

## МОДЕЛЮВАННЯ ТА ВІЗУАЛІЗАЦІЯ РОБОТИ СЕНСОРІВ ВИТОКУ ВОДНЮ

Любименко О. М., Маслова Н. О., Штепа О.А.

*Дослідження було спрямоване на розробку математичної моделі, яка описує зміну концентрації водню в пластині паладію під час насичення воднем. Для досягнення цієї мети було використано метод скінченних різниць для числового розв'язання одновимірних рівнянь водневої пружності, що враховують просторово-часові зміни концентрації водню та пружні напруження у металі. Модель була реалізована за допомогою мови програмування Python із використанням графічного інтерфейсу на базі Tkinter. Результати моделювання візуалізувалися у вигляді графіків, які демонструють динаміку зміни концентрації водню, напружень, зміщень і деформацій у пластині. Наукова новизна роботи полягає у створенні стабільних програмних модулів, адаптивних до різних типів користувачів і умов витоку водню. Практична значимість результатів полягає в можливості застосування отриманих даних для детального вивчення процесу дифузії водню та розробки нових технологій і матеріалів з покращеними властивостями.*

**Ключові слова:** математична модель, алгоритм, водень, паладій, сенсор, інтерфейс.

**Вступ.** Сенсори для виявлення та ідентифікації газів відіграють ключову роль у різних наукових і технічних галузях [1]. Також важливими є різні методи моделювання сенсорів, які допомагають зрозуміти їх ефективність і практичну користь. Комплексна візуалізація фізичної та математичної моделі регулювання водневої проникності металів, яка враховує внутрішні напруження, дозволяє точно обґрунтувати рівняння дифузійної кінетики, які важко розв'язати явно. Параметри переносу водню залежать від технологічних особливостей виготовлення конкретної партії металу та методів обробки його поверхні, що обмежує використання загальних "табличних даних". Хоча грубі оцінки параметрів з похибкою в кілька порядків зазвичай відомі, необхідний алгоритм для уточнення цих значень на основі експериментальних даних для конкретних матеріалів.

**Аналіз останніх досліджень та публікацій.** Існують методи моделювання сенсорів витоку водню [2], засновані на хімічних реакціях і фізичних процесах, які включають різні підходи для забезпечення точності та надійності. Нижче наведені основні методи моделювання таких сенсорів.

Аналогове моделювання включає створення фізичних моделей, які відтворюють принципи роботи сенсора на основі аналогових схем та використовується для

відтворення базових характеристик сенсора, таких як чутливість, лінійність, стабільність.

Математичне моделювання поведінки сенсора з використанням програмного забезпечення включає симуляцію різних умов експлуатації, таких як температура, тиск, наявність та вплив інших газів.

Фізичне моделювання засноване на фізичних законах, що зумовлюють поведінку водню та його взаємодію з матеріалами сенсора за допомогою диференціальних рівнянь для опису процесів адсорбції, дифузії та реакцій водню з сенсором.

Емпіричне моделювання на основі регресійного аналізу та статистичних методів використовують для визначення залежностей між концентрацією водню і вихідним сигналом сенсора при створенні моделей сенсорів.

Моделювання на основі машинного навчання для аналізу великих наборів даних та створення моделей сенсорів допомагає виявити складні залежності та оптимізувати параметри сенсора.

Мультифізичне моделювання включає моделювання кількох фізичних явищ одночасно, таких як термічні, електричні та механічні ефекти і допомагає зрозуміти комплексну поведінку сенсора у різних умовах експлуатації.

Моделювання з використанням комерційного програмного забезпечення, такого як COMSOL Multiphysics, ANSYS

тощо використовуються для створення точних моделей сенсорів та забезпечує можливість проводити чисельні експерименти та оптимізувати конструкцію сенсора.

Ці методи моделювання широко застосовуються в процесі проектування та розробки сенсорів для уловлювання водню, що є критично важливими для безпеки та ефективності в різних галузях промисловості, пов'язаними із використанням водню [3].

При розробці та моделюванні мікроелектромеханічних систем (MEMS) [4, 5] для інерційних сенсорів увага зосереджується на ключових аспектах розробки MEMS-сенсорів, включаючи матеріали, процеси виготовлення, моделювання їх динамічної поведінки та інтерфейси для їх дослідження, що підкреслює важливість інтеграції нових матеріалів у розробку сенсорних систем.

