



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 3, 2018

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI 10.15593/perm.mech/2018.3.03

УДК 539.3:539.4

## ТЕРМОДИФФУЗИОННАЯ ЗАДАЧА НАВОДОРОЖИВАНИЯ СТАЛЬНОЙ ОБОЛОЧЕЧНОЙ КОНСТРУКЦИИ

И.Г. Емельянов, В.И. Миронов

Институт машиноведения УрО РАН, Екатеринбург, Россия

### О СТАТЬЕ

Получена: 24 июня 2018 г.  
Принята: 03 сентября 2018 г.  
Опубликована: 08 октября 2018 г.

#### Ключевые слова:

водород, оболочка, диффузия, свойства материала, температура, деградация, концентрация, теплопроводность, граничные условия, парциальное давление.

### АННОТАЦИЯ

Процессы теплопередачи и диффузии водорода в металле имеют различные физические времена, но описываются одинаковыми по структуре уравнениями математической физики. Этот факт использован в статье для адаптации хорошо разработанного математического аппарата решения задач теплопроводности к решению задачи диффузии водорода в металл. Для расчета тел сложной формы и разного рода граничных условий принят подход, основанный на замене уравнения теплопроводности эквивалентным вариационным уравнением, которое решается методом конечных элементов.

Необходимость использования численных методов, используемых в данной статье, продиктована общей направленностью цикла работ по определению взаимного влияния водорода и механических напряжений на кинетику деформирования и разрушения элементов конструкций. Расчет напряженно-деформированного состояния элементов реальных конструкций проводится исключительно численными методами. Аналитическое решение задачи о распространении тепла в стержне использовано при тестировании рабочих программ метода конечных элементов. Цель работы состоит в разработке подхода к решению связанной термодиффузионной задачи наводороживания стальной оболочечной конструкции, необходимого для нахождения закона распределения концентрации водорода в теле оболочки в зависимости от его концентрации на границе и температуры.

В качестве примера решена краевая задача о проникновении водорода в стенку диффузионного аппарата, что позволит в дальнейшем определить изменение механических свойств материала и ресурс изделия. Предложенный подход позволил установить кинетику процессов теплопередачи и наводороживания стальной стенки цилиндрической части аппарата. Прикладное значение полученных результатов определяется тем, что температура, давление и концентрации водорода на внутренней поверхности отвечали условиям эксплуатации.

© ПНИПУ

© Емельянов Игорь Георгиевич – д.т.н., г.н.с., e-mail: [emelyanov@imach.uran.ru](mailto:emelyanov@imach.uran.ru), ORCID: [0000-0002-9733-5485](https://orcid.org/0000-0002-9733-5485).  
Миронов Владимир Иванович – к.т.н., с.н.с., e-mail: [visim.vm@mail.ru](mailto:visim.vm@mail.ru), ORCID: [0000-0002-5150-6074](https://orcid.org/0000-0002-5150-6074).

Igor G. Emel'yanov – Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher, e-mail: [emelyanov@imach.uran.ru](mailto:emelyanov@imach.uran.ru), ORCID: [0000-0002-9733-5485](https://orcid.org/0000-0002-9733-5485).

Vladimir I. Mironov – CSc in Technical Sciences, Senior Researcher, e-mail: [visim.vm@mail.ru](mailto:visim.vm@mail.ru), ORCID: [0000-0002-5150-6074](https://orcid.org/0000-0002-5150-6074).



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

## A THERMODIFFUSION PROBLEM OF HYDROGENATION OF A STEEL SHELL STRUCTURE

I.G. Emel'yanov, V.I. Mironov

Institute of Engineering Science, Russian Academy of Sciences (Ural Branch),  
Ekaterinburg, Russian Federation

---

### ARTICLE INFO

Received: 24 June 2018  
Accepted: 03 September 2018  
Published: 08 October 2018

#### Keywords:

hydrogen, shell, diffusion, material properties, temperature, degradation, concentration, heat transfer, boundary conditions, partial pressure.

---

### ABSTRACT

The processes of heat transfer and diffusion in metals are characterized by different physical periods. However they are described by structurally similar equations of mathematical physics. This fact is used in the paper to adapt the well-defined mathematical principles set for heat transfer to the purposes of solving the problems of hydrogen diffusion into metals. An approach is assumed which is based on the substitution of the heat transfer equation with an equivalent variable equation utilized to calculate parameters of complexly shaped bodies and boundary conditions of various types via the finite-element method.

The necessity of utilizing the numerical methods used in the research is dictated by the main direction of the algorithm applied to the determination of the interrelated influence of hydrogen and mechanical stresses on the kinematics of deformation and fracture of structural elements. The calculation of the stress-strain state of actual structural elements is carried out by means of numerical methods only. An analytical solution of the problem of heat distribution in a rod is utilized to test software based on the finite-element method. The goal of the research is to develop an approach necessary to solve a related thermodiffusion problem of hydrogen saturation in a steel shell structure and to determine the law of hydrogen concentration distribution in the body of a shell depending on temperature and the hydrogen concentration at the boundaries.

As an example, a problem of hydrogen penetration into the wall of a diffusion device is solved. The solution would allow one to evaluate changes in the mechanical properties of materials and the service life of a product. The approach proposed here has allowed us to determine the kinematics of the processes of heat transfer and hydrogen saturation in steel walls of a cylindrical section of the device. The applied importance of the results obtained is based on the fact that the temperature, pressure and concentration of hydrogen over the inner surface are in correspondence with the operational conditions.

© PNRPU

---

### Введение

Многие металлы при работе в различных агрессивных средах изменяют свои механические свойства по сравнению с испытаниями в воздухе. Актуальной научной проблемой является учет влияния водородосодержащих сред на механические свойства конструкционных материалов, так как в настоящее время водород активно используется в различных отраслях промышленности и как технологический реагент, и как экологически чистое топливо. При контакте с водородосодержащей средой происходит разной природы *деградация* металлов (эрозионный износ, межкристаллитное растрескивание, водородное охрупчивание, водородная коррозия и т.п.), которая является источником катастрофических последствий [1–5].

