

Минобрнауки России
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Карельский научный центр Российской академии наук» (КарНЦ РАН)

На правах рукописи

Грудова Ксения Васильевна

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД
об основных результатах научно -
квалификационной работы на тему:
«Численное моделирование диффузионной
газопроницаемости водорода и диоксида
углерода»

Направление 09.06.01 «Информатика и вычислительная техника»

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., профессор
Заика Юрий Васильевич

Петрозаводск — 2024

Введение

Актуальность темы. Широкий спектр физических и технологических процессов, таких как процессы тепло-, массопереноса, газопроницаемости различных материалов и др., изучается в разделе математической физики. Возникающие в таком случае математические задачи имеют много общих элементов, но при этом, в силу особенностей физических процессов, имеют специфические черты и требуют разработку специальных численных методов для их решения.

В данной работе рассматриваются важные задачи, связанные с диффузионной газопроницаемостью, которые приводят к уравнениям с частными производными. Особое внимание уделяется численному моделированию диффузионной газопроницаемости водорода и диоксида углерода. Эти задачи имеют прямое отношение к проблеме антропогенного воздействия на биосферу и обладают важным значением на уровне государства (например, в феврале 2021 года Министерство науки и высшего образования Российской Федерации приказом №74 от 5 февраля запустило проект по созданию на территории регионов России карбоновых полигонов). Для прогнозирования снижения свойств гидридообразующих металлов и сплавов при использовании их в водородосодержащей среде основной задачей является определение предельной растворимости водорода в этих материалах. Проведение комплексного исследования этого параметра позволяет разрабатывать более эффективные методы контроля за состоянием материалов и предотвращения разрушений, вызванных действием водорода, что в свою очередь играет важную роль в обеспечении безопасности и надежности конструкций, изготовленных из этих материалов. Мониторинг изменения содержания углекислого газа в почве позволяет получить количественные данные о перемещении углерода и является важным для моделирования его глобального цикла. Исследования в данной области помогают лучше понять влияние климатических изменений и человеческой деятельности на окружающую среду. Таким образом, разработка математических моделей и методов численного моделирования для обеих задач представляет значительный интерес.

Степень разработанности темы. Исследования в области материаловедения представляют собой важную тему для множества ученых. Общие вопросы этой сферы обсуждаются в трудах таких отечественных и зарубежных ученых, как Ю.П. Черданцев, И.П. Чернов, А.А. Писарев, Г. Альфельд, Р. Коттс и других [3, 5, 21, 27, 38, 52, 54, 57, 61, 62]. Некоторые исследования [14, 49, 60, 64, 65, 67] посвящены частным задачам. Оригинальность первой главы состоит в использовании специально модифицированного метода водородопроницаемости.

В контексте проблемы исследования круговорота углерода в масштабе «атмосфера–растения–почва» важным является разработка комплексных моделей, способных охватить все основные процессы, происходящие в данной системе. Для достижения этой цели необходимо провести подробный обзор литературы, посвященной данной проблематике, а также проанализировать тенденции развития математического моделирования в этой области, которые представлены в [12, 29, 37, 43]. В настоящее время существует несколько подходов к моделированию круговорота углерода. Одним из наиболее распространенных является подход, основанный на использовании биохимических моделей, учитывающих фотосинтез, дыхание растений и микроорганизмов, а также процессы минерализации и гумификации в почве. Такие модели позволяют учитывать взаимодействие между атмосферой, растениями и почвой, а также динамику углерода в различных компонентах данной системы. Однако существующие модели имеют определенные недостатки, такие как упрощенное представление о процессах, происходящих в почве, или недостаточный учет временной и пространственной изменчивости параметров. Таким образом, разработка комплексных моделей, способных учитывать все основные процессы, происходящие в системе «атмосфера–растения–почва», представляет собой актуальную и перспективную задачу. Физическое обоснование математического описания газовой фазы почв рассмотрено в книгах [35, 42, 43, 59].

Исследования углеродного баланса в почвах играют важную роль в понимании глобальных процессов, связанных с изменением климата. Однако для полного понимания этого вопроса необходимо учитывать разнообразие почвенных типов и условий их функционирования. В данной работе мы обращаем внимание на математическое описание газовой фазы почв на местном уровне, а также на локальные исследования, позволяющие делать выводы о преобладающей эмиссии или доминирующем стоке углерода на конкретных территориях.

