

Е. К. Костикова, Ю. В. Заика

Оценка параметров модели термодесорбции водорода

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-01-00439).

Рассматривается дегазация пластины, предварительно насыщенной водородом. Эксперимент проводится методом термодесорбционной спектроскопии (ТДС). В соответствующей краевой задаче с нелинейными граничными условиями учтены основные физико-химические процессы: диффузия и десорбция. Представлены методика оценки параметров модели по результатам измерений и результаты численного моделирования.

Ключевые слова: водородопроницаемость, нелинейные краевые задачи, параметрическая идентификация.

E. K. Kostikova, Ju. V. Zaika

Estimation of Parameters of the Hydrogen Thermodesorption Model

Degasification of the plate preliminary sated with hydrogen is considered. The experiment is done with the method of thermal desorption spectrometry (TDS). In a corresponding regional problem with nonlinear boundary conditions the basic physical and chemical processes are taken into account: diffusion and desorption. Is represented the technique of estimating the parameters of the model by results of measuring and results of numerical modeling.

Keywords: hydrogen penetrability, nonlinear regional problems, parametrical identification.

Постановка задачи

Водород рассматривается как один из перспективных экологически чистых энергоносителей. Кроме того, безопасность систем транспортировки и переработки углеводородного сырья во многом определяется уровнем защиты конструкционных материалов от водородной коррозии. Метод термодесорбционной спектроскопии (ТДС) является одним из основных при исследовании взаимодействия водорода с твердым телом [2, 3, 5]. Пластина толщины ℓ из металла или сплава, нагретая до температуры $T = \bar{T}$, находится в камере с газообразным водородом под давлением \bar{P} . После насыщения растворенным атомарным водородом образец быстро охлаждается (отключается ток нагрева), камера вакуумируется, и в условиях медленного нагрева с помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток. По этой информации судят о характеристиках взаимодействия водорода с исследуемым материалом.

Рассмотрим симметричную нелинейную краевую задачу ТДС-дегазации:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(T) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad t \in (0, t_*), \quad c(0, x) = \varphi(x) = \varphi(\ell - x), \quad x \in [0, \ell], \quad (1)$$

$$D(T)c_x(t, 0) = b(T)c_0^2(t), \quad D(T)c_x(t, \ell) = -b(T)c_2^2(t), \quad t \in [0, t_*]. \quad (2)$$

Здесь $c(t, x)$ – концентрация атомарного водорода (H), растворенного в пластине, $c_0(t) = c(t, 0)$, $c_2(t) = c(t, \ell)$, $c_0(t) = c_2(t)$; t_* – время дегазации; D , b – коэффициенты диффузии и десорбции; $J(t) = b(T)c_0^2(t)$ – плотность десорбционного потока (торцами пластины пренебрегаем). Квадратичность десорбции связана с тем, что водород диффундирует в металле в атомарном состоянии, а покидает поверхность (при $x = 0$ и $x = \ell$) в молекулярной форме. Коэффициенты диффузии и десорбции (эффективной рекомбинации) зависят от температуры T . Как правило, в «рабочем диапазоне»

выполняется закон Аррениуса:

$$D(T) = D_0 \exp\left\{-\frac{E_D}{[RT]}\right\}, \quad b(T) = b_0 \exp\left\{-\frac{E_b}{[RT]}\right\}, \quad D_0, E_D, b_0, E_b,$$

$R = \text{const}$ (E_D , E_b – энергии активации, $R = 8.31441$ Дж/[моль·К] – универсальная газовая по

постоянная). Нагрев обычно линейный: $T(t) = T_0 + vt$, $v > 0$. Сокращенно обозначаем $D(t) = D(T(t))$, $b(t) = b(T(t))$.

Что касается начальных данных $\varphi(x)$, то в силу непродолжительности подготовительного этапа (охлаждение и вакуумирование) обычно считают начальное распределение равномерным: $\varphi(x) = \bar{c} = \text{const}$. Здесь $\bar{c} = \bar{c}(p, \bar{T})$ – равновесная концентрация. Несогласованность начальных и граничных условий при этом непринципиальна, поскольку будем использовать лишь интегральные соотношения (решение задачи (1)–(2) понимается как обобщенное). Для тонких мембран следует учесть «начальный прогиб» концентрации по краям. Ограничимся параболической аппроксимацией

$$\varphi(x) = \bar{c} - A_0 [x - \ell_0]^2, \quad \ell_0 = \frac{\ell}{2}, \quad A_0 > 0.$$

Цель работы состоит в составлении вычислительного алгоритма для определения по плотности потока термодесорбции $J(t)$, $t \in [0, t_*]$ ($J(t) \approx 0$, $t \geq t_*$), параметров b_0 , E_b , D_0 , E_D , характеризующих водородопроницаемость конструкционного материала.

