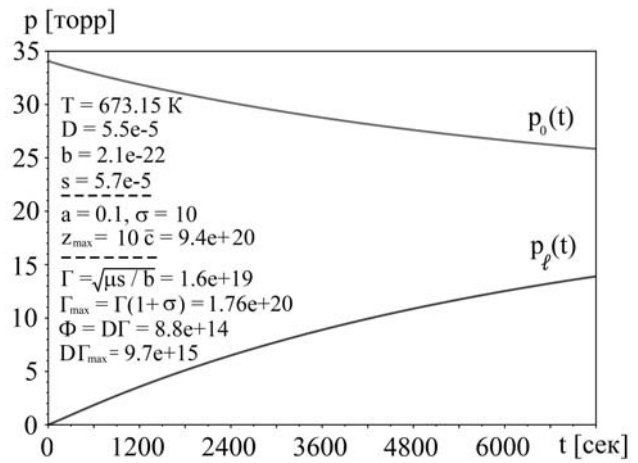


Рис. 3. Давления в случае $z_{\max} = 10 \bar{c}$
Fig. 3. Pressure in case of $z_{\max} = 10 \bar{c}$

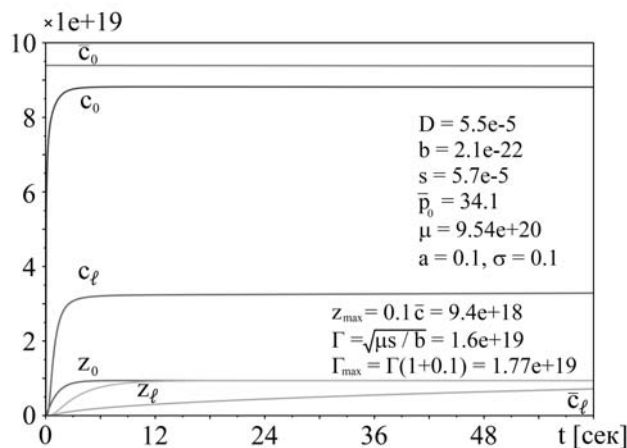


Рис. 4. Приповерхностные концентрации, 1 мин
Fig. 4. Near-surface concentrations, 1 min

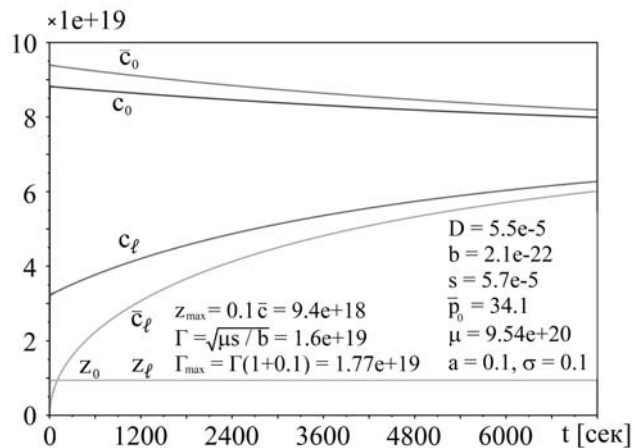


Рис. 5. Приповерхностные концентрации, 120 мин
Fig. 5. Near-surface concentrations, 120 min

МОДЕЛЬ БЫСТРОЙ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ

Как было сказано выше, подстановка равновесных концентраций приводит к заметной погрешности при толщине мембраны $\ell \ll 1$ мм и быстрой проницаемости сплава. Поэтому рассмотрим задачу моделирования концентраций $c_{0,\ell}$ по кривым давления $p_{0,\ell}$ без квазиравновесного упрощения $c(t) = \Gamma\sqrt{p(t)}$.