Возрастающие требования к надежности эксплуатации машин, оборудования и устройств для хранения и транспортировки водорода определяют интерес исследователей к задачам диффузии в условиях нагружения, деформации и разрушения наводороженного металла. Работ по моделированию взаимовлияющих друг на друга процессов диффузии и деформирования до последнего времени было сравнительно немного [5–10].

Взаимное влияние наводороживания и напряженно-деформированного состояния элемента конструкции определяет выбор численных методов для решения краевых задач. Для расчета тел сложной формы и разного рода граничных условий в статье принят подход, основанный на замене уравнения теплопроводности эквивалентным вариационным уравнением, которое решается методом конечных элементов. Сложность заключается в постановке начальных и граничных условий, определении численных значений коэффициента диффузии, а в целом – в отсутствии достаточно надежной физической теории для описания поведения материалов и элементов конструкций в водородосодержащей среде.

Континуальное описание процесса взаимодействия водорода с металлами является многопараметрической задачей. В систему определяющих параметров могут входить не только механические (напряжения, деформации, температура), но и физико-химические параметры (концентрация и внутреннее давление водорода, параметр химического взаимодействия, параметр сплошности). В таких случаях вводятся упрощающие гипотезы и используется метод последовательных возмущений параметров, позволяющий свести решение сложной связанной задачи к решению последовательно более простых краевых задач.

## 1. Воздействие водорода на сталь

Вопросы взаимодействия водорода с металлами и сплавами изучаются с начала прошлого века. Можно выделить работу [11], в которой приведен обзор монографий и статей, освещающих эту проблему. В области водородного материаловедения для объяснения водородной хрупкости металлов выдвигаются различные гипотезы [12–15], пригодные для определенных материалов и условий проведения эксперимента. Конструкционная прочность наводороженных металлов рассматривается в рамках феноменологической теории трещин [12, 16]. Упрощенная физическая модель состоит в том, что водороду энергетически выгодно концентрироваться в зоне действия растягивающих механических напряжений.

Следует отметить, что накопленная в настоящий момент экспериментальная информация разбросана по большому количеству публикаций, и она в основном получена материаловедами и химиками, и использование ее в моделях деформированного твердого тела для оценки прочности металлических конструкций не всегда является простой задачей. Известно, что опасность водородного воздействия на металл заключается еще и в том, что этот процесс может протекать внутри металла и не проявляться никакими внешними признаками. Поэтому никакими средствами (кроме неэффективного механического средства – изменения твердости и новых ядерно-физических методов [17, 18]) изменение механических свойств зафиксировать не удастся.

Внедрение водорода в металлы и сплавы может протекать по одному из двух различных механизмов [11, 19]: 1) в результате электрохимических (в основном низкотемпературных) процессов (коррозия, травление, катодная обработка) с участием ионов водорода, которые восстанавливаются и поглощаются сталью, этот процесс часто называют низкотемпературным водородным охрупчиванием, 2) и в результате высокотемпературной водородной коррозии. Этот процесс протекает при повышенных температурах и давлениях в результате термической диссоциации молекул водорода с образованием атомарного водорода, который абсорбируется сталью и вступает во взаимодействие с карбидами.

Низкотемпературное водородное охрупчивание обычно наблюдается при температурах до  $T = 200$  °С. Если конструкционный элемент представляет собой сосуд с избыточным давлением, тогда водород за определенный период времени  $t$  под давлением проникает в металл. Водородное воздействие характеризуется тем, что водород по диффузионному механизму проникает в элементы конструкций, причем он интенсивнее проникает в растянутые зоны тела, накапливается там и после достижения определенной концентрации приводит к изменению механических свойств материала конструкции [11, 20]. При этом степень изменения свойств металлов сильно зависит от содержания водорода. Особенность работы нагруженных конструкций, подвер-

гающихся низкотемпературному наводороживанию, заключается в том, что изменение механических свойств материала в растянутых зонах происходит более интенсивно, чем в сжатых зонах. Неравномерное изменение свойств вызывает перераспределение поля напряжений, которое, в свою очередь, влияет на распределение водородного поля. Зависимость между напряжением  $\sigma$ , деформацией  $\varepsilon$  и концентрацией  $c$  водорода в нагруженном конструкционном элементе для задач низкотемпературного водородного охрупчивания можно представить как  $\sigma = f(\varepsilon, c(\sigma), T, t)$ .

При одновременном действии высоких температур и давлений имеет место физико-химическое взаимодействие металла с водородом, приводящее к необратимому изменению первоначальных механических свойств. Такое воздействие связано в основном с разрушением карбидной составляющей. Это физико-химическое явление принято называть в технике водородной коррозией стали [11, 21]. Обычно водородная коррозия развивается в сталях при длительной выдержке в водороде высокого давления и при высоких температурах. В основе механизма водородной коррозии лежит взаимодействие водорода с углеродом с образованием метана. Эта реакция начинается с поверхности, приводя к обезуглероживанию и образованию микротрещин, которые постепенно распространяются в металле, снижая его прочностные и пластические свойства. Влияние водорода сказывается на изменении вида диаграммы деформирования сталей. Установлено, что высокотемпературное наводороживание под давлением приводит к снижению прочностных свойств сталей с исчезновением площадки текучести. Зависимость между напряжением, деформацией и концентрацией водорода в нагруженном конструкционном элементе для задач высокотемпературного наводороживания можно представить как  $\sigma = f(\varepsilon, c, T, t)$ .

Таким образом, при решении задач определения прочности элементов конструкций, находящихся в контакте с водородом, необходимо учитывать феноменологические эффекты развития деформаций в образцах в водородосодержащих средах. Континуальный подход даст возможность наиболее просто установить некоторые общие соотношения между параметрами, характеризующими прочность конструкционного элемента при эксплуатации. Однако при решении прикладных задач, из всего многообразия полученных экспериментальных данных для различных сплавов не так просто подобрать данные, полностью удовлетворяющие необходимым требованиям для определения прочности и долговечности конструкционных элементов. Это объясняется тем, что все эксперименты обладают большим разнообразием применяемых методик и часто приходится использовать данные по испытаниям в нейтральной среде, полученные одним автором, а данные по испытаниям в водородосодержащей среде этих же материалов другими авторами.