Дослідження технології на основі п'єзоелектричних матеріалів [6-8] відкриває нові можливості для створення автономних сенсорних систем. Особливу увагу приділено інтерфейсам для збору та обробки даних із сенсорів, що є критично важливим для забезпечення комунікації між сенсорами та іншими компонентами системи, які сприяють підвищенню безпеки та ефективності транспортних засобів.

Використання наноструктурованих матеріалів дозволяє створювати сенсори з покращеними характеристиками, такими як чутливість і гнучкість [9].

Моделювання сенсорів, особливо при обробці великої кількості даних, може вимагати значних обчислювальних ресурсів, що може бути проблематичним для деяких користувачів або застосувань. Програми для моделювання можуть демонструвати некоректну поведінку при обробці екстремально малих або великих значень, що може обмежувати їх застосування в певних умовах, тому інтеграція нових матеріалів і технологій в існуючі системи може бути складною і вимагати значних витрат часу та ресурсів. Ефективність сенсорів може залежати від зовнішніх умов, таких як температура, вологість та інші фактори, що можуть впливати на точність вимірювань і стабільність роботи сенсорних систем [7-9].

Отже, для дослідження впливу водню на сенсор в датчику, пропонується метод, що базується на чисельному підході для аналізу зміни концентрації, властивостей пружних тіл

та їх реакції на зовнішні сили. В якості модельного матеріалу розглянемо паладій, який в промисловості для підвищення чутливості наносять на основу сенсору у формі наночастинок.

**Мета.** Розробити математичну модель, яка описує зміну форми пластини сенсору та концентрацію водню в пластині паладію під час контакту з газоподібним воднем.

#### **Матеріали та методи.**

Для дослідження використовували математичну модель процесу дифузії водню в металевому кантилевері. Модель базується на рівнянні дифузії Фіка, яке описує розподіл концентрації водню в пластині як функцію часу та просторових координат [10]:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w B_c c \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial t} \right) = 0, \quad (1)$$

де  $c$  – концентрація водню;  $\lambda$ ,  $\mu$  – відповідно перший та другий коефіцієнти пружності Ламе;  $u$  – проекція вектору переміщення на вісь  $x$ ;  $t$  – час;  $D$  – коефіцієнт дифузії водню;  $w$  – коефіцієнт лінійного розширення матеріалу під дією водню;  $B_c$  – критична концентрація для водневої крихкості.

Під час одностороннього насичення кантилеверу товщиною  $h$  з паладію зі стороною  $l$  в ньому виникають водневі напруження, та він піддається з одного боку (з боку насичення воднем)  $l(0)$  розтягненню, а з іншого  $l(h)$  – стисканню (рис. 1).

Кантилевер закріплюють з одного кінця ( $z=0$ ) консольно, а один бік пластини  $l(h)$  покрито непроникним для водню дуже тонким шаром міді.

$$\frac{dc}{dx}|_{x=h} = 0 \quad (2)$$

У такому зразку концентрація водню  $c=c(x)$ , очевидно, неоднорідна і залежить від координати ( $x$ ) за товщиною кантилеверу. Через неоднорідне подовження окремих шарів консолі в ній виникають пружні деформації  $\varepsilon(x)$  і напруження  $\sigma(x)$ , які і призводять до вигину кантилеверу [11].

Результати експериментів показують [11], що справедлива емпірична формула для зв'язку видовження вільного (незакріпленого) паладієвого кантилеверу з концентрацією водню в ній:

$$\varepsilon_c = \alpha_c = 0,068c, \quad 0 \leq c \leq 1, \quad (3)$$

де  $c$  – концентрація водню на вхідній поверхні кантилеверу ( $x=0$ ) змінюється швидко, але не миттєво [11]:

$$c(0, t) = c_0(1 - e^{-at}) \quad (4)$$

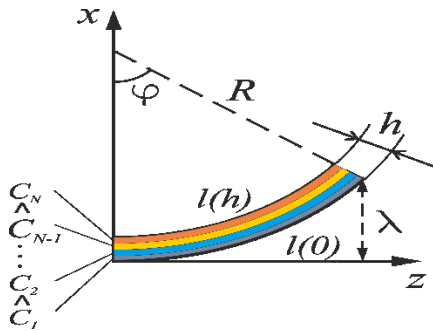


Рис. 1 – Кантилевер з паладію, який насичується воднем з одного боку

Для їх розрахунку подумки розділимо кантилевер на  $N$  шарів, які розташовано один на одному уздовж товщини кантилеверу осі ( $x$ ) (див. рис.1). Тоді, при умові відсутності ковзання шарів один по одному, приходимо до висновку, що для кожних двох суміжних шарів повинно виконуватися співвідношення:

$$\alpha c_m + \varepsilon_m = \alpha c_{m+1} + \varepsilon_{m+1}, \quad (5)$$

де  $\varepsilon_m$  – деформація (відносне подовження)  $m$ -го шару, що відповідає за вигин пластини.

Звідси випливає, що при безперервній зміні концентрації

$$\frac{d\varepsilon(x)}{dx} = -\alpha \frac{dc(x)}{dx}, \quad (6)$$

тобто пропорційні один одному не механічні деформації та концентрації, а їх градієнти. Як наслідок, маємо:

$$\varepsilon(x) = -\alpha [c(x) - c_m], \quad (7)$$

Таким чином, в кантилевері виникають внутрішні напруження та він зазнає пружної деформації. Це варто враховувати в математичній моделі при розподілі концентрації по перетину пластини.

Внутрішні напруги, спричинені дифузиею водню, врівноважуються в поперечному перерізі пластини під час згину. Отже, сумарний згинальний момент має дорівнювати нулю. На початковому етапі водень у пластинах відсутній, тому деформацій, викликаних воднем, теж немає.

$$c(x, 0) = 0, \quad u(x, 0) = 0 \quad \text{для } 0 \leq x \leq h \quad (8)$$

Обмежимося зміною пружних напружень уздовж одного напрямку (умовно уздовж осі  $x$ ) і будемо використовувати одновимірний варіант рівняння водневої пружності:

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

Введемо додаткові величини, спростивши рівняння (1) та (9), та проведемо заміни:  $G = \frac{1}{D}$ ,  $Q = G(3\lambda + 2\mu)w$ ,  $Y = QB_c$ ,  $S = \lambda + 2\mu$ .

Для створення алгоритму та програмної реалізації будемо використовувати скінченорізницеви метод, в якому зміщення і концентрація в наступний момент часу є невідомими величинами.

Цей метод передбачає поділ області визначення диференціального рівняння на скінченну сітку та проведення апроксимації, із заміною диференціальних рівнянь різницеви. Для проведення розрахунку необхідно кантилевер розбити на  $N$  тонких пластин (вузлів) з нумерацією від  $m=0$  до  $m=N$  та товщиною  $\Delta h$  уздовж його початкової товщини ( $h$ ). Далі розв'язок знаходили для кожної пластини кантилеверу окремо.

Відповідно рівняння (1) та (8) можна представити як :

$$\left(\frac{1}{\Delta h}\right)^2 (c_{m+1}^2 - 2c_m^p + c_{m-1}^p) + \left(\frac{G}{\Delta t}\right) (c_m^{p+1} - c_m^p) + \left(\frac{H}{2\Delta h \Delta t}\right) c_m^p (u_{m+1}^{p+1} - u_{m-1}^{p+1} + u_{m-1}^p) = 0, \quad (10)$$

$$\frac{S}{(\Delta h)^2} (u_{m+1}^{p+1} - 2u_m^{p+1} + u_{m-1}^{p+1}) + \left(\frac{Q}{2\Delta h}\right) (c_{m+1}^{p+1} - c_{m-1}^{p+1}) = 0, \quad (11)$$

де  $\Delta t$  – крок за часом:  $\Delta t = T/p$ ;  $p$  – індекс, який використовується для представлення моменту часу;  $m$  – номер вузла перерізу пластини, від  $m=0$ , до  $m=N$ ).

Для  $m = 0$  і  $m = N$  слід записати граничні умови, а для  $p = 0$  початкові умови. Визначимо їх із наступних міркувань.