Трудности решения обратных задач хорошо известны [9, 10]. В частности, разработаны градиентные алгоритмы минимизации в пространстве параметров среднеквадратичной невязки экспериментальных и модельных кривых [1]. Но на каждой итерации в общем случае приходится численно решать краевые задачи при текущих приближениях параметров. К тому же, как правило, сходимость лишь локальная. Учет специфики метода термодесорбции позволил разработать алгоритм идентификации, в котором основная вычислительная нагрузка связана с использованием квадратурных формул, а не решением краевых задач.

Для тестирования алгоритма решения обратной задачи сначала численно генерировались модельные кривые, порождающие параметры которых затем «забывались». Из-за большого разброса порядков величин при численном моделировании $J(t)$ проводилось масштабирование: $x = \ell z$, $z \in [0, 1]$,

$$u = \frac{c}{\bar{c}}, \quad u_t = D u_{zz}, \quad D u_z|_{0,1} = \pm b u_{0,1}^2, \quad D = \frac{D_0}{\ell^2}, \quad b = \frac{b_0 \bar{c}}{\ell}, \quad u(0, z) = 1 - A_0 (z - 0.5)^2, \quad A_0 = \frac{A_0 \ell^2}{\bar{c}}.$$

Здесь за преобразованными параметрами модели оставляем прежние обозначения D , b , A_0 . Для определенности авторы ориентировались на данные по вольфраму, являющемуся одним из конструкционных материалов в реакторах [8]: $\bar{c} = 5.084 \times 10^{16}$ 1/см³ ($\bar{T} = 1300$ К), $T_0 = 300$ К, $\dot{T} = 2$ К/с, $t_* = 500$ с, $\ell = 0.1$ см, $b_0 = 6 \times 10^{-12}$ см⁴/с; $E_b = 39.559$ кДж/моль, $D_0 = 4.1 \times 10^{-3}$ см²/с; $E_D = 37,629$ кДж/моль.

Параболическое приближение

Сходимость в нелинейных обратных задачах параметрической идентификации, как правило, локальная. В рассматриваемом ТДС-эксперименте $\ell = 1$ мм известен «куполообразный» характер распределения $c(t, x)$. Поэтому целесообразно в качественном плане за первое приближение взять параболическую аппроксимацию

$$c(t, x) \approx \bar{c}(t, x) = B(t) - A(t)(x - \ell_0)^2, \quad 2\ell_0 = \ell, \quad A(0) = A_0, \quad B(0) = \bar{c}.$$

Считаем известной равновесную растворимость $\bar{c} = \bar{c}(p, \bar{T}) \sim \sqrt{p}$, она определяется давлением молекулярного водорода, температурой насыщения и пропорциональна корню из давления. Симметрия выполнена; функция $B(t) > 0$ аппроксимирует срединную концентрацию $\bar{c}(t, \ell_0)$, $A(t) > 0$, $t > 0$. Поскольку к моменту окончания эксперимента t_* произошла практически полная дезгазация образца ($c(t, x) \approx 0$, $t \geq t_*$), определим константу A_0 в начальных данных $\varphi(x) = \bar{c} - A_0 [x - \ell_0]^2$ из материального баланса

$$A_0 = \frac{3(\bar{c}\ell_0 - S_*)}{\ell_0^2}$$

Отсюда Известная по итогам эксперимента величина S_* равна половине количества десорбировавшегося водорода (в атомах), отнесенного к см² поверхности ($x = 0$ или $x = \ell$

не важно в силу симметрии). Кроме того, условия согласования $Dc_x|_{0,\ell} = \pm bc_{0,\ell}^2$ при $t = 0$ начальных данных и граничных условий дает зависимость $\frac{D_0}{b_0} = f_0(E_b - E_D)$:

$$D(0)A_0\ell = b(0)[c - A_0\ell_0^2]^2 \Rightarrow \frac{D_0}{b_0}A_0\ell = \exp\left\{\frac{E_D - E_b}{RT_0}\right\}[c - A_0\ell_0^2]^2. \quad (4)$$