Математическая формализация задач наводороживания базируется на теории тепломассообмена [22, 23] и современных численных методах решения краевых задач. В работе [24] представлены современные методы решения нестационарных уравнений теплопроводности и диффузии. Приводятся методы анализа устойчивости явных и неявных разностных схем и алгоритмы реализации некоторых численных методов. Представлены примеры решения некоторых прикладных задач методом продольно-поперечной прогонки. В работах [25, 26, 27, 28] приведены некоторые краевые задачи водородопроницаемости различных элементов конструкций. Полученные численные и аналитические результаты позволяют описать процесс диффузии водорода в сравнительно простых элементах конструкций. В предлагаемой работе решается связанная задача теплопроводности и диффузии водорода для осесимметричной оболочки. Использование метода конечных элементов позволяет исследовать подобные конструкции более сложной геометрии в условиях, когда коэффициент диффузии водорода изменяется в зависимости от времени и температуры.

## 2. Постановка задачи

В работе предложен метод оценки наводороживания стальной конструкции в процессе ее эксплуатации в водосодержащей среде при повышенной температуре  $T$  и избыточном давлении  $p$ . Предполагается, что конструкция представляет собой стальную оболочку вращения, толщиной  $h$ , с переменными геометрическими и физико-механическими параметрами вдоль образующей (рис. 1). Одна из поверхностей оболочки длительное время соприкасается с агрессивной водосодержащей средой, из которой в материал диффундирует водород.

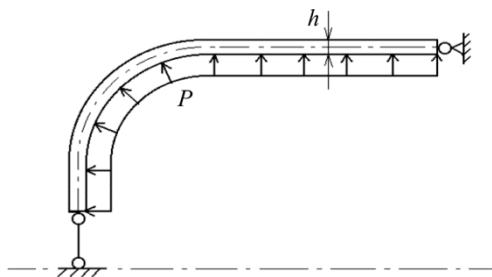


Рис. 1. Оболочка вращения  
Fig. 1. A shell of revolution

Решение этой связанной задачи можно представить в виде решения задачи теплопроводности с определением распределения температуры в оболочке во времени  $T(t)$  и решения задачи диффузии водорода с определением распределения концентрации водорода  $c(t, T)$  в оболочке. Оболочку отнесем к непрерывной срединной поверхности с криволинейными ортогональными координатами  $s$ , где  $s$  – меридиональная и  $\theta$  – окружная координата. Через  $\gamma$  ( $-h/2 \leq \gamma \leq h/2$ ) обозначена координата в направлении внешней нормали к поверхности оболочки.

Изменение температуры в любой точке тела за счет теплопроводности будет описываться уравнением [22, 23]

$$\rho c_t \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad}(T)), \quad (1)$$

где  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности, ккал/см·ч·град;  $c_t$  – теплоемкость, Вт/м·град;  $\rho$  – плотность тела.

Процесс распространения тепла в оболочке описывается соотношением [29]

$$\frac{1}{H_1 H_2} \left[ \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{H_2}{H_1} \frac{\partial T}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{H_1}{H_2} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left( H_1 H_2 \frac{\partial T}{\partial \gamma} \right) \right] = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2)$$

где  $H_1, H_2$  – параметры Ляме;  $a$  – коэффициент температуропроводности

$$a = \frac{\lambda}{c_t \rho}. \quad (3)$$

Коэффициент температуропроводности  $a$  является коэффициентом переноса тепла и имеет размерность  $\text{м}^2/\text{с}$ .

Влияние окружающей среды на поверхность оболочки в каждый момент времени задается граничными условиями. В зависимости от постановки задачи теплопроводности обычно используют три рода граничных условий. Первый род заключается в том, что в каждый момент времени на поверхности оболочки необходимо задать распределение температуры. Второй род основывается на том, что задается тепловой поток через поверхность тела. Для третьего рода задаются температура окружающей среды  $T^c$  и закон теплообмена между поверхностью тела и средой. Например, закон при конвективном теплообмене имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \frac{\alpha}{\lambda} (T^c - T), \quad (4)$$

где  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи, ккал/см<sup>2</sup>·ч·град;  $n$  – вектор внешней нормали к поверхности. Значения  $\lambda$ ,  $c_t$  и  $\rho$  для многих сталей приведены в соответствующих справочниках.

Поскольку оболочка контактирует с водородом, то происходит процесс наводороживания металла, т.е. водород начинает диффундировать в металлическую стенку.

Процессы нагрева и диффузии развиваются за счет различных физических носителей, что показано в [22, 23, 30, 31]. Однако при решении прикладных задач, которые описываются методами математической физики, принимается гипотеза, что при математическом описании процесса диффузии можно использовать уравнение теплопроводности с постоянными коэффициентами [30, 31]. Эта гипотеза существенно упрощает решение задач диффузии, поскольку в настоящее время методы исследования задач теплопроводности достаточно хорошо разработаны. Следовательно, процесс диффузии в теле будет описываться следующим уравнением:

$$\frac{1}{H_1 H_2} \left[ \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{H_2}{H_1} \frac{\partial c}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{H_1}{H_2} \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left( H_1 H_2 \frac{\partial c}{\partial \gamma} \right) \right] = \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (5)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии;  $c$  – концентрация водорода в стенке оболочки.

Коэффициент  $D$  характеризует эффективность диффузионного перемещения исследуемого вещества и имеет размерность  $\text{м}^2/\text{с}$ .

Однако известно, что процесс диффузии сильно зависит от температуры тела. Соотношение Эйнштейна связывает подвижность молекулы  $\mu_p$  с коэффициентом диффузии и температурой.

$$D = \mu_p k_B T,$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана.

Таким образом, данная термодиффузионная задача для оболочечной конструкции при эксплуатации будет описываться системой из двух дифференциальных уравнений (2), (5) с различными начальными и граничными условиями.