В течение короткого (в масштабе эксперимента) периода t_0 ловушки насыщаются, и наступает квазистационарный режим. Применим аппроксимацию $\partial_x c = -[c_0 - c_\ell]\ell^{-1}$:

$$\dot{p}_{0,\ell}(t) = \mp\beta_{0,\ell}[c_0 - c_\ell], \quad (3)$$

$$\mu sp_{0,\ell}(t) - bc_{0,\ell}^2 = \pm D\ell^{-1}[c_0 - c_\ell], \quad (4)$$

$$\beta_{0,\ell} \equiv SD[\alpha V_{\text{in,out}}\ell]^{-1}T, \quad t \geq t_0 > 0.$$

Рассмотрим систему (4). Выполним преобразования уравнения при $x = 0$ следующим образом:

$$\mu sp_0(t) - bc_0^2 = D[c_0 - c_\ell]\ell^{-1},$$

$$\mu sp_0(t) - bc_0^2 - D\ell^{-1}c_0 = -D\ell^{-1}c_\ell,$$

$$\frac{\mu sp_0(t)}{b} - c_0^2 - \frac{D}{b\ell}c_0 = -\frac{D}{b\ell}c_\ell.$$

Введем коэффициент растворимости $\Gamma \equiv \sqrt{\mu s/b}$ в полученную систему и выделим полный квадрат относительно $c_0(t)$:

$$\Gamma^2 p_0(t) - \left[c_0 + \frac{D}{2b\ell}\right]^2 + \frac{D^2}{4b^2\ell^2} = -\frac{D}{b\ell}c_\ell,$$

$$\Gamma^2 p_0(t) + \frac{D^2}{4b^2\ell^2} + \frac{D}{b\ell}c_\ell = \left[c_0 + \frac{D}{2b\ell}\right]^2.$$

В левой части уравнения выделим выражение относительно $c_\ell(t)$ аналогично выражению, возводимому в квадрат $(c_0 + D(2b\ell)^{-1})$:

$$\Gamma^2 p_0(t) - \frac{D^2}{4b^2\ell^2} + \frac{D}{b\ell}\left[c_\ell + \frac{D}{2b\ell}\right] = \left[c_0 + \frac{D}{2b\ell}\right]^2.$$

Домножим уравнение на $(2b\ell)^2 D^{-2}$:

$$\begin{aligned} & 4(\Gamma b\ell)^2 p_0(t) D^{-2} - 1 + 2\left[2b\ell D^{-1}c_\ell + 1\right] \\ & = \left[2b\ell D^{-1}c_0 + 1\right]^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Выполним аналогичные преобразования уравнения системы (4) при $x = \ell$. В результате получим уравнение вида (5), в котором величины c_0 и c_ℓ заменяются на c_ℓ и c_0 соответственно. Введем безразмерные переменные:

$$\begin{aligned} X_{0,\ell}(t) &= 1 + 2\ell c_{0,\ell}(t)bD^{-1}, \\ a_{0,\ell}(t) &= 4(\ell\Gamma b)^2 p_{0,\ell}(t)D^{-2} - 1. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, система уравнений (4) запишется в симметричном виде:

$$a_0 + 2X_\ell = X_0^2, \quad a_\ell + 2X_0 = X_\ell^2. \quad (7)$$

Для переменной $X \equiv X_\ell$ получаем неполное уравнение четвертой степени

$$[X^2 - a_\ell]^2 = 4[2X + a_0], \quad (8)$$

которое решается в радикалах. Исходя из физических соображений, нас интересует положительный корень. Выведем дифференциальные уравнения для $X_{0,\ell}$, поскольку информация о динамике граничных концентраций $c_{0,\ell}$ представляет и самостоятельный интерес. Продифференцируем выражения:

$$a_0 + 2\dot{X}_\ell = 2X_0\dot{X}_0, \quad a_\ell + 2\dot{X}_0 = 2X_\ell\dot{X}_\ell. \quad (9)$$

Решая систему (9) как систему линейных уравнений относительно производных $\dot{X}_0$ и $\dot{X}_\ell$, получим:

$$\dot{X}_0 = \frac{\dot{a}_0 X_\ell + \dot{a}_\ell}{2[X_0 X_\ell - 1]}, \quad (10)$$

$$\dot{X}_\ell = \frac{\dot{a}_\ell X_0 + \dot{a}_0}{2[X_0 X_\ell - 1]}. \quad (11)$$

