

Семинар

## **Вычислительная математика и приложения**

под руководством акад. РАН Е.Е. Тыртышникова, чл.-корр. РАН Ю.В.Василевского  
проф. В.И. Агошкова, А.Б.Богатырева и Ю.М.Нечепуренко

**12 февраля 15-00 комн. 727**

Илья Александрович Чернов (ИПМИ КНЦ РАН)

### **Математическое моделирование кинетики формирования и разложения гидридов металлов**

Доклад посвящен вопросам моделирования кинетики формирования и разложения гидридов металлов, представляющих интерес в качестве перспективного способа хранения экологически чистого водородного топлива. Представлены математические модели этих процессов в форме либо неклассических нелинейных диффузионных краевых задач с одной пространственной переменной и свободной границей, либо в форме нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Адекватность моделей подтверждена численными экспериментами и аппроксимацией серий экспериментальных кривых для ряда материалов. Для краевых задач предложены разностные схемы и доказаны теоремы существования решения и сходимости схем. Для обратной задачи оценки параметров модели по экспериментальным данным разработан метод точного вычисления градиента функционала в пространстве параметров на основе сопряженной задачи. Выделен и изучен класс трехмерных тел (форм частиц порошка материала), допускающих группу симметрий и переход к пространственно-одномерной постановке задач. Разработана библиотека программных компонент для построения численных моделей и оценки параметров по данным измерений.