Перейдем к конкретизации функций $A(t)$, $B(t)$ в квадратичной аппроксимации $z(t, x)$. Из условия материального баланса выразим $B(t) > 0$ и подставим в $z(t, x)$:

$$\int_0^{\ell_0} \varphi(x) dx - S(t) = \int_0^{\ell_0} z(t, x) dx, \quad S(t) = \int_0^t J(\tau) d\tau \Rightarrow$$

$$\bar{c}\ell_0 - \frac{A_0\ell_0^3}{3} - S(t) = B(t)\ell_0 - \frac{A(t)\ell_0^3}{3}, \quad B(t) = \frac{A(t)\ell_0^2}{3} + \bar{c} - \frac{A_0\ell_0^2}{3} - \frac{S(t)}{\ell_0},$$

$$\Rightarrow z(t, x) = \frac{Q(t)}{\ell} - A(t)\left[x^2 - \ell x + \frac{\ell^2}{6}\right], \quad Q(t) = 2 \int_0^{\ell_0} J(\tau) d\tau.$$

Чтобы найти оставшийся функциональный параметр $A(t)$, подставим полученное выражение для $z(t, x)$ в граничное условие $D(T)c_x(t, 0) = b(T)c_0^2(t)$. Это соотношение позволяет выразить функцию $A(t) > 0$ через коэффициенты модели D , b и известную по экспериментальным данным информацию $Q(t)$. Оба корня квадратного уравнения относительно $A(t)$ положительные, выбираем меньший из них (по физическому смыслу $c_0(t) \geq 0$). Из условия $\sqrt{J} = c_0 \sqrt{b}$ ($J = bc_0(0, \ell)^2$) получаем соотношение для оценки D_0 , E_D , b_0 , E_b :

$$\sqrt{\frac{J(t)}{b(T)}} = \frac{3D(T)}{\ell b(T)} \left[\sqrt{1 + \frac{Q(t)2b(T)}{3D(T)}} - 1 \right], \quad (5)$$

$T = T(t)$, $t \in [0, t_1]$. Поскольку плотность десорбции $J(t)$ соответствует исходной модели (1)–(2), а на предварительном этапе оценки b , D используется параболическое приближение концентрации N в объеме, то это равенство является приближенным.

График $J(t)$ имеет характер всплеска с последующим затуханием, причем на начальном и конечном этапах измерения менее точны. Поэтому ограничимся $t \in [t_1, t_2] \subset (0, t_1)$, нормируем уравнение

на $I_{\max} = \sqrt{J_{\max} \square} \left(I(t) = \sqrt{J(t)} \right)$ и выделим безразмерные переменные:

$$I(t) I_{1, \max}^{-1}(-1) = (\sqrt{1 + 2Q(t) t_1^{-1}(-1)} / I_{1, \max}^{-1}(-1) X - 1) Y, \quad X \equiv (t_1 \cdot J_{\max} b(T)) / 3D(T), \quad Y \equiv 3D(T) / (I_{1, \max} \ell \sqrt{b(T)}). \quad (6)$$

Формально допуская значения $E < 0$, удобно считать новые переменные $X(t) = X(T(t))$, $Y(t) = Y(T(t))$ «аррениусовскими»:

$$X_0 = \frac{t_1 J_{\max} b_0}{3D_0}, \quad Y_0 = \frac{3D_0}{I_{\max} \ell \sqrt{b_0}}, \quad E_X = E_b - E_D, \quad E_Y = E_D - \frac{E_b}{2}.$$

Тогда, обозначая $q = 2Q t_1^{-1}(-1) / I_{1, \max}^{-1}(-1)$, получаем уравнение

$$f(t; X, 0, E_X, Y, 0, E_Y) \equiv I(t) I_{1, \max}^{-1}(-1) - (\sqrt{1 + q(t)X} - 1)Y = 0, \quad t \in [t_1, t_2]. \quad (7)$$

Заметим, что параметры A_0 , \bar{c} входят в соотношение лишь неявно посредством $J(t)$.

Преобразуем величину Y с учетом связи $\frac{D_0}{b_0} = f_0(E_X)$ (см. (4)):

$$Y = Y_0 \exp\left\{-\frac{E_Y}{[RT(t)]}\right\} = Z_0 \exp\left\{-\frac{E_X}{[RT_0]}\right\} \exp\left\{-\frac{E_Y}{[RT(t)]}\right\}.$$

$$Z_0 = \frac{3 [\bar{c} - A_0 \rho_0^2]^2 \sqrt{b_0}}{A_0 \rho_0^2 I_{\max} \square}, \quad Z_0 = Z_0(b_0) \leftarrow b_0. \quad (8)$$