Важно также отметить, что проблема углеродного баланса затрагивает различные дисциплины, такие как почвоведение, экология, климатология и другие. Для полного понима-

ния этой проблемы необходимо комплексное и всестороннее рассмотрение, учитывающее разнообразие факторов, влияющих на углеродный обмен в почвах. Например, мелиорация почв может существенно изменить условия обмена газов между почвой и атмосферой, что приведет к изменению уровня эмиссии или стока углерода. Также таяние вечной мерзлоты является значимым для изучения углеродного баланса в арктических регионах.

Таким образом, всестороннее изучение углеродного баланса в почвах требует учета разнообразия условий и факторов, влияющих на этот процесс. В данной работе, во второй главе, мы будем исследовать процесс переноса CO_2 в лесных песчаных почвах.

Молекулярная диффузия CO_2 в почве является классическим процессом, обусловленным градиентом концентрации данного газа. Однако наличие конвективного движения также оказывает существенное влияние на перенос CO_2 . Конвекция - это важный физический процесс, определяющий передачу тепла или массы вещества в результате движения самого вещества. Скорость конвекции определяется различными факторами, включая скорость среды и концентрацию газа. Однако следует отметить, что конвекция включает в себя не только простое движение среды, но и другие важные процессы, такие как гравитационное воздействие (классический пример - циркуляция воздуха в атмосфере Земли), растворенное состояние CO_2 в почвенной влаге, а также процессы испарения влаги (изменение плотности среды за счет перехода жидкости в газообразное состояние), тепловые потоки от источников тепла и другие факторы. В литературе [35, Гл. V] и [40, с. 437] подробно описаны процессы переноса газов в почве, включая их классификацию и влияние на скорость конвекции и коэффициент диффузии. В рамках предложенной модели мы рассматриваем совокупности коэффициента диффузии и скорости конвективного переноса, учитывая средние значения по всему объему системы (данная модель – универсальна и может быть применена для анализа различных физических и химических процессов в различных системах). Источники почвенного углекислого газа являются основными компонентами биогеохимического цикла углерода. Они включают в себя дыхание корней растений, разложение органических веществ и деятельность микроорганизмов. Задача состоит в определении доли углекислого газа, достигающей поверхности и транспортируемой грунтовыми водами.

Целью данной научно-квалификационной работы является разработка комплекса математических моделей и численных методов для исследования кинетики взаимодействия изотопов водорода с конструкционными материалами и оценки динамики дыхания почвы, изменений направлений стока углекислого газа. Результаты работы позволят более глубоко понять физико-химические процессы и их влияние на окружающую среду.

Для достижения поставленной цели были сформулированы и решены следующие **задачи**:

- 1) провести анализ литературных источников в рамках изучаемой предметной области с целью ознакомления с существующими математическими моделями [15, 17];
- 2) автоматизировать процесс локализации начальных данных модели мембранного газоразделения [15] (система дифференциальных уравнений);
- 3) разработать помехоустойчивый алгоритм параметрической идентификации модели [15], провести исследования с учетом варьирования параметров и условий моделей термодесорбции и водородопроницаемости, позволяющие учесть влияние помех на процесс идентификации;
- 4) разработать программную реализацию алгоритма, предназначенную для генерации модельных кривых давления водорода на основе входных данных экспериментов проницаемости;
- 5) внести изменения в численный алгоритм задачи [17] в связи с переходом к безразмерному «времени», что позволит учесть различные характеристики времен диффузии в различных слоях гидрида и твердого раствора;
- 6) написать программу, моделирующую распределение концентрации растворенного атомарного водорода в слоях гидрида и сплава;
- 7) преобразовать математическую модель взаимодействия водорода со сплавом [18], перейдя к цилиндрической форме конструкционного материала;
- 8) построить математическую модель продуцирования и переноса углекислого газа, которая учитывает обе составляющие — диффузионную и конвективную (такой подход позволит более полно охарактеризовать процессы обмена углекислого газа между почвой, атмосферой и глубинными горизонтами, включая грунтовые воды);
- 9) построить модель суточных колебаний температуры корнеобитаемого слоя лесных песчаных почв;
- 10) разработать алгоритмы, позволяющие получать количественные оценки тепловых параметров, используя данные о базовых свойствах почвы;

- 11) разработать численные методы решения соответствующих краевых задач с нелинейными граничными условиями, способные учитывать динамику процессов на поверхности гидридных фаз и возможность фазовых переходов, а также учитывать динамику процессов переноса углекислого газа в почвенном горизонте;
- 12) провести цикл вычислительных экспериментов в целях валидации моделей и выявления лимитирующих факторов.