Используя выражения (6) и (3), получаем:

$$\begin{aligned} \dot{a}_0 &= 4(\ell\Gamma b)^2 D^{-2} \dot{p}_0(t) \\ &= -4\beta_0[c_0 - c_\ell](\ell\Gamma b)^2 D^{-2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Из уравнений (6) найдем:

$$X_0 - X_\ell = 2bD^{-1}\ell[c_0(t) - c_\ell(t)],$$

откуда, выразив $c_0(t) - c_\ell(t)$ и подставив в (12), получим:

$$\dot{a}_0 = -2\beta_0[X_0 - X_\ell]\ell b D^{-1}\Gamma^2.$$

После подстановки выражений

$$\beta_0 \equiv SDT(\alpha V_{\text{in}}\ell)^{-1}, \quad \Gamma \equiv \sqrt{\mu s/b}$$

в полученное уравнение будем иметь:

$$\dot{a}_0 = -2[X_0 - X_\ell]sM_0, \quad M_0 \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{in}}}.$$

Аналогичным образом получаем:

$$\dot{a}_\ell = 2[X_0 - X_\ell]sM_\ell, \quad M_\ell \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{out}}}.$$

Подставив полученные выражения в (10), будем иметь:

$$\dot{X}_0 = -sM_0[X_0 - X_\ell] \frac{X_\ell - M_\ell M_0^{-1}}{X_0 X_\ell - 1}.$$

Выражение для $\dot{X}_\ell$ выводится аналогично. В результате мы имеем следующую систему дифференциальных уравнений ($\mu \propto 1/\sqrt{T}$):

$$\dot{X}_0(t) = -sM_0[X_0 - X_\ell] \frac{X_\ell - V_{\text{in}}V_{\text{out}}^{-1}}{X_0X_\ell - 1}, \quad (13)$$

$$\dot{X}_\ell(t) = sM_\ell[X_0 - X_\ell] \frac{X_0 - V_{\text{in}}^{-1}V_{\text{out}}}{X_0X_\ell - 1}. \quad (14)$$

$$M_\ell \equiv \mu ST(\alpha V_{\text{out}})^{-1}, \quad M_0 \equiv \mu ST(\alpha V_{\text{in}})^{-1}.$$

Локализация начальных данных для системы ОДУ

Рассмотрим более подробно уравнение четвертой степени (8). При помощи стандартных математических пакетов можно получить четыре корня, из которых нужно выбрать соответствующий физическому смыслу. Возникает задача автоматизации выбора корня.

Итак, рассмотрим уравнение

$$[X^2 - a_\ell]^2 = 4[2X + a_0],$$

где $X \equiv 1 + 2\ell c_\ell(t_0)bD^{-1}$, $a_{0,\ell}(t_0) \equiv 4(\ell b)^2 p_{0,\ell}(t_0)D^{-2} - 1$, t_0 – момент времени после быстрого переходного периода, когда квазистационар практически установился ($\bar{c}_{0,\ell}(t_0) = \Gamma\sqrt{p_{0,\ell}(t_0)}$). Так как

$$2X + a_0 = 1 + \frac{4\ell b}{D}c_\ell(t_0) + \frac{4(\ell b)^2}{D^2}\bar{c}_0^2(t_0) > 1,$$

то вместо уравнения четвертой степени (8) будем решать уравнение $X^2 - a_\ell = 2\sqrt{2X + a_0}$.

Выполняя аналогичные вычисления, получим:

$$X^2 - a_\ell = 2X + 4\ell^2 b^2 D^{-2}(c_\ell^2(t_0) - \bar{c}_\ell^2(t_0)).$$

На рис. 5 видно, что $c_\ell(t_0) > \bar{c}_\ell(t_0)$, следовательно,

$$X^2 - a_\ell > 2X > 2,$$

$$X > 1 + \sqrt{1 + a_\ell} = 1 + 2\ell\Gamma\sqrt{p_\ell(t_0)}bD^{-1}.$$

Полученное неравенство совпадает с оценкой X в (6), если вместо c_ℓ подставить $\bar{c}_\ell$. Таким образом, данная нижняя оценка X для принятой модели неумлучшаема.

Для автоматизации графического решения уравнения $X^2 - a_\ell = 2\sqrt{2X + a_0}$ найдем верхнюю оценку X .