Можна припустити, що межа кантилеверу, через яку вводиться газоподібний водень, насичена воднем до максимально можливого рівня концентрації  $c_0$ . Ця концентрація залишається постійною завдяки надходженню водню ззовні у будь-який момент  $p$ , тому

$$c_0^{p+1} = c_0^p = c_0. \quad (12)$$

А відповідно до рівнянь (2) та (4) концентрація змінюється:

$$c_1^{p+1} = c_0(1 - e^{-a(p+1)\Delta t}) \quad (13)$$

$$c_N^{p+1} - c_{N-1}^{p+1} = 0 \quad (14)$$

$$c_m^0 = 0, \quad u_m^0 = 0, \text{ где } m = \overline{1, N} \quad (15)$$

Враховуючи умови, наведені в рівняннях (12)-(15), можна розв'язати алгебраїчні рівняння (1)-(9) та отримати залежність зміни концентрації, напружень в пластині під час контакту водню з матеріалом, що дозволить зімітувати процес впливу водню на сенсор.

Рівняння (10-11) при кожному фіксованому  $p$ ,  $m$  представляють собою тридіагональну систему щодо  $u^{m,p+1}$  та  $c^{m,p+1}$ .

Позначимо через  $\varepsilon^{m,p}$  величину похибки методу

$$\varepsilon^{m,p} = u(x_m, t_p) - u^{m,p},$$

$$m = 0, \dots, N, \quad p = 0, \dots, T.$$

Припустимо, що метод сходиться, якщо  $\varepsilon^{m,p} \rightarrow 0$  для всіх  $m = 0, \dots, N$  та  $p = 0, \dots, T$ . Будемо говорити, що метод сходиться з порядком  $h^p + \Delta^q$ , якщо знайдеться така константа  $C$ , для якої виконується рівність  $|\varepsilon^{m,p}| \leq C(h^p + \Delta^q)$  для всіх  $m = 0, \dots, N$  та  $p = 0, \dots, T$ .

#### Результати та їх обговорення.

Для моделювання процесу розподілу водню в металевій пластині з часом було створено скрипт на мові Python. Модель враховує комбінований вплив дифузії та механічного напруження. Через графічний інтерфейс на основі Tkinter задаються основні змінні, такі як:

- коефіцієнт дифузії ( $D$ );
- швидкість ( $v$ );
- модуль пружності ( $E$ );
- критична концентрація для водневої крихкості ( $B_c$ );
- початкова концентрація водню ( $c_0$ );
- кінетичний параметр для поверхневого поглинання ( $a$ );
- кількість вузлів у просторі ( $N$ );
- кількість кроків часу ( $T$ );
- розмір просторового кроку ( $\Delta h$ );
- розмір кроку часу ( $\Delta t$ ).

Після введення параметрів та їх валідації скрипт запускає процес моделювання з покроковими розрахунками

концентрації водню, зміщення та напруження в кожному вузлі вздовж кантилеверу (рис. 2)