### 3. Принимаемые допущения и метод решения задачи

Решить данную нестационарную связанную задачу в трёхмерной постановке достаточно сложно. Однако, учитывая конструктивные особенности конкретной прикладной задачи (осесимметричность теплового состояния оболочки вращения и специфику физических процессов), решение можно представить как ряд полувязанных задач.

Поскольку скорость распространения тепла на несколько порядков выше скорости распространения диффундирующего водорода, эти связанные задачи можно решать по отдельности.

Таким образом, проинтегрировав уравнение (2) в любой интересующий нас момент времени  $t_i$ , мы сможем определить распределение температуры в оболочке. При решении задачи диффузии будем считать, что в оболочке в момент времени  $t_i$  имеется установившееся стационарное поле температур  $T_i(s, \gamma)$ .

При решении задач теплопроводности применяются различные аналитические и численные методы [22, 23, 32, 33, 34]. В данной работе при решении задачи теплопроводности оболочки используем подход, основанный на том, что уравнение теплопроводности заменяется эквивалентным вариационным уравнением [34], которое решается методом конечных элементов [32]. Вычислительная программа тестировалась на задаче нагрева стержня с торца, имеющей точное аналитическое [22] и приближенное решение с использованием численных методов [34]. Вычислительная погрешность распро-

странения температуры в середине стержня даже при крупной сетке конечных элементов не превышает 1 %.

Для задачи диффузии на внутренней поверхности оболочки, аналогично задаче теплопроводности, можно задавать различные граничные условия. Граничными условиями для рассматриваемой задачи (5) могут служить значения концентрации водорода  $c$ , которые должны быть известны на поверхности оболочки из физических соображений.

Объёмная концентрация водорода в металлах измеряется его содержанием в ppm ( $1 \text{ см}^3/100 \text{ г}$ ). При комнатной температуре и атмосферном давлении наводороживания из газовой среды практически не происходит. При атмосферном давлении и  $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$  концентрация  $c = 0,6 \text{ см}^3/100 \text{ г}$  и с повышением температуры непрерывно растет [17]. Известно, что растворимость водорода в стали может достигать 300–400 ppm [17]. Для решения уравнения (5) необходимо определить концентрацию водорода на поверхности оболочки, которая определяется внутренним давлением водородосодержащей среды  $p$ , температурой  $T$  и химическим составом стали.

В работе [35] показано, что количество растворенного в стали водорода зависит от парциального давления атомарного водорода на границе газ–металл, которое определяется общим давлением газа и константой равновесия реакции водорода. Концентрацию водорода в сталях в зависимости от парциального давления водорода в газовой фазе  $p_{\text{H}_2}$  предложено описать соотношением, справедливым для разных сталей

$$c = K_0 \exp \left\{ - \frac{\Delta H}{2R(T + 273)} \right\} \sqrt{p_{\text{H}_2}}, \quad (6)$$

где  $K_0$  – безразмерный коэффициент;  $\Delta H$  – теплота растворения, кДж/моль, ( $K_0$  и  $\Delta H$  приводятся для некоторых сталей. Существуют и более простые выражения для определения растворимости водорода, в которых она зависит только от температуры и от давления [36]. В работе [37] для образцов из стали 25ХНМА экспериментально зафиксировано  $c = 15 \text{ см}^3/100 \text{ г}$ . Таким образом, определив концентрацию водорода  $c$  и задав ее на внутренней поверхности оболочки, будем иметь граничные условия первого рода

$$c \left( \gamma = - \frac{h}{2}, t \right) = c_{\text{H}} \quad (7)$$

где  $c_{\text{H}}$  – начальная концентрация водорода на поверхности оболочки.

Коэффициент диффузии, который необходим для решения (5), для интересующей пары диффундирующий водород–металл, чаще всего измеряется экспериментально. Однако коэффициент диффузии можно также оценить по порядку величины из простых модельных соображений. Если сравнить коэффициент диффузии  $D$  для твёрдых тел, то для примеси водорода  $\text{H}_2$  (в среде  $\text{SiO}_2$ ) он равен  $1,4 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ , а коэффициент

температуропроводности для стали  $a$  равен  $1,4 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$  [31]. Видно, что скорость процесса диффузии в тысячу раз (а для некоторых сталей в 10 тысяч раз) медленнее, чем скорость распространения тепла. Таким образом, если принять, что на границе поверхностного слоя оболочки концентрация диффундирующего вещества равна его концентрации в объеме в предположении быстрого и эффективного перемешивания водородосодержащей среды, и считать объем среды достаточно большим, то для данной задачи можно задавать граничные условия первого рода. Как отмечено ранее, процесс теплопроводности является быстро текущим и хорошо разработанным с вычислительной точки зрения процессом. Поэтому задача диффузии решается по разработанной вычислительной программе расчета теплопроводности с учетом более «медленного» процесса диффузии.

#### 4. Результаты решения

Для иллюстрации предложенного метода определялось температурное поле и наводороживание стального корпуса диффузионного аппарата в процессе эксплуатации. Данный аппарат предназначен для получения особо чистого водорода [35]. Корпус аппарата аппроксимируется тремя оболочечными элементами: пластиной, тором и цилиндром (см. рис. 1). Толщина стенки  $h = 0,018 \text{ м}$ , срединный радиус цилиндрической части  $R = 0,65 \text{ м}$ . Граничные условия выбирались из условия максимально ближе отразить реальную работу корпуса. Корпус нагружен внутренним давлением  $P = 2,5 \text{ МПа}$ . Температура может изменяться от 20 до 200 °С. В результате длительной эксплуатации аппарата происходит диффузия водорода в стенку корпуса, что приводит к изменению механических характеристик материала и падению его прочности [38, 39].

Граничные условия на внутренней поверхности оболочки примем в виде закона конвективного теплообмена (4). При расчете примем следующие теплофизические параметры процесса: коэффициент теплопроводности  $\lambda = 0,14 \text{ ккал}/\text{см} \cdot \text{ч} \cdot \text{град}$ , коэффициент температуропроводности  $a = 0,12 \text{ см}^2/\text{с}$ , коэффициент теплоотдачи  $\alpha = 0,066 \text{ ккал}/\text{см}^2 \cdot \text{ч} \cdot \text{град}$ , температура окружающей среды внутри диффузионного аппарата  $T^c = 200 \text{ °С}$ , начальное распределение температуры  $T = 20 \text{ °С}$ . Будем считать, что внешняя поверхность оболочки теплоизолированная.