Образец исследуемого материала разбивает вакуумную камеру на два сосуда. Обозначим условно их как левый (входной) объем V_1 и правый (выходной) объем V_2 . При этом символы $V_{1,2}$ будем использовать как для самих

сосудов, так и для их объемов (в зависимости от контекста). Со временем давление водорода в объеме V_2 будет увеличиваться до определенного уровня $\bar{p} < \bar{p}_0(0)$, следовательно, $\max c_\ell < \Gamma\sqrt{\bar{p}_0(0)}$. Значит, можно получить верхнюю оценку: $X_{\text{max}} < 1 + 2\ell\Gamma\sqrt{\bar{p}_0(0)}bD^{-1}$. Однако такая оценка – грубая, постараемся уточнить значение $\bar{p}$.

Перед началом эксперимента проводится дегазация, объемы V_1 и V_2 – вакуумированы. Затем в начальный момент времени ($t_0 = 0$) в V_1 скачкообразно создается давление молекулярного водорода ($p_0 = p_0(0)$). Обычно $p_0 \approx 10\text{--}100$ Торр, так что газ можно считать практически идеальным. В таком случае, воспользовавшись основным уравнением молекулярно-кинетической теории, получим $p_0V_1 = n_0kT$, где n_0 – число молекул H_2 в начальный момент времени; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура газа, которая принимает постоянное значение в исследуемом эксперименте ($T = \text{const}$).

В процессе продолжения эксперимента все большая часть молекул водорода переходит в V_2 . Поскольку исследуемая пластина сплава пренебрежительно мала по объему и нас интересует верхняя оценка давления в V_2 , будем считать, что $n_0 = n_1 + n_2$, где n_1 , n_2 – число молекул в V_1 и V_2 соответственно, когда давления в $V_{1,2}$ практически равны ($\bar{p}$).

Таким образом, для каждого сосуда получаем уравнения:

$$\bar{p}V_1 = n_1kT, \quad \bar{p}V_2 = n_2kT,$$

из которых можно выразить $\bar{p}$:

$$\begin{aligned} \bar{p}(V_1 + V_2) &= n_0kT = \frac{p_0V_1}{kT}kT \\ &= p_0V_1 \Rightarrow \bar{p} = \frac{p_0V_1}{V_1 + V_2}. \end{aligned}$$

Зная $\bar{p}$, можно уточнить верхнюю оценку

$$\max \bar{c}_\ell < \Gamma\sqrt{\bar{p}} \Rightarrow X < 1 + 2\ell bD^{-1}\Gamma\sqrt{\bar{p}}.$$

Рассмотрим уравнение $X^2 - a_\ell = 2\sqrt{2X + a_0}$ на отрезке $[\min X, \max X]$. Определим количество существующих решений на данном интервале. Если будут выполняться условия:

$$\begin{aligned} \min X^2 - a_\ell &< 2\sqrt{2\min X + a_0}, \\ \max X^2 - a_\ell &> 2\sqrt{2\max X + a_0}, \end{aligned}$$

тогда на указанном промежутке существует единственное решение.

Итак, проверим первое условие. Для этого вычислим:

$$\begin{aligned} \min X^2 - a_\ell &= (1 + 2\ell\Gamma\sqrt{p_\ell b}D^{-1})^2 - 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2} + 1 \\ &= 2 \min X, \\ 2\sqrt{2 \min X + a_0} &= 2\sqrt{1 + 4\ell\Gamma\sqrt{p_\ell b}D^{-1} + 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2}} \\ &> 2\sqrt{1 + 4\ell\Gamma\sqrt{p_\ell b}D^{-1} + 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2}} \\ &= 2 \min X. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили, что $2\sqrt{2 \min X + a_0} > 2 \min X = \min X^2 - a_\ell$. Рассмотрим второе условие:

$$\begin{aligned} \max X^2 - a_\ell &= (1 + 2\ell\Gamma b\sqrt{p_\ell}D^{-1})^2 - 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2} \\ &> 2(1 + 2\ell\Gamma b\sqrt{p_\ell}D^{-1}), \\ 2\sqrt{2 \max X + a_0} &= 2\sqrt{2 + 4\ell\Gamma b\sqrt{p_\ell}D^{-1} + 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2} - 1} \\ &< 2\sqrt{2 + 4\ell\Gamma b\sqrt{p_\ell}D^{-1} + 4(\ell\Gamma b)^2 p_\ell D^{-2} - 1} \\ &= 2(1 + 2\ell\Gamma b\sqrt{p_\ell}D^{-1}). \end{aligned}$$