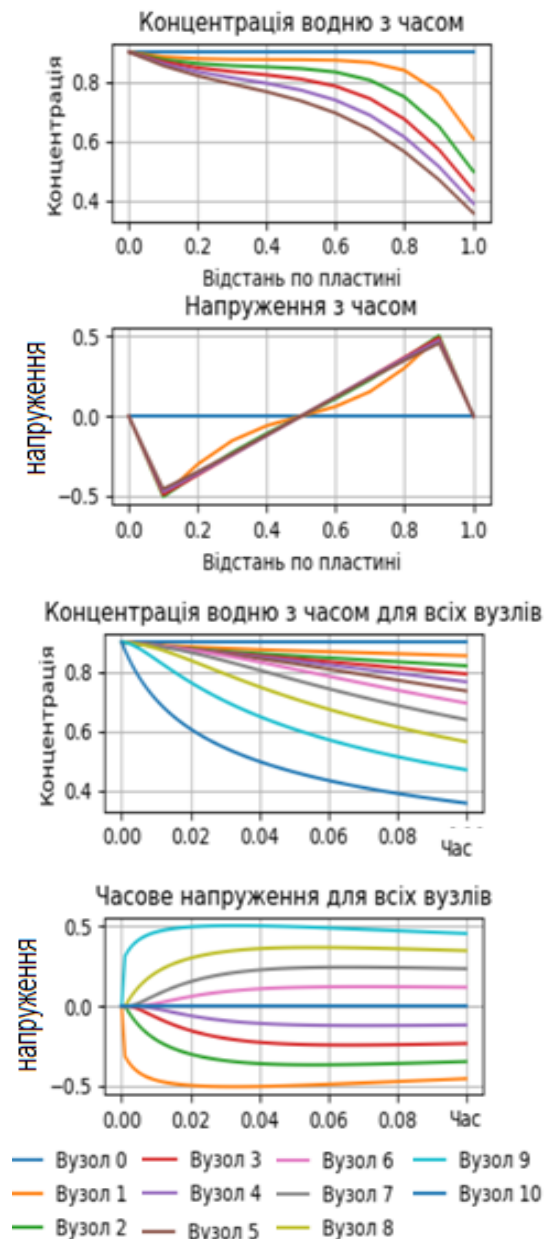


Рис. 2 – Відображення результатів математичного моделювання для розподілу концентрації та напружень по вузлах кантилеверу

Після завершення процесу моделювання скрипт генерує набір з восьми графіків, розташованих у сітці 4x2, що відображають зміну концентрації водню, напруження, зміщення і деформації в кантилевері з часом (рис. 2 та рис. 3). Ці графіки важливі для аналізу динаміки процесу взаємодії металу з воднем.

Отримані результати використовуються для обчислення деформацій та напружень, які коригуються з урахуванням моменту згину на краях пластини, що залежить від концентрації водню (рис.3).

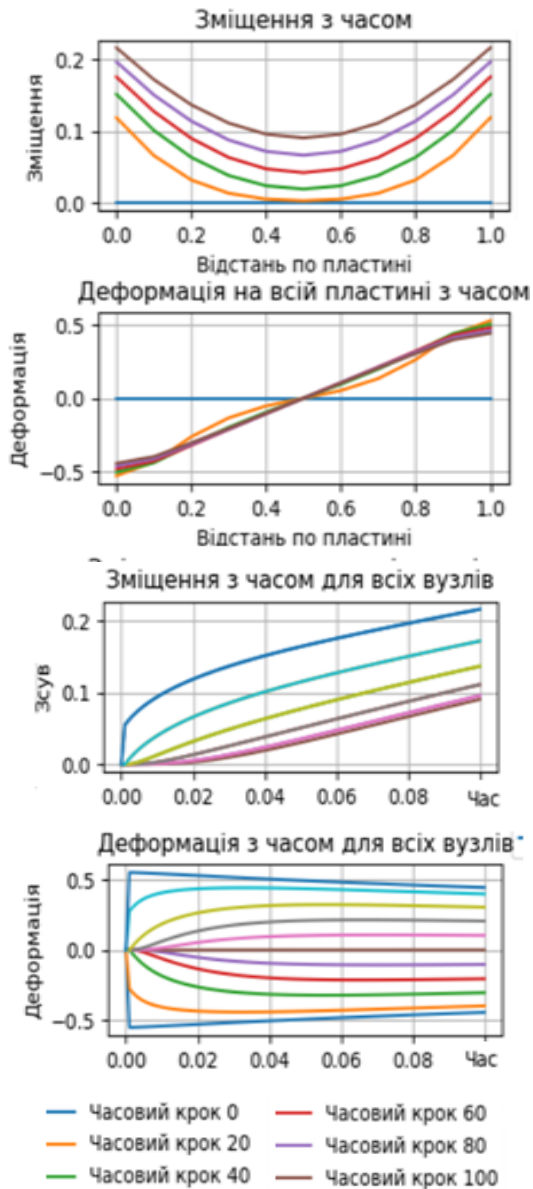


Рис. 3 – Відображення результатів математичного моделювання деформацій та зсуву по вузлам пластини зі зміною часу

В роботі за допомогою математичної моделі отримано графічне представлення математичних залежностей фізичних процесів, а саме:

1. концентрація водню вглиб пластини в різні моменти часу;
2. концентрація водню в усіх вузлах за часом;

3. розподіл напруженості у пластині в різні моменти часу;
4. напруження у всіх вузлах з часом;
5. розподіл зміщень вздовж пластини в різні моменти часу;
6. зміщення у всіх вузлах з часом;
7. розподіл деформацій вздовж пластини в різні моменти часу;
8. деформація у всіх вузлах з часом.

Для реалізації математичної моделі було використано наступні операції.