Величина $I_{\max} \square$ зависит от всех входных данных (ρ, D, b) . Запись $Z_1 0 = Z_1 0 (b_1 0)$ показывает, что значения \bar{c}, A_0 уже найдены, а $I(t)$ при решении обратной задачи воспринимается как заданная фиксированная функция времени. Аналогично представим X :

$$X = X_0 \exp\left\{-\frac{E_X}{RT(t)}\right\} = \frac{t \cdot J_{\max} A_0 \rho}{3 [\bar{c} - A_0 \rho_0^2]^2} \exp\left\{\frac{E_X}{RT_0}\right\} \exp\left\{-\frac{E_X}{RT(t)}\right\}.$$

Подставляя выражения X, Y в уравнение (7), получаем зависимость $f = f(t; Z_0, E_X, E_Y)$. Далее с учетом зашумленности реальных измерений и погрешности параболической аппроксимации целесообразно следовать методу наименьших квадратов (МНК):

$$F(Z_0, E_X, E_Y) = \int_{t_1}^{t_2} f^2(t) dt \rightarrow \min.$$

При необходимости производные функции F по указанным аргументам можно выписать явно (подсчет интеграла по квадратурной формуле считаем элементарной операцией). Задача оптимизации решается стандартными средствами (авторы использовали пакет Scilab) в физически оправданном диапазоне параметров (в пределах нескольких порядков).

Перейдем к изложению результатов численного моделирования. Разностная схема решения задач термодесорбции изложена в [4], здесь на этом не останавливаемся. График плотности потока водорода для параметров, указанных выше, представлен на рис. 1, 2.

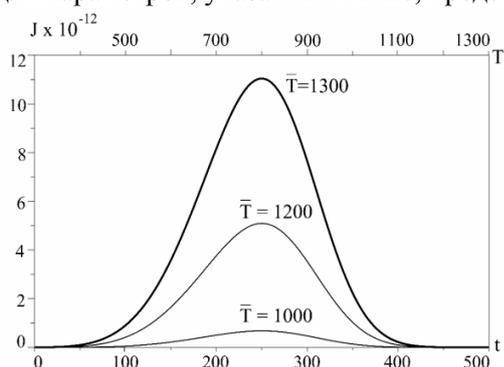


Рис. 1. Плотность термодесорбции. Влияние температуры насыщения

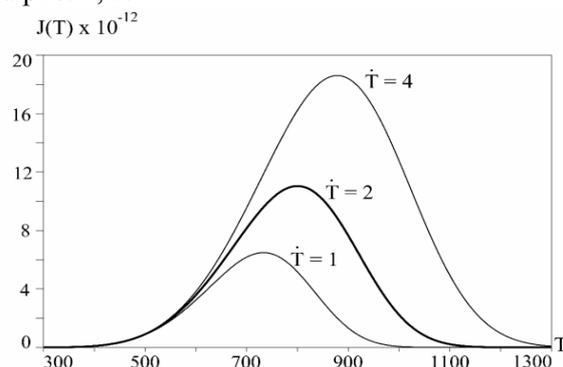


Рис. 2. ТДС-спектр. Влияние скорости нагрева

Для оценки значений предэкспонент и энергий активации диффузии и десорбции $(D_1 0, E_1 D, b_1 0, E_1 b)$ использовались метод наименьших квадратов (МНК) и метод моментов (ММ) применительно к уравнению (7) ($f = 0$), в которое подставлены выражения X, Y согласно формулам (6),

$$D(T) = D_0 \exp\left\{-\frac{E_D}{[RT]}\right\}, \quad b(T) = b_0 \exp\left\{-\frac{E_b}{[RT]}\right\}, \quad T(t) = T_0 + vt$$

и выражение $D_0 = D_0(b_0, E_D, E_b)$ из соотношения (4). На рис. 3, 4 показано, что задача $\|f\|_{L_2} \rightarrow \min \square$ () хорошо обусловлена по каждому из коэффициентов D, b (один из них фиксировался равным «истинному»). При этом дополнительное соотношение (4) не учитывалось при построении поверхности на рис. 4, но для рис. 3 оно оказалось необходимым, иначе отсутствует экстремум в физически оправданном диапазоне.

Более подробно остановимся на уравнении $f(t; Z_0, E_X, E_Y) = 0$, полученном после подстановки в (7) выражений X, Y, D_0 в соответствии с формулами (4), (6). «Истинные» значения параметров: $Z_0^* = 0.119$, $E_X^* = 1.929$, $E_Y^* = 17.849$. На рис. 5, 7, 9 варьируем лишь один из параметров

Z_0, E_X, E_Y . Решение задачи $\|f\|_{L_2} \rightarrow \min$ по Z_0 (см. рис. 5) дает относительную погрешность $\delta(Z_0) = |Z - 0. - \frac{Z_0^1}{Z_0^0}| = 0.52$. Это приводит в соответствии с формулой (8) к $\delta(b_0) = 0.77$ и $\delta(D_0) = 0.17$ в силу (4). Постоянство E_X, E_Y означает постоянство E_D, E_b .