Видим, что $2\sqrt{2 \max X + a_0} < \max X^2 - a_\ell$. Для доказательства данного неравенства мы ориентировались на то, что $p_0 > p_\ell$ (см. рис. 2). Посчитаем производные левой и правой части уравнения (8):

$$\begin{aligned} f'_1 &= [X^2 - a_\ell]' = 2X > 2, \\ f'_2 &= [2\sqrt{2X + a_0}]' = 2 \frac{2}{2\sqrt{2X + a_0}} < 2. \end{aligned}$$

Получаем, что $f'_2 < f'_1$, $f_1(\min X) < f_2(\min X)$ и $f_1(\max X) > f_2(\max X)$. Это доказывает нам, что на промежутке $[\min X, \max X]$ существует единственное пересечение кривых.

Пример графической локализации искомого решения X приведен на рис. 6. Данные для вычислений брались из статьи [5]: $T = 673,15 \text{ K}$; $V_1 = 1750 \text{ см}^3$; $V_2 = 3000 \text{ см}^3$; $D = 5,5 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{сек}$; $b = 2,1 \times 10^{-22} \text{ см}^4/\text{сек}$; $s = 5,7 \times 10^{-5}$; $\mu = 2,474 \times 10^{22}/\sqrt{T}$; $\Gamma = \sqrt{\mu s/b}$; $\ell = 0,014 \text{ см}$; $p_0(t_0) = 32 \text{ Торр}$; $p_\ell(t_0) = 2 \text{ Торр}$; $\bar{p} = \frac{p_0 V_1}{V_1 + V_2}$; $\bar{c}_0 = \Gamma\sqrt{p_0}$; $\bar{c}_\ell = \Gamma\sqrt{p_\ell}$.

При использовании пакетов прикладных программ (в данной работе использовался Scilab 6) целесообразнее рассматривать алгебраическое уравнение четвертой степени (8). При этом возникают еще три дополнительных

корня. Ограничение $X \in [\min X, \max X]$ позволит автоматически выделить единственный корень уравнения, подходящий по физическому смыслу задачи.

После определения значения $X = X_\ell(t_0)$ находим $X_0(t_0)$ из соотношений (7).

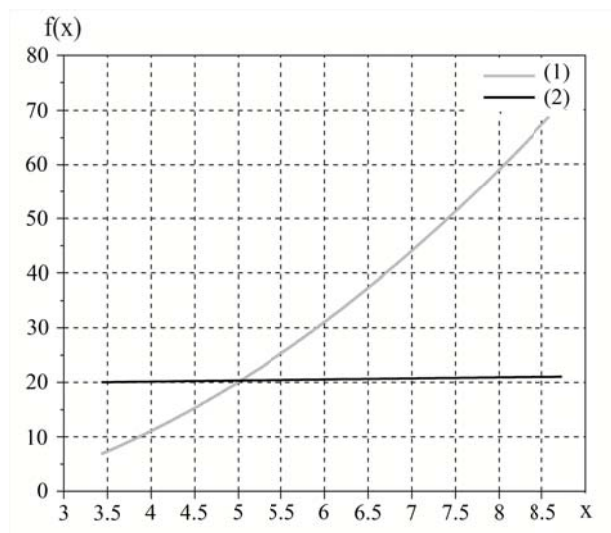


Рис. 6. Графическое решение уравнения:

(1) $\max X^2 - a_\ell$, (2) $2\sqrt{2X + a_0}$

Fig. 6. Graphical solution of the equation:

(1) $\max X^2 - a_\ell$, (2) $2\sqrt{2X + a_0}$

АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ БЫСТРОЙ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ

Теперь представим схему численного моделирования быстрой водородопроницаемости на конкретной задаче.

1. Заказчик (ИМЕТ УрО РАН) представляет файл в формате .orj (для работы используется ПО OriginViewer) с экспериментальными данными (рис. 1).

Графики соответствуют давлениям: убывающая кривая соответствует входному объему V_1 , возрастающая — выходному V_2 . Например, для $\text{Ta}_{77}\text{Nb}_{23}$ $p_0 = 30 \text{ торр}$, $T = 673,15 \text{ K}$ (см. рис. 2). Исходные данные содержатся в табличном виде и зашумлены. Изначально они экспортируются в Excel, а затем в пакет Scilab 6.