Научная новизна работы:

- 1) Предложен комплекс моделей взаимодействия водорода с конструкционными материалами, алгоритмов параметрической идентификации и численных методов решения соответствующих нелинейных краевых задач, позволяющий получать новые знания о механизмах и лимитирующих факторах взаимодействия изотопов водорода с материалами в нестационарных условиях по температуре и фазовому составу.
- 2) Предложена модель гидрирования цилиндрической оболочки из циркониевого сплава, а также разработан итерационный вычислительный алгоритм.
- 3) Предложена модель продуцирования и переноса углекислого газа, ориентированная на сравнительный и количественный анализ диффузионной и конвективной составляющих, с целью оценки динамики дыхания почвы и изменений направлений стока. Осуществлен переход к безразмерному виду модели. Разработан итерационный вычислительный алгоритм.
- 4) Предложена модель суточного колебания температурной волны лесных песчаных почв в случае неоднородной среды.

Практическая значимость. Прикладная значимость данной работы заключена в возможности прогнозировать движение фронта гидридообразования и моделировать различные схемы поведения материала при взаимодействии с водородом. Кроме того, полученные результаты второй главы позволят отслеживать и предсказывать динамику физико-химических процессов переноса углекислого газа в лесных песчаных почвах Восточной Финноскандии, которая исследуется в контексте решения задач экологической безопасности и анализа антропогенного воздействия на лесные почвы. Также, результаты работы дадут возможность значительно уменьшить расходы на дорогостоящие эксперименты и предварительно определить необходимые параметры в более сложном исследовании.

Методы исследования. В рамках научно-квалификационной работы был применен модифицированный метод водородопроницаемости. Для решения поставленных задач были использованы численные методы в классе нелинейных итерационных алгоритмов на основе явно-неявных разностных схем. Кроме того, были задействованы методы регрессионного анализа, включая метод наименьших квадратов, в целях более точного анализа полученных результатов.

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1) Алгоритм параметрической идентификации модели быстрой водородопроницаемости мембранного газоразделения.
- 2) Модифицированная математическая модель движения границы гидридообразования и разработанный вычислительный алгоритм.
- 3) Модель гидрирования цилиндрической оболочки из циркониевого сплава, итерационный вычислительный алгоритм.
- 4) Модель продуцирования и переноса углекислого газа, итерационный вычислительный алгоритм.
- 5) Модель суточного колебания температурной волны лесных песчаных почв для неоднородной среды.

Апробация работы.

Результаты работы представлялись на следующих конференциях:

- 1) Стендовый доклад «Численное моделирование динамики свободной границы фазового перехода «металл-гидрид»» на международной конференции «ФизикА.СПб» в ФТИ им. А.Ф. Иоффе (Санкт-Петербург, Россия, 23–25 октября 2018 г.).
- 2) Секционный доклад «Разностная схема решения краевой задачи водородопроницаемости циркониевого сплава с фазовым переходом» на 71-ой Всероссийской научной конференции обучающихся и молодых ученых с международным участием в Петрозаводском государственном университете (Петрозаводск, Карелия, Россия, 8–27 апреля 2019 г.).
- 3) Секционный доклад «Разностная схема краевой задачи переноса H_2 в лесных песчаных почвах» на 74-ой Всероссийской научной конференции обучающихся и молодых ученых с международным участием в Петрозаводском государственном университете (Петрозаводск, Карелия, Россия, 4–24 апреля 2022 г.).

- 4) Секционный доклад «Моделирование суточных колебаний температуры корнеобитаемого слоя лесных песчаных почв» на 75-ой Всероссийской научной конференции обучающихся и молодых ученых с международным участием в Петрозаводском государственном университете (Петрозаводск, Карелия, Россия, 3–23 апреля 2023 г.).
- 5) Секционный доклад «Моделирование суточных колебаний температуры корнеобитаемого слоя лесных песчаных почв» на 76-ой Всероссийской научной конференции обучающихся и молодых ученых с международным участием в Петрозаводском государственном университете (Петрозаводск, Карелия, Россия, 1–21 апреля 2024 г.).