Імпорт необхідних бібліотек:

- import numpy as np для числових операцій та масивів;
- import matplotlib.pyplot as plt для побудови графіків;
- import tkinter as tk для створення графічного інтерфейсу користувача;
- from matplotlib.backends.backend\_tkagg import FigureCanvasTkAgg для вбудовування графіків matplotlib у Tkinter;
- from matplotlib.backends.backend\_pdf import PdfPages для збереження графіків у форматі PDF;
- import datetime для роботи з датою та часом;
- import pandas as pd для роботи з даними у форматі таблиць.

Оголошення та визначення функцій:

- check\_values – функція для перевірки правильності значень змінних;
- read\_input – функція для отримання введених користувачем значень з полів вводу;
- plot\_all – функція для побудови графіків та обробки даних;
- main\_menu – головна функція для створення графічного інтерфейсу та виклику інших функцій.

Виклик функції main\_menu(), яка створює вікно програми та відображає графічний інтерфейс.

Користувач заповнює відповідні поля вводу з потрібними значеннями.

Натискання кнопки "Update" викликає функцію submit(), яка отримує значення з полів вводу за допомогою функції read\_input(). Ці значення передаються за допомогою функції plot\_all(), яка обробляє дані та будує графіки на основі отриманих значень.

Зображені графіки зберігаються у файл формату PDF з використанням об'єкта PdfPages.

Створений графічний інтерфейс користувача (GUI) було розроблено з використанням бібліотеки Tkinter, за допомогою об'єкта FigureCanvasTkAgg, що є стандартною бібліотекою Python для створення графічних інтерфейсів. Інтерфейс було розроблено таким чином, щоб забезпечити зручність використання та ефективність обчислень.

Головне вікно програми поділено на дві частини: ліву, де розташовані поля для введення даних (рис. 4), та праву, де відображаються графіки (рис. 2 та рис. 3). Закриття вікна програми завершує її роботу.

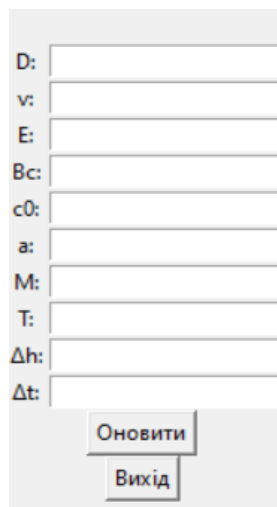
The image shows a vertical list of input fields on the left side of a GUI. Each field is preceded by a label: 'D:', 'v:', 'E:', 'Bc:', 'c0:', 'a:', 'M:', 'T:', 'Δh:', and 'Δt:'. Below these fields are two buttons: 'Оновити' (Update) and 'Вихід' (Exit).

Рис. 4 – Створений графічний інтерфейс користувача (ліва частина)

В роботі ми зосередилися на створенні математичної моделі, яка описує зміну концентрації водню в паладієвому кантілевері з часом під час його насичення воднем. Ця модель базується на одновимірних рівняннях водневої пружності, що враховують просторово-часові зміни концентрації водню та пружних напружень у металі.

Для числового розв'язання цих рівнянь ми використали метод скінченних різниць, який апроксимує диференціальні рівняння різницевидами. Кантілевер було представлено у вигляді скінченної кількості  $N$  тонких пластин, для кожної з яких обчислювалися зміни концентрації водню.

Крайові умови були вибрані таким чином, щоб відображати різні можливі сценарії: з одного боку могла відбуватися постійна подача водню, а з іншого боку – або відсутність водню, або змінне насичення воднем.

Для розв'язання системи лінійних рівнянь був застосований метод Гауса. Однак, для обробки великої кількості рівнянь цей метод може потребувати значних обчислювальних ресурсів.

Після отримання числового розв'язання результати були візуалізовані. На графіках було показано, як змінюється концентрація водню в пластині з часом. Ці візуалізації не тільки представляють результати дослідження, але й допомагають краще зрозуміти процес та досліджувати його з допомогою моделі.

Розроблені програмні модулі відзначаються високою стабільністю і можуть адаптуватися до різних вимог користувачів. Отримані результати можуть бути використані для детального вивчення процесу дифузії і проникнення водню в реальних умовах, що відкриває нові можливості для наукових досліджень і промислового застосування.

**Висновки.** В рамках цього дослідження реалізовано математичну модель у формі розроблених програмних модулів, що дозволяють моделювати роботу сенсору витоку водню.