Задача параметрической идентификации модели состоит в оценке значений параметров D , b , s (коэффициенты диффузии, десорбции, абсорбции).

2. С учетом переходных процессов выделяем момент времени $t_0 > 0$, когда распределение концентрации растворимого водорода можно считать практически квазистационар-

ным. Вычислительные эксперименты с полной моделью показывают, что квазистационар при заданных условиях достигается в пределах минуты (на фоне измерений в течение часов).

Задаем текущие приближения D , b , s . Определяем $p(t_0)$. Сглаживаем экспериментальные данные, используя алгоритм, описанный в [1]. Находим начальные данные $X_0(t_0)$, $X_\ell(t_0)$ для модели быстрой водородопроницаемости (13)–(14). Система ОДУ интегрируется в пакете Scilab 6 на отрезке времени $[t_0, t_*]$ (t_* – заданное время, в частности, время окончания измерений). Полученные интегральные кривые представлены на рис. 7.

3. В силу полученных соотношений

$$X_0(t) = 1 + 2\ell c_0(t)bD^{-1},$$

$$X_\ell(t) = 1 + 2\ell c_\ell(t)bD^{-1}$$

находим концентрации $c_0(t)$, $c_\ell(t)$, $t \geq t_0$. Из граничных условий (4) генерируем модельные зависимости $p_{0,\ell}(t)$ и сравниваем их с экспериментальными данными (см. рис. 8).

4. В зависимости от полученного результата варьируем значения исходных параметров. Вычислительные эксперименты показывают характерные зависимости изменений графиков при изменении параметров модели (см. рис. 8–11).

5. При неудовлетворительной аппроксимации возвращаемся к п. 2.

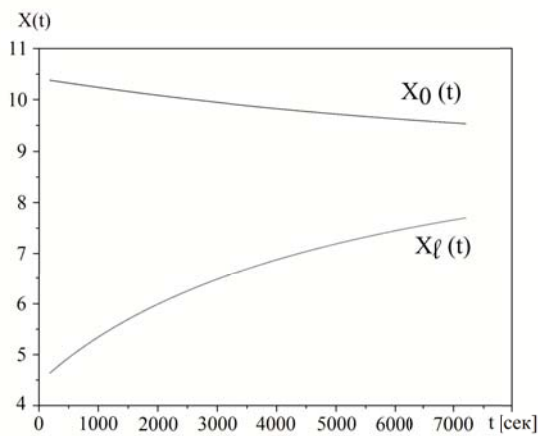


Рис. 7. Интегральные кривые системы ОДУ
Fig. 7. Integral curves of the ODE system

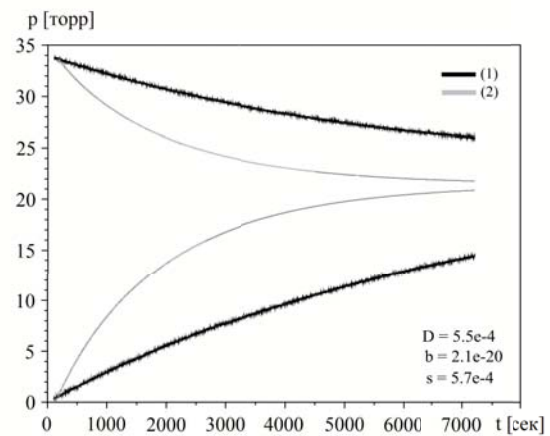


Рис. 8. Результат численного моделирования.
Здесь и на рис. 9–12: (1) – экспериментальные данные, (2) – модель
Fig. 8. The result of numerical simulation.
Here and in Fig. 9–12: (1) – experimental data, (2) – model