Обратимся к методу моментов. Обозначим

$$M_i = M_i(Z_0, E_X, E_Y) = \int_{t_1}^{t_2} \Psi_i(t) f(t; Z_0, E_X, E_Y) dt.$$

Ограничимся функциями

$$\Psi_1(t) = \frac{t}{t_1}, \Psi_2(t) = \frac{t^2}{t_1^2}, \Psi_3(t) = \frac{10^{-1} t_1}{t}, \quad t \in [t_1, t_2], t_1 = 50$$

$t_2 = 450$ ($t_1 = 500$). Эксперименты показали, что использование метода моментов дает точность в среднем такую же, как и метод наименьших квадратов (см. рис. 6, 8, 10). Результаты применения параболического приближения позволили решить обратную задачу для исходной распределенной модели с погрешностями, указанными в таблице 1. Подчеркнем, что параболическое приближение является грубым для краевой задачи (1)–(2). Его цель – «попасть в порядки» оцениваемых коэффициентов D, b . Значения предэкспоненты b_0 определяется заметно хуже, что объясняется его малым абсолютным значением (коэффициент при квадрате концентрации). Можно было бы перейти к двойной точности вычислений на всех этапах моделирования, но это излишне при зашумленных входных данных обратной задачи.

Таблица 1

Оценки параболического приближения

Параметр	Исходные данные	Полученные значения	Относительная погрешность
b_0	6×10^{-12}	1.514×10^{-11}	152.3%
$E_b \#$	39.559	45.100	19.8%
D_0	4.1×10^{-3}	2.880×10^{-3}	29.7%
E_D	37.629	36.745	7.1%

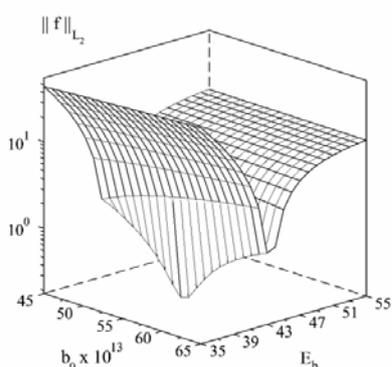


Рис. 3. Экстремум по b .

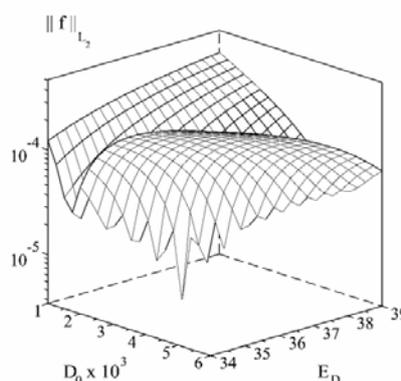


Рис. 4. Экстремум по D .