На рис. 2 показано распределение температуры по толщине стенки. Кривые 1–5 соответствуют 1, 5, 10, 100, 200 секундам нагрева. На оси абсцисс указаны номера точек, в которых контролировалась температура при построении графика.

Из проведенных расчетов следует, что через 4 минуты работы диффузионного аппарата устанавливается одинаковая температура по толщине стенки.

Если внешняя поверхность оболочки не теплоизолированная, то граничные условия на внешней поверхности оболочки примем также в виде закона конвектив-

ного теплообмена (4). При этом температуру окружающей среды снаружи диффузионного аппарата примем  $T^c = 25 \text{ °С}$ . На рис. 3 показано распределение температуры по толщине стенки для этого случая к 200 секундам нагрева. Из рисунка видно линейное установившееся поле температуры по толщине стенки.

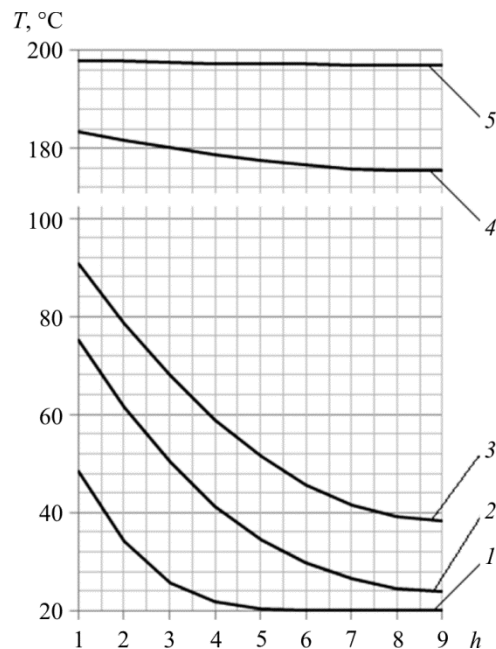


Рис. 2. Распределение температуры по толщине стенки диффузионного аппарата

Fig. 2. Distribution of temperature over the width of the wall of the diffuser



Рис. 3. Распределение температуры по толщине стенки после 200 секунд нагрева при неизолированной наружной поверхности

Fig. 3. Distribution of temperature over the width of the wall after 200-second of heating in case of an uninsulated outer surface

Таким образом, из проведенных расчетов следует, что для любого момента времени  $t_i$  мы определили установившееся поле температур  $T_i(s, \gamma)$ .

На втором этапе необходимо решить задачу диффузии, которая описывается уравнением (5). Поскольку оболочка прогревается к 200 секунде работы аппарата по толщине практически одинаково, коэффициент диффузии по толщине стенки принимаем постоянным,  $D(T) = \text{const}$ .

Для данной задачи зададим граничные условия первого рода (7), выражающиеся в том, что на внутренней поверхности оболочки задано распределение концентрации

водорода  $c = c_H$  в момент времени  $t = t_0$ . Вычислив начальную концентрацию водорода  $c_H$  на поверхности оболочки, используя соотношения (6), получаем  $c_H = 10 \text{ см}^3/100 \text{ г}$ . Граничные условия на внешней поверхности оболочки примем  $c_H = 0$ . Коэффициент диффузии  $D$  для  $T = 200 \text{ }^\circ\text{C}$  примем равным  $1,07 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ .

На рис. 4 показано распределение концентрации водорода по толщине стенки на цилиндрической части корпуса. Кривые 1–3 соответствуют 20 мин., 1,66 ч и 33,33 ч нагрева.

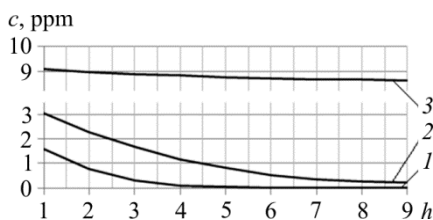


Рис. 4. Распределение концентрации водорода по толщине стенки

Fig. 4. Distribution of hydrogen concentration over the width of the wall

На рис. 5 показано распределение концентрации водорода по толщине стенки после 3,3 ч работы диффузионного аппарата. Кривые 1 и 2 соответствуют граничным условиям первого и третьего рода.

Таким образом, предложенный подход позволил определить кинетику процессов нагревания и наводороживания стальной стенки диффузионного аппарата в процессе эксплуатации. Данная информация нужна для определения изменения механических свойств материала во времени и последующей оценки прочности и ресурса диффузионного аппарата.

### Библиографический список

1. Карпенко Г.В. Прочность стали в коррозионной среде. – М.: Машгиз, 1963. – 187 с.
2. Инспекция трубопроводов с помощью интеллектуальных дефектоскопов-снарядов / Б.Р. Павловский [и др.] // Безопасность труда в промышленности. – 1992. – № 3. – С. 15–18.
3. Bombara G., Cavallini M. Two cases of stress cracking of pressure vessels in chemical plants // Brit. Corros. J. – 1977. – Vol. 12. – No. 4. – P. 241–242.
4. Cracknell A. The effect of hydrogen on steel // Chem. Eng. (Gr. Brit.). – 1976. – No. 306. – P. 92–94.
5. Астафьев В.И., Ширяева Л.К. Накопление поврежденности и коррозионное растрескивание металлов под напряжением. – Самара: Изд-во СамГУ, 1998. – 123 с.
6. Андрейкив А.Е. Пространственные задачи теории трещин. – Киев.: Наук. думка, 1982. – 345 с.
7. Овчинников И.Г. Модель деформирования и разрушения конструктивных элементов, подвергающихся высокотемпературной водородной коррозии при всестороннем давлении водорода // Расчет элементов конструкций, взаимодействующих с агрессивными средами: межвузов. науч. сб. – Саратов: Изд-во Сарат. политехн. ин-та, 1984. – С. 24–34.
8. Маричев А.А. Связь критической концентрации водорода и критического коэффициента интенсивности напряже-