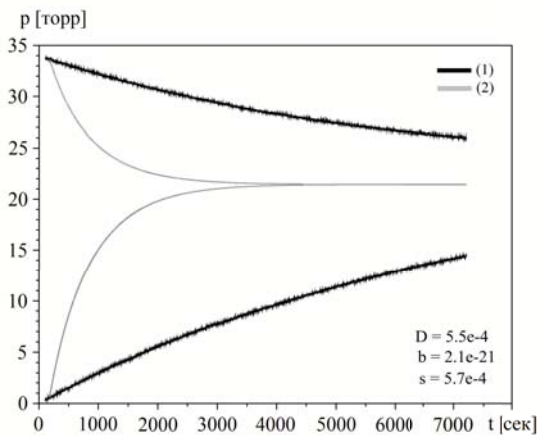


Рис. 9. Изменение коэффициента десорбции
Fig. 9. Change in the desorption coefficient

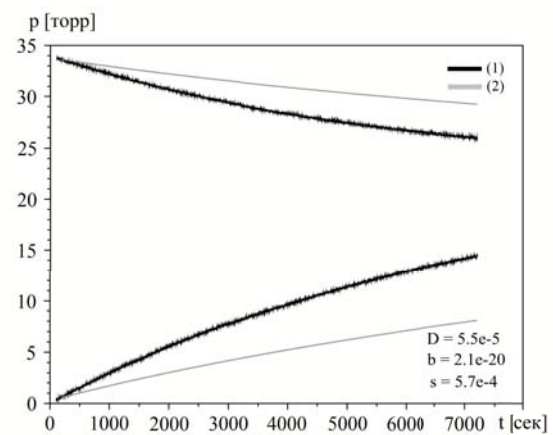


Рис. 10. Изменение коэффициента диффузии
Fig. 10. Change in the diffusion coefficient

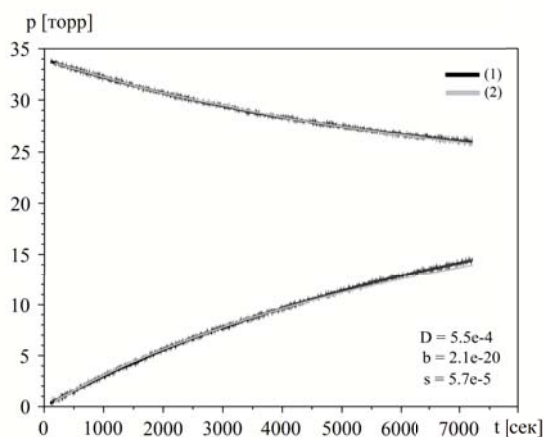


Рис. 11. Изменение коэффициента абсорбции
Fig. 11. Change in the absorption coefficient

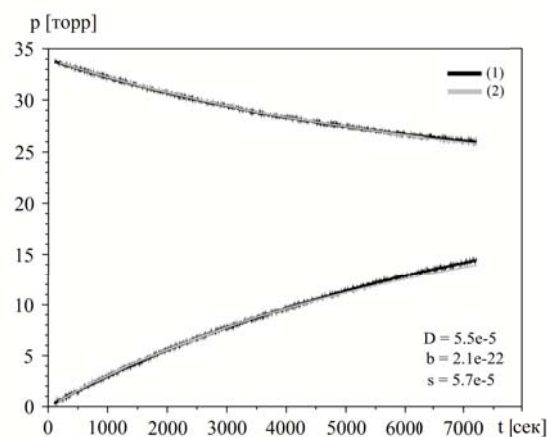


Рис. 12. Результаты численного моделирования
Fig. 12. Numerical simulation results

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучение взаимодействия изотопов водорода с различными конструкционными материалами широко распространено и применяется во многих реальных задачах. Мгновенно определить значение параметров и коэффициентов модели в ходе эксперимента практически невозможно. При этом их значения необходимы для дальнейших исследований. Математическое моделирование позволяет решить данную проблему.

В рамках текущей работы было автоматизировано нахождение единственного корня уравнения четвертой степени (8), который удовлетворяет физическим условиям поставленной задачи, что, в свою очередь, привело к упрощению нахождения начальных условий для системы ОДУ (13)–(14). Решение указанной системы позволяет построить графики давлений во входной и выходной емкости камеры. Результат представлен на рис. 12.