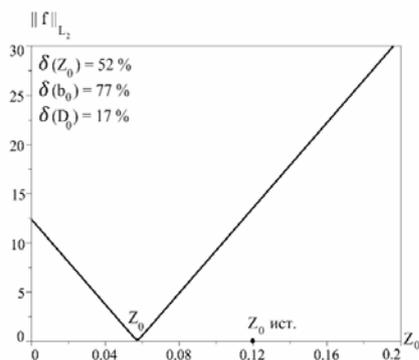


Рис. 5. МНК. Поиск Z_0

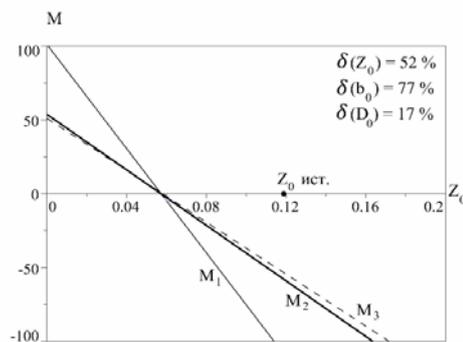


Рис. 6. ММ. Поиск Z_0

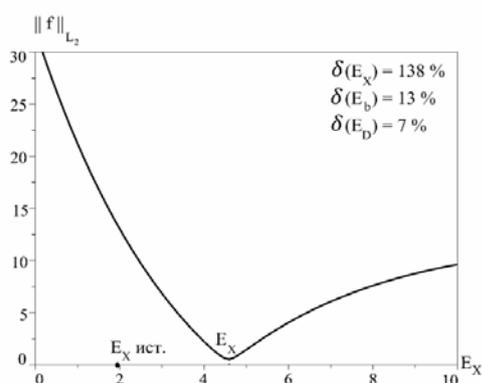


Рис. 7. МНК. Поиск E_X

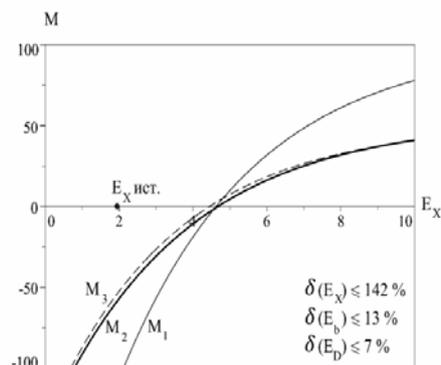


Рис. 8. ММ. Поиск E_X

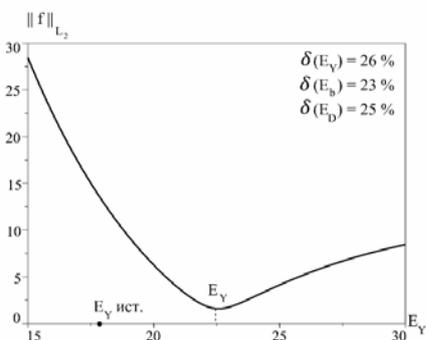


Рис. 9. МНК. Поиск E_Y

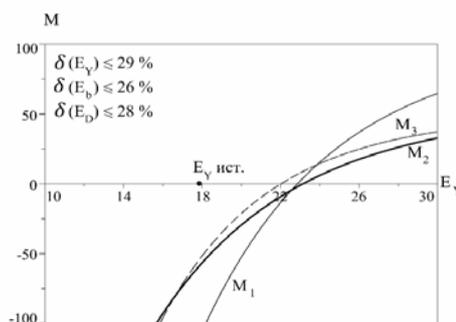


Рис. 10. ММ. Поиск E_Y

Начальные приближения энергий активации E_D , E_b в диапазоне нескольких десятков кДж/моль можно указать для конкретного материала из физико-химических соображений. Приближение $b_0(Z_0)$

берем в силу $f(0) = b_0(T_0) c_{0,2}^2(0) = b_0 \exp\left\{-\frac{E_b}{RT_0}\right\} [\bar{c} - A_0 f_0^2]^2$. Именно как приближение, в ТДС-эксперименте $f(0)$ известно с большой погрешностью.

Задача несколько усложняется, когда равновесную концентрацию \bar{c} также приходится считать неизвестной. Тогда задача четырехмерная в соответствии с (7). По оценкам X_0 , E_X , Y_0 , E_Y значения \bar{c} , A_0 находятся из уравнений (3), (4). Далее переходим к локальному уточнению оценок D_0 , E_D , b_0 , E_b в соответствии с исходной моделью (1)–(2), при этом учитываем, что искомым независимых переменных 3 в силу

$$\frac{D_0}{b_0} = f_0(E_b - E_D)$$

Сопряженные уравнения

Для уточнения оценок D , b необходимо иметь в распоряжении семейство уравнений, связывающих параметры с экспериментальной информацией. Укажем один из возможных подходов, основанный на общей идее использования сопряженных уравнений [7].

Интегрированием по частям для достаточно гладкой функции $\psi(t, x)$ получим:

$$+ \int_0^{\tau} D(t) \sqrt{J(t)b^{-1}(t)} \psi_x(t, 0) dt - \int_0^{\tau} D(t) \sqrt{J(t)b^{-1}(t)} \psi_x(t, \ell) dt - \\ - \bar{c} \int_0^{\ell} \psi(0, x) dx + A_0 \int_0^{\ell} (x - \ell_0)^2 \psi(0, x) dx. \quad (10)$$

Здесь опущен двойной интеграл, поскольку в дальнейшем изложении считаем функцию $\psi(t, x)$

подчиненной сопряженному уравнению $\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{D \partial^2 \psi}{\partial x^2}$. Кроме того, пренебрегаем интегралом от $\psi(t, x)c(t, x)$ по x с учетом $c(t, x) \approx 0$. Косвенно ограничиваемся не слишком быстро растущими по t функциями $\psi(t, x)$. Подчеркнем, что краевые условия не ставятся, «пробных» функций ψ бесконечно много. Простые варианты $\psi = 1, x$ приводят к уравнению материального баланса, которое уже использовалось для оценки константы A_0 . Выберем, например, $\psi(t, x) = \beta(t) \exp \sigma x$. При нормировке $\beta(t_0) = 1$ получаем

$$\psi(t, x) = \exp\{\sigma^2 \gamma(t, \tau)\} \exp\{\sigma x\}, \quad \gamma(t, \tau) = \int_t^{\tau} D(s) ds.$$