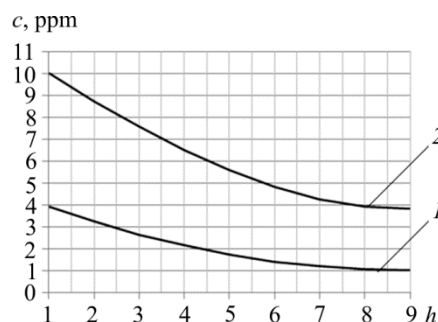


Рис. 5. Распределение концентрации водорода при разных граничных условиях

Fig. 5. Distribution of hydrogen concentration at various boundary conditions

Процедура получения численного решения термодиффузионной задачи сохранится для оболочки с переменными геометрическими и физическими параметрами. Следовательно, класс задач, в которых может использоваться предлагаемый подход, будет достаточно представительным. Корректная постановка задач по оценке прочности и ресурса элементов реальных металлических конструкций возможна только при известном законе распределения концентрации водорода в деформируемом теле.

### Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания, тема № 0391-2016-0001.

### Acknowledgements

The work was carried out within the State Assignment No. 0391-2016-0001.

- ний при водородном охрупчивании конструкционных материалов // Физико-химическая механика материалов. – 1984. – № 3. – С. 6–14.
9. Овчинников, И. И. Деформирование и разрушение материалов в водородосодержащей среде, диффузионные характеристики которой зависят от напряженного состояния // интернет-журнал «Науковедение». – 2013. – № 1 (14). – 8 с.
10. Sofronis P., Lufrano J. Hydrogen transport and large strain elastoplasticity near a notch in alloy X-750 // Engineering Fracture Mechanics. – 1998. – Vol. 59. – No. 6. – P. 827–845.
11. Овчинников И. И., Овчинников И. Г. Влияние водородосодержащей среды при высоких температурах и давлениях на поведение металлов и конструкций из них [Электронный ресурс] // Интернет-журнал «Науковедение». – 2012. – No. 14. – URL: <https://naukovedenie.ru/PDF/60tnv412.pdf>. (дата обращения: 20.09.2017).
12. Панасюк В.В. О важнейших задачах исследований по физико-химической механике конструкционных материалов // Физ.- хим. механика материалов. – 1974. – № 4. – С. 75–80.
13. Morlett J.G., Johnson H.H., Troiano A.R. A New concept of hydrogen embrittlement in steel // Journal of Iron and Steel Institute. – 1958. – Vol. 189. – P. 37.

14. Zapffe C.A., Sims C.E. Hydrogen embrittlement, internal stress and defects in steel // Transactions of the Metallurgical Society of AIME. – 1941. – Vol. 145. – P. 225.

15. Шашкова Л. В. О методическом подходе к изучению кинетики водородного охрупчивания сталей // Междунар. науч.-исслед. журн. – 2012. – Ч. 1, № 5 (5). – С. 30–36.

16. Механика водородного охрупчивания металлов и расчет элементов конструкций на прочность / А.Е. Андрейкив [и др.] // Препринт № 133. Физ.-мех. ин-т им. Г.В. Карпенко. – Львов, 1987. – 50 с.

17. Черданцев Ю.П., Чернов И.П., Тюрин Ю.И. Методы исследования систем металл-водород: учеб. пособие. – Томск: Изд-во ТПУ, 2008. – 286 с.

18. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М. Молекулярно-динамическое исследование сорбционных свойств точечных дефектов по отношению водороду в Pd и Ni // Химическая физика и мезоскопия. – 2013. – Т. 15, № 2. – С. 225–229.

19. Шрейдер А.В., Шпарбер И.С., Арчаков Ю.И. Влияние водорода на нефтяное и химическое оборудование. – М.: Машиностроение, 1976. – 144 с.

20. Карпенко Г.В., Криптякевич Р.И. Влияние водорода на свойства стали. – М.: Металлургиздат, 1962. – 192 с.

21. Арчаков Ю.И. Водородная коррозия стали. – М.: Металлургия, 1985. – 192 с.

22. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 599 с.

23. Лыков А.В. Тепломассообмен: справочник. – М.: Энергия, 1978. – 48 с.

24. Крайнов А.Ю., Миньков Л.Л. Численные методы решения задач тепло- и массопереноса: учеб. пособие. – Томск: STT, 2016 – 92 с.

25. Диффузия водорода в сварных соединениях конструкционных сталей / Н.Н. Сергеев, А.Н. Сергеев, С.Н. Кутепов, А.Е. Гвоздев, Е.В. Агеев // Изв. Юго-Западного гос. ун-та. – 2017. – № 6 (75). – С. 85–95.

26. Заика Ю.В., Родченкова Н.И. Краевая задача водородопроницаемости мембран газоразделения // Тр. Карел. науч. центра Рос. акад. наук. – 2015. – № 10. – С. 54–68.

27. Исследование эксплуатационного наводороживания материалов деталей / М.Е. Ставровский, М.И. Сидоров, С.Г. Емельянов, С.П. Посеренин // Изв. Юго-Западного гос. ун-та. – 2016. – № 2 (65). – С. 59–65.

28. Фомин В.Г. Моделирование двухсвязной пластинки, находящейся в поле температур под воздействием агрессивной среды // Математические методы в технике и технологиях. ММТТ. – 2016. – № 2 (84). – С. 83–84.

29. Шевченко Ю.Н., Прохоренко И.В. Методы расчета оболочек: в 5 т. Т. 3. Теория упругопластических оболочек при неизоэргических процессах нагружения. – Киев: Наук. думка, 1981. – 296 с.

30. Араманович И.Г., Левин В.И. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1969. – 288с.

31. Воробьев А.Х. Диффузионные задачи в химической кинетике: учеб. пособие – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003. – 98 с.