Аппроксимация кривых давлений производилась варьированием коэффициентов диффузии, абсорбции и десорбции из физических соображений. Один из вариантов дальнейшего развития – автоматизация разработанной схемы решения обратной задачи параметрической идентификации модели на основе экспериментальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Волков Е. А. Численные методы: учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1987. 248 с.
2. Гордиенко Ю. Н., Кульсартов Т. В., Заурбекова Ж. А., Понкратов Ю. В., Гныря В. С., Никитенков Н. Н. Применение метода водородопроницаемости в реакторных экспериментах по исследованию взаимодействия изотопов водорода с кон-

струкционными материалами // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2014. Т. 324, № 2. С. 149–162.

3. Заика Ю. В. Интегральные операторы прогнозирования и идентификации моделей водородопроницаемости. Петрозаводск: КарНЦ РАН, 2013. 505 с.

4. Заика Ю. В., Родченкова Н. И. Краевая задача водородопроницаемости мембран газоразделения // Труды Карельского научного центра РАН. 2015. № 10. С. 55–68. doi: 10.17076/mat133

5. Заика Ю. В., Родченкова Н. И. Краевая задача со свободной границей: гидрирование циркониевого сплава // Труды Карельского научного центра РАН. 2016. № 8. С. 24–33. doi: 10.17076/mat392

6. Колачев Б. А., Ильин А. А., Лавренко В. А., Левинский Ю. В. Гидридные системы: Справ. изд. М.: Металлургия, 1992. 352 с.

7. Писарев А. А., Цветков И. В., Маренков Е. Д., Ярмо С. С. Проницаемость водорода через металлы: учебн. пособие. М.: МИФИ, 2008. 144 с.

8. Чертов А. Г. Единицы физических величин: учебное пособие для вузов. М.: Высшая школа, 1977. 287 с.

9. Kojakhmetov S., Sidorov N., Piven V., Sipatov I., Gabis I., Arinov B. Alloys based on 5 group metals for hydrogen purification membranes // J. Alloys Compd. 2015. Vol. 645, suppl. 1. P. S36–S40. doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242

REFERENCES

1. Volkov E. A. Numerical methods: a university textbook. Moscow: Nauka; 1987. 248 p. (In Russ.)
2. Gordienko Yu. N., Kul'sartov T. V., Zaurbekova Zh. A., Ponkratov Yu. V., Gnyrya V. S., Nikitenkov N. N. Application of hydrogen permeation method in reactor experiments on investigation of hydrogen isotope interaction with structural

materials. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*. 2014;2:149–162. (In Russ.)

3. Zaika Y. V. Integral operators for forecasting and identification of hydrogen permeability models. Petrozavodsk: KarRC RAS; 2013. 505 p. (In Russ.)

4. Zaika Y. V., Rodchenkova N. I. Boundary-value problem of hydrogen permeability of gas separation membranes. *Trudy Karel'skogo nauchnogo tsentra RAN = Transactions of the Karelian Research Centre RAS*. 2015;10:55–68. (In Russ.). doi: 10.17076/mat133

5. Zaika Y. V., Rodchenkova N. I. Boundary-value problem with free boundary: zirconium alloy hydrogenation. *Trudy Karel'skogo nauchnogo tsentra*

RAN = Transactions of the Karelian Research Centre RAS. 2016;8:24–33. (In Russ.). doi: 10.17076/mat392

6. Kolachev B. A., Il'in A. A., Lavrenko V. A., Levinskii Yu. V. Hydride systems: a reference edition. Moscow: Metallurgiya; 1992. 352 p. (In Russ.)

7. Pisarev A. A., Tsvetkov I. V., Marenkov E. D., Yarko S. S. The permeability of hydrogen through metals. Moscow: MIFI; 2008. 144 p. (In Russ.)

8. Chertov A. G. Units of physical quantities: a university textbook. Moscow: Vysshaya shkola; 1977. 287 p. (In Russ.)

9. Kojakhmetov S., Sidorov N., Piven V., Sipatov I., Gabis I., Arinov B. Alloys based on 5 group metals for hydrogen purification membranes. *J. Alloys Compd.* 2015;645(1):S36–S40. doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242

Поступила в редакцию / received: 05.05.2025; принята к публикации / accepted: 02.06.2025.
Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflict of interest.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

Грудова Ксения Васильевна

младший научный сотрудник

e-mail: grudova@krc.karelia.ru

CONTRIBUTOR:

Grudova, Kseniya

Junior Researcher