Зосереджено увагу на адаптивності інтерфейсу для різних типів користувачів та різних умов витоку водню, враховуючи при цьому різні формати екранів і пристроїв. Даний підхід сприяє зручності та забезпечує більшу доступність нашої програми. Під час розробки було використано такі методики, як структуроване та об'єктно-орієнтоване програмування, а для перевірки роботи модулів застосовувались методи ручного тестування.

Ретельне тестування проведено з метою виявлення та усунення можливих проблем, а також для забезпечення високої продуктивності та ефективності програми.

Певні зусилля були спрямовані на забезпечення того, щоб програма працювала безбійно та надійно, незалежно від того, який об'єм даних необхідно обробити. Під час процесу тестування були виявлені два значні випадки. По-перше, програма демонструє некоректну поведінку при обробці екстремально малих (менше 0.0001) та екстремально великих (більше 10000) значень. По-друге, програма може вийти з ладу, коли кількість оброблюваних даних перевищує певний розмір (результат множення двох змінних  $T$  і  $M$  перевищує 100000).

Виходячи з цих висновків, актуальним напрямком подальшої роботи буде розробка стратегії виправлення виявлених проблем. Зокрема, варто розглянути введення діапазону допустимих вхідних значень, оптимізацію обробки великих обсягів даних, або застосування спеціалізованих методів обробки великих масивів даних, у тому числі паралельних та розподілених алгоритмів.

Подальші дослідження в цій області можуть бути спрямовані на уточнення математичної моделі, включаючи врахування

додаткових фізичних процесів, таких як термічні впливи, механічні напруження або хімічні реакції.

Вивчення фізико-хімічних процесів, які відбуваються при взаємодії паладію з воднем, не тільки допоможе зрозуміти основні механізми цих взаємодій, але і сприятиме розробці нових технологій та матеріалів з покращеними техніко-економічними властивостями.

### Література

- [1] Wilson and M. Baietto, "Applications and Advances in Electronic-Nose Technologies," *Sensors*, vol. 9, 2009. DOI: 10.3390/s90705099.
- [2] R. A. Potyrailo and C. Surman, "Optical sensors for detection of chemicals and biomolecules," *Analytical Chemistry*, vol. 84, no. 2, pp. 200–220, 2012.
- [3] J. M. Gómez, "Advances in MEMS-Based Inertial Sensors: Design, Modeling, and Applications," *Sensors*, vol. 16, no. 8, pp. 46–72, 2016.
- [4] A. Karkkainen and J. Kostamovaara, "Modeling and Simulation of Position-Sensitive Detector Arrays for Time-of-Flight Ranging," *IEEE Sensors Journal*, vol. 12, no. 1, pp. 78–98, 2012.
- [5] X. Liu, "A Comprehensive Review on Piezoelectric Energy Harvesting Technology: Materials, Mechanisms, and Applications," *Applied Energy*, vol. 197, pp. 60–84, 2017.
- [6] L. Soleymani, "Biosensors and Bioelectronics: Nanostructured Materials and Devices for the Detection of Biomolecules," *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 89, no. 1, pp. 34–56, 2017.
- [7] G. Huang, "Wireless Sensor Networks: Principles, Design and Applications," *IEEE Communications Surveys & Tutorials*, vol. 16, no. 1, pp. 80–100, 2014.
- [8] Z. Zhang, "Sensor Technologies and Data Requirements for ITS," *IEEE Intelligent Transportation Systems Magazine*, vol. 4, no. 3, pp. 114–138, 2012.
- [9] H. Cui, "Flexible Electronics: Materials and Applications," *Advanced Materials*, vol. 29, no. 20, 1703237, 2017.
- [10] G. Alefeld and S. Völkl, *Hydrogen in Metals 1*. Berlin: Springer Verlag, 1978, 321 p.
- [11] M. V. Gol'tsova, G. N. Tolmacheva, G. I. Zhironov, and E. N. Lyubimenko, "Metallofiz. i noveyskiye tekhnologii," vol. 37, no. 8, p. 1135, 2015.