32. Зенкевич О.К., Чанг И. Метод конечных элементов в теории сооружений и механике сплошных сред. – М.: Недра, 1974. – 240 с.

33. Vasilenko A. T., Emel'yanov I. G. Thermal stressed state of a box-shaped crucible // Strength of Materials. – March. – 2001. – Vol. 33. – Iss. 2. – P. 165–170.

34. Решение осесимметричной задачи термопластичности для тонкостенных и толстостенных тел вращения на ЕС ЭВМ / Ю.Н. Шевченко, М.Е. Бабешко, В.В. Пискун [и др.]. – Киев: Наук. думка, 1980. – 196 с.

35. Гельд П.В., Рябов Р.А. Водород в металлах и сплавах. – М.: Металлургия, 1974. – 272 с.

36. Дубовой В.Я. Флокены в сталях: моногр. / ГНТИЦЦМ. – М., 1950. – 332 с.

37. Сосуды и трубопроводы высокого давления: справочник / Е.Р. Хисматулин [и др.]. – М.: Машиностроение, 1990. – 384 с.

38. Емельянов И.Г., Миронов В.И. Долговечность оболочечных конструкций. – Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2012. – 217 с.

39. Veselov I., Emelyanov I., Fedotov V. Research of the tension of the shell working in hydrogen-containing environment // Proceedings of the 13<sup>th</sup> World Hydrogen Energy Conference, Beijing, China, June 12-15, 2000. – P. 1041–1045.

## References

1. Karpenko G.V. Prochnost' stali v korrozionnoj srede [Strength of steel in a corrosive environment]. Moscow, Mashgiz, 1963, 187 p.

2. Pavlovskii B.R. Inspekcija truboprovodov s pomoshch'yu intellektual'nyh defektoskopov-snaryadov [Inspection of pipelines with the help of intelligent flaw detector-shells]. Bezopasnost' truda v promyshlennosti, 1992, no. 3, pp.15-18.

3. Bombara G. Two cases of stress cracking of pressure vessels in chemical plants [Tekst] / G. Bombara, M. Cavallini. Brit. Corros. J, 1977, vol. 12, no. 4, pp. 241-242.

4. Cracknell A. The effect of hydrogen on steel. Chem. Eng. (Gr. Brit.), 1976, no. 306, pp. 92-94.

5. Astaf'ev V.I., Shiryayeva L.K. Nakoplenie povrezhdennosti i korrozionnoe rastreskivanie metallov pod napryazheniem [Accumulation of damage and stress corrosion cracking of metals]. Samara, SamGU, 1998, 123 p.

6. Andrejkiv A.E. Prostranstvennye zadachi teorii treshchin [Spatial problems in the theory of cracks]. Kiev, Nauk. dumka, 1982, 345 p.

7. Ovchinnikov I.G. Model' deformirovaniya i razrusheniya konstruktivnyh elementov, podvergayushchihsiya vysokotemperaturnoj vodorodnoj korrozii pri vsestoronnem davlenii vodoroda [Model of deformation and fracture of structural elements subject-

ed to high-temperature hydrogen corrosion under hydrostatic pressure]. Mezhvuzov. nauch. sb. Raschet elementov konstrukcij, vzaimodejstvuyushchih s agressivnymi sredami. Saratov.politekh. in-t, 1984, pp. 24-34.

8. Marichev, A.A. Svyaz' kriticheskoj koncentracii vodoroda i kriticheskogo koeficienta intensivnosti napryazhenij pri vodorodnom ohrupchivanii konstrukcionnyh materialov [The relationship between the critical concentration of hydrogen and the critical stress intensity factor in hydrogen embrittlement of structural materials]. Fiziko-himicheskaya mekhanika materialov, 1984, no. 3, pp. 6-14.

9. Ovchinnikov I.I. Deformirovanie i razrushenie materialov v vodorodosoderzhashchej srede, diffuzionnye harakteristiki kotoroj zavisyat ot napryazhennogo sostoyaniya [Deformation and destruction of materials in a hydrogen-containing medium, the diffusion characteristics of which depend on the stress state]. Internet-zhurnal "Naukovedenie", 2013, no. 1(14), 8 p.

10. Sofronis P., Lufano J. Hydrogen transport and large strain elastoplasticity near a notch in alloy X-750 [Tekst] / P. Sofronis. Engineering Fracture Mechanics, 1998, vol. 59, no. 6, pp. 827-845.

11. Ovchinnikov I.I., Ovchinnikov I.G. Vliyanie vodorodosoderzhashchej sredy pri vysokih temperaturah i davleniyah na povedenie metallov i konstrukcij iz nih [Influence of the hydrogen-



containing medium at high temperatures and pressures on the behavior of metals and structures of them]. *Internet-zhurnal «NAUKOVEDENIE»*, 2012, no. 14, (<https://naukovedenie.ru/PDF/60tvn412.pdf>) Provereno 20.09.2017.

12. Panasyuk V.V. O vazhnejshih zadachah issledovaniy po fiziko-himicheskoy mekhanike konstrukcionnyh materialov [On the most important problems of research on the physicochemical mechanics of structural materials]. *Fiz.-him. mekhanika materialov*, 1974, no. 4, pp. 75-80.

13. Morlett, J.G., Johnson H., Troiano A. R. A new concept of hydrogen embrittlement in steel. *Journal of Iron and Steel Institute*, 1958, vol.189, pp. 37.

14. Zapffe, C.A., Sims C.E. Hydrogen embrittlement, internal stress and defects in steel. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1941, vol. 145, pp. 225.

15. Shashkova L. V. O metodicheskom podhode k izucheniyu kinetiki vodorodnogo ohrupchivaniya staley [On the methodical approach to studying the kinetics of hydrogen embrittlement of steels]. *Mezhdunarodnyj nauchno-issledovatel'skij zhurnal*, 2012, part. 1, no. 5 (5), pp. 30-36.

16. Andrejkiv A.E. Mekhanika vodorodnogo ohrupchivaniya metallov i raschet elementov konstrukcij na prochnost' [Mechanics of hydrogen embrittlement of metals and calculation of structural elements for strength]. *L'vov, Preprint №133, Fiziko-mekhanicheskij institut im. G.V.Karpenko*, 1987, 50 p.