Перепишем соотношение (10) в обозначениях

$$X \equiv \int_0^{\tau} J \beta dt, \quad Y \equiv \int_0^{\tau} D \sqrt{J b^{-1}} \beta dt, \quad \kappa \equiv \frac{\exp \sigma \ell + 1}{\exp \sigma \ell - 1}; \\ F(\sigma) = \kappa \sigma X + \sigma^2 Y + \frac{\beta(0)}{\sigma^2} \left\{ 2A_0 - \sigma^2 \left(\bar{c} - A_0 \left[\ell_0^2 - \frac{\ell \kappa}{\sigma} \right] \right) \right\} = 0. \quad (11)$$

Получаем семейство уравнений. Параметр σ целесообразно варьировать в пределах $\sigma \ell \sim 1$. В таблице 2 приведены значения параметров, полученные решением системы уравнений (11) для $\sigma = 8, 9, 10, 11$. Энергии активации восстанавливаются с большой точностью (их влияние на кинетику дегазации очень велико). Предэкспонента b_0 определяется хуже в силу ее малого абсолютного значения.

Таблица 2

Применение сопряженных уравнений

Параметр	Исходные данные	Полученные значения	Относительная погрешность
b_0	6×10^{-12}	5.468×10^{-12}	8.7%
E_b	39.559	39.559	0%
D_0	4.1×10^{-3}	4.104×10^{-3}	1.7%
E_D	37.629	37.629	0%

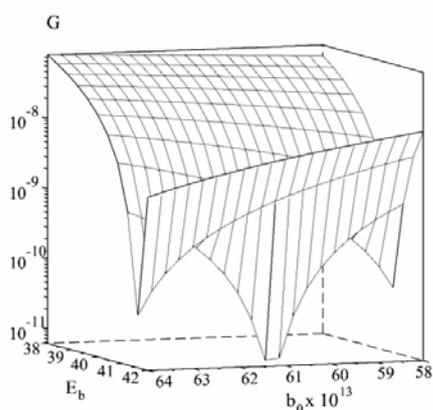


Рис. 11 Экстремум $G(b)$

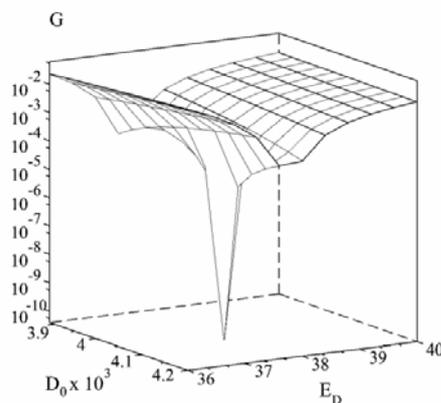


Рис. 12. Экстремум $G(D)$

На рисунках 11, 12 представлены поверхности $G = F^2(9) + F^2(11)$, при фиксированном $D = D^*$ или $b = b^*$ соответственно. Из рис. 11 видно, что для коэффициента b важно найти хорошее начальное приближение. На рисунках 13–16 кривым 1, 2, 3 соответствуют $\sigma = 8, 9, 10$, указано максимальное значение относительной погрешности при выбранных σ . Один параметр варьируем, остальные подставляем «истинные». Видно, что уравнение $F = 0$ хорошо обусловлено по каждому из параметров модели. Более «удачным» является $\sigma = 9$.