### References

- [1] Wilson and M. Baietto, "Applications and Advances in Electronic-Nose Technologies," *Sensors*, vol. 9, 2009. DOI: 10.3390/s90705099.
- [2] R. A. Potyrailo and C. Surman, "Optical sensors for detection of chemicals and biomolecules," *Analytical Chemistry*, vol. 84, no. 2, pp. 200–220, 2012.
- [3] J. M. Gómez, "Advances in MEMS-Based Inertial Sensors: Design, Modeling, and Applications," *Sensors*, vol. 16, no. 8, pp. 46–72, 2016.
- [4] A. Karkkainen and J. Kostamovaara, "Modeling and Simulation of Position-Sensitive Detector Arrays for Time-of-Flight Ranging," *IEEE Sensors Journal*, vol. 12, no. 1, pp. 78–98, 2012.
- [5] X. Liu, "A Comprehensive Review on Piezoelectric Energy Harvesting Technology: Materials, Mechanisms, and Applications," *Applied Energy*, vol. 197, pp. 60–84, 2017.
- [6] L. Soleymani, "Biosensors and Bioelectronics: Nanostructured Materials and Devices for the Detection of Biomolecules," *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 89, no. 1, pp. 34–56, 2017.
- [7] G. Huang, "Wireless Sensor Networks: Principles, Design and Applications," *IEEE Communications Surveys & Tutorials*, vol. 16, no. 1, pp. 80–100, 2014.
- [8] Z. Zhang, "Sensor Technologies and Data Requirements for ITS," *IEEE Intelligent Transportation Systems Magazine*, vol. 4, no. 3, pp. 114–138, 2012.

- [9] H. Cui, "Flexible Electronics: Materials and Applications," *Advanced Materials*, vol. 29, no. 20, 1703237, 2017.
- [10] G. Alefeld and S. Völkl, *Hydrogen in Metals 1*. Berlin: Springer Verlag, 1978, 321 p.
- [11] M. V. Gol'tsova, G. N. Tolmacheva, G. I. Zhironov, and E. N. Lyubimenko, "Metallofiz. i noveyshiye tekhnologii," vol. 37, no. 8, p. 1135, 2015.

*Надійшла до редакції 25.05.2024 р.*

**Любименко Олена Миколаївна** – кандидат фізико-математичних наук, доцент, Донецький національний технічний університет (пл. Шибанкова, 2, м. Покровськ, 85300, Україна).

E-mail: olena.liubymenko@donntu.edu.ua

**Маслова Наталія Олександрівна** – кандидат технічних наук, доцент, Донецький національний технічний університет (пл. Шибанкова, 2, м. Покровськ, 85300, Україна).

E-mail: nataliia.maslova@donntu.edu.ua

**Штепа Олександр Анатолійович** – кандидат технічних наук, доцент, Донецький національний технічний університет (пл. Шибанкова, 2, м. Покровськ, 85300, Україна).

E-mail: oleksandr.shtepa@donntu.edu.ua

### **SIMULATION AND VISUALIZATION OF THE OPERATION OF HYDROGEN LEAK SENSORS**

*The investigation was aimed at developing a mathematical model that describes the change in the concentration of water in the palladium plate with time and time of water saturation. To achieve the metal's value, the method of cross-sectional differences was used to numerically resolve the one-dimensional levels of water pressure to account for space-hour changes in the concentration of water and spring stress in the metal. The model was implemented using additional Python programming using a graphical interface based on Tkinter. The results of the modeling were visualized in the form of graphs that demonstrate the dynamics of changes in water concentration, stress, displacement and deformation at the plate. The scientific novelty of the robot lies in the creation of stable software modules that are adaptable to different types of scientists and minds in the current world. The practical significance of the results lies in the possibility of consolidating the abstraction of data for a detailed study of the process of water diffusion and the development of new technologies and materials with reduced power.*

**Key words:** *mathematical model, algorithm, water, paladium, sensor, interface.*

**Liubymenko Olena Mykolaivna** - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Donetsk National Technical University (Shybankova Square, 2, Pokrovsk, 85300, Ukraine).

E-mail: olena.liubymenko@donntu.edu.ua

**Maslova Nataliya Oleksandrivna** - candidate of technical sciences, associate professor, Donetsk National Technical University (Shybankova Square, 2, Pokrovsk, 85300, Ukraine).

E-mail: nataliia.maslova@donntu.edu.ua

**Stepa Oleksandr Anatoliiovych** - candidate of technical sciences, associate professor, Donetsk National Technical University (Shybankova Square, 2, Pokrovsk, 85300, Ukraine).

E-mail: oleksandr.shtepa@donntu.edu.ua