17. Cherdancev Yu.P., Chernov I.P., Tyurin Yu.I. Metody issledovaniya sistem metall-vodorod: uchebnoe posobie [Methods for studying metal-hydrogen systems: a tutorial]. *Tomsk, Izd-vo TPU*, 2008, 286 p.

18. Kulabuhova N.A., Poletaev G.M. Molekulyarno-dinamicheskoe issledovanie sorbcionnyh svoystv tochechnykh defektov po otnosheniyu kvodorodu v Pd i Ni [Molecular dynamic study of the sorption properties of point defects with respect to hydrogen in Pd and Ni]. *Himicheskaya fizika i mezoskopiya*, 2013, vol. 15, no. 2, pp. 225-229.

19. Shrejder A.V., Shparber I.S., Archakov Yu.I. Vliyanie vodoroda na neftyanoe i himicheskoe oborudovanie [The influence of hydrogen on petroleum and chemical equipment]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1976, 144 p.

20. Karpenko G.V., Kripyatkevich R.I. Vliyanie vodoroda na svoystva stali [The influence of hydrogen on the properties of steel]. *Moscow, Metallurgizdat*, 1962, 192 p.

21. Archakov Yu.I. Vodorodnaya korroziya stali [Hydrogen corrosion of steel]. *Moscow, Metallurgiya*, 1985, 192 p.

22. Lykov A.V. Teoriya teploprovodnosti [Theory of heat conductivity]. *Moscow, Vysshaya shkola*, 1967, 599 p.

23. Lykov A.V. Teplomassoobmen: (Spravochnik) [Heat and mass transfer: (Reference book)]. *Moscow, Energiya*, 1978, 48 p.

24. Krajnov A.Yu., Minkov L.L. Chislennyye metody resheniya zadach teplo i massoperenosa: ucheb. Posobie [Numerical methods for solving heat and mass transfer problems: Text-book. allowance]. *Tomsk, STT*, 2016, 92 p.

25. Sergeev N.N., Sergeev A.N., Kutepov S.N., Gvozdev A.E., Ageev E.V. Diffuziya vodoroda v svarnykh soedineniyakh konstrukcionnyh staley [Diffusion of hydrogen in welded joints of

structural steels]. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta*, 2017, no. 6 (75). pp. 85-95.

26. Zaika Yu.V., Rodchenkova N.I. Kraevaya zadacha vodorodopronicaemosti membran gazorazdeleniya [The boundary-value problem of hydrogen permeability of gas separation membranes]. *Trudy Karelskogo nauchnogo centra Rossijskoj akademii nauk*, 2015, no. 10, pp. 54-68.

27. Stavrovskij M.E., Sidorov M.I., Emelyanov S.G., Poserenin C.P. Issledovanie ekspluatacionnogo navodorozhivaniya materialov detalej [Investigation of operating hydrogenation of materials of parts]. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta*, 2016, no. 2 (65), pp. 59-65.

28. Fomin V.G. Modelirovanie dvuhsvyaznoj plastinki, nahodyashejsya v pole temperatur pod vozdeystviem agressivnoj sredy [Simulation of a doubly connected plate located in a temperature field under the influence of an aggressive medium]. *Matematicheskie metody v tehnikе i tehnologiyah*, 2016. № 2 (84). S. 83-84.

29. Shevchenko Yu.N., Prohorenko I.V. Metody rascheta obolochek: V 5 t. T.3 Teoriya uprugoplasticheskikh obolochek pri neizotermicheskikh processah nagruzheniya [Methods for calculating shells: B 5 t. T.3 Theory of elastoplastic shells under nonisothermal loading processes]. *Kiev, Nauk. dumka*, 1981, 296 p.

30. Aramanovich I.G., Levin V.I. Uravneniya matematicheskoy fiziki [Equations of mathematical physics]. *Moscow, Nauka*, 1969, 288 p.

31. Vorob'ev A.H. Diffuzionnye zadachi v himicheskoy kinetike. Uchebnoe posobie [Diffusion problems in chemical kinetics. Tutorial]. *Moscow, Izd-vo Mosk. un-ta*, 2003, 98 p.

32. Zenkevich O.K., Chang I. Metod konechnykh elementov v teorii sooruzhenij i mekhanike sploshnykh sred [The finite element method in the theory of structures and the mechanics of continuous media]. *Moscow, Nedra*, 1974, 240 p.

33. Vasilenko A. T., Emel'yanov I. G. Thermal stressed state of a box-shaped crucible. *Strength of Materials. March*, 2001, vol. 33, iss. 2, pp. 165-170.

34. Shevchenko Yu.N., Babeshko M.E., Piskun V.V. i dr. Reshenie osesimmetrichnoj zadachi termoplastichnosti dlya tonkostennykh i tolstostennykh tel vrashcheniya na ES EVM [Solution of the axisymmetric thermoplasticity problem for thin-walled and thick-walled bodies of revolution on the EC computer]. *Kiev, Nauk. dumka*, 1980, 196 p.

35. Gel'd, P.V., Ryabov R.A. Vodorod v metallah i splavah [Hydrogen in metals and alloys]. *Moscow, Metallurgiya*, 1974, 272 p.

36. Dubovoj V.Ya. Flokeny v stalyah: monografiya [Flocken in steels: monograph]. *Moscow, GNTIChCM*, 1950, 332 p.

37. Hismatulin E.R. Sosudy i truboprovody vysokogo davleniya: Spravochnik [Vessels and high pressure pipelines: Handbook]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1990, 384 p.

38. Emel'yanov I.G., Mironov V.I. Dolgovechnost' obolochechnykh konstrukcij [Durability of shell structures]. *Ekaterinburg, UrO RAN*, 2012, 217 p.

39. Veselov I., Emelyanov I., Fedotov V. Research of the tension of the shell working in hydrogen-containing environment. *Proceedings of the 13th World Hydrogen Energy Conference, Beijing, China, June 12-15, 2000*, pp. 1041-1045.