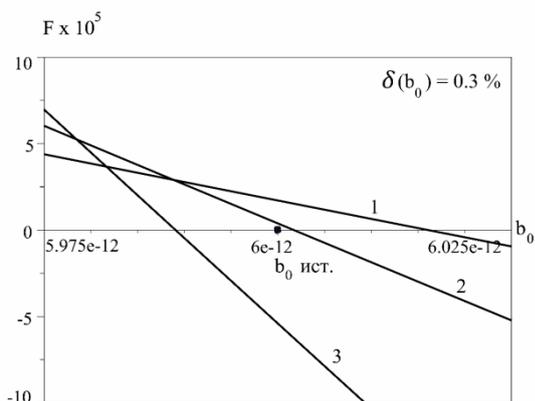


Рис. 13. Вариация b_0

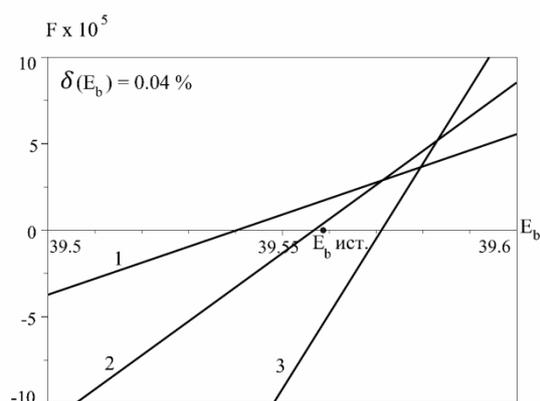


Рис. 14. Вариация E_b

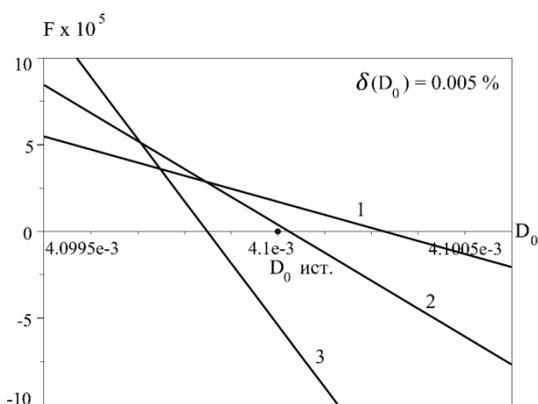


Рис. 15. Вариация D_0

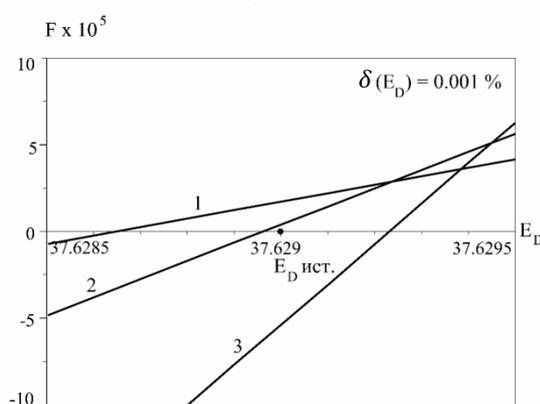


Рис. 16. Вариация E_D

Таким образом, последовательность представленных этапов параметрической идентификации позволяет восстановить параметры модели с относительной погрешностью, которая с запасом «поглощается» точностью ТДС-эксперимента. Входные данные $f(x)$ в уравнении стоят под знаком интеграла, что обеспечивает определенную помехоустойчивость. Если мембрану нельзя считать тонкой (это зависит от материала и условий эксперимента), следует использовать вариант $\varphi(x) = c - A_0 [x - x_0]^{2k}, k > 1$ (в середине пластины равновесная концентрация, и только у самого края концентрация немного меньше).

Библиографический список

1. Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В. Экстремальные методы решения некорректных задач [Текст] / О. М. Алифанов, Е. А. Артюхин, С. В. Румянцев. – М. : Наука, 1988. – 288 с.
2. Взаимодействие водорода с металлами [Текст] / под ред. А. П. Захаров. – М. : Наука, 1987. – С. 177–206.
3. Водород в металлах [Текст] : [пер. с англ.]. В 2 т. / под ред. Г. Алефельда, В. Фёлькия. – М. : Мир, 1981.
4. Заика, Ю. В., Костикова, Е. К. Разностная схема для краевой задачи ТДС-дегазации с динамическими граничными условиями [Текст] // Ученые записки ПетрГУ. Серия «Естественные и технические науки». – № 7 (101). – 2009. – С. 65–70.
5. Кунин, Л. Л., Головин, А. И., Суровой, Ю. И., Хохрин, В. М. Проблемы дегазации металлов [Текст] / Л. Л. Кунин, А. И. Головин, Ю. И. Суровой, В. М. Хохрин. – М. : Наука, 1972. – 324 с.
6. Мартинсон, Л. К., Малов, Ю. И. Дифференциальные уравнения математической физики [Текст] / Л. К. Мартинсон, Ю. И. Малов. – М. : МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2002. – 368 с.
7. Марчук, Г. И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем [Текст] / Г. И. Марчук. – М. : Наука, 1992. 336 с.
8. Писарев, А. А., Цветков, И. В., Маренков, Е. Д., Ярко, С. С. Проницаемость водорода через металлы [Текст] / А. А. Писарев, И. В. Цветков, Е. Д. Маренков, С. С. Ярко. – М. : МИФИ, 2008. – 144 с.
9. Самарский, А. А., Вабищевич, П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики [Текст] / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – М. : Едитоил, УРСС, 2004. – 480 с.