Публикации.

Scopus и WoS:

- 1) Zaika Yu.V. Numerical modelling of free boundary dynamics in "metal-hydride" phase transition / Yu.V. Zaika, N.I. Rodchenkova, K.V. Grudova // Journal of Physics: Conference series. — 2018. Vol. 1135. doi: 10.1088/1742-6596/1135/1/012025. Scopus Q4, Web of Science

Публикации в материалах конференций, индексируемых в РИНЦ

- 2) Заика Ю.В. Численное моделирование динамики свободной границы фазового перехода "металл-гидрид" / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова, К. В. Грудова // Физика.СПб Тезисы докладов международной конференции. — Москва: Литео, 2018. — С. 60–61.— URL: <http://physica.spb.ru/data/uploads/physica2018theses.html>

Публикации в периодических изданиях, индексируемых в РИНЦ

- 3) Заика Ю.В. Численное моделирование динамики свободной границы гидридообразования / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова, К.В. Грудова // Труды Карельского научного центра РАН. 2018. №7. С. 14–24. DOI: 10.17076/mat843
- 4) Родченкова Н.И. Численное моделирование движения границы гидридообразования в оболочке из циркониевого сплава / Н.И. Родченкова, К.В. Грудова // Труды Карельского научного центра РАН. 2019. №7. С. 42–52. DOI: 10.17076/mat1094
- 5) Грудова К.В. Разностная схема краевой задачи переноса CO_2 в лесных песчаных почвах // Труды Карельского научного центра РАН. 2021. №6. С. 13–19. DOI: 10.17076/mat1454

- 6) Грудова К.В. Моделирование суточных колебаний температуры корнеобитаемого слоя лесных песчаных почв // Труды Карельского научного центра РАН. 2023. №4. С. 24–30. DOI: 10.17076/mat1775
- 7) Грудова К.В. Моделирование суточных колебаний температурных волн в лесных песчаных почвах // Труды Карельского научного центра РАН. 2024. (*в печати*)

Содержание главы 1

- 1) Представлен обзор модели быстрой водородопроницаемости сплавов для мембранного газоразделения.
- Заика, Ю. В. Краевая задача водородопроницаемости мембран газоразделения / Ю. В. Заика, Н. И. Родченкова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2015. №10. — С. 55–68.
- 2) Модель быстрой водородопроницаемости (ловушки насыщены и распределение концентрации водорода в объеме линейно):

$$\dot{p}_{0,\ell}(t) = \mp \beta_{0,\ell} [c_0(t) - c_\ell(t)], \quad \beta_{0,\ell} \equiv SD [\alpha V_{\text{in,out}} \ell]^{-1} T,$$

$$\mu s p_{0,\ell}(t) - b c_{0,\ell}^2(t) = \pm D \ell^{-1} [c_0(t) - c_\ell(t)], \quad t \geq t_0 > 0.$$

- Безразмерные переменные (для численного моделирования)

$$X_{0,\ell}(t) = 1 + 2\ell c_{0,\ell}(t) b D^{-1}, \quad a_{0,\ell}(t) = (2b\ell\Gamma D^{-1})^2 p_{0,\ell}(t) - 1.$$

- Исходная система компактно записывается в симметричном виде

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

- Переход к неполному уравнению четвертой степени:

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

- 3) Исходная краевая задача сведена к системе ОДУ в предположении квазистационарного режима (распределение концентрации в объеме линейно)

$$\dot{X}_0(t) = -sM_0[X_0 - X_\ell] \cdot \frac{X_\ell - V_{\text{in}}V_{\text{out}}^{-1}}{X_0X_\ell - 1}, \quad M_0 \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{in}}},$$

$$\dot{X}_\ell(t) = sM_\ell[X_0 - X_\ell] \cdot \frac{X_0 - V_{\text{in}}^{-1}V_{\text{out}}}{X_0X_\ell - 1}, \quad M_\ell \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{out}}}.$$

- 4) Автоматизирован поиск единственного корня уравнения четвертой степени, соответствующего физическим ограничениям.
- 5) Алгоритм параметрической идентификации модели:
- экспериментальные данные загружаются в пакет Scilab;
 - выделяется момент «квазистационарного» времени $t_0 > 0$;
 - задаются текущие приближения D , b , s ;
 - определяются начальные данные $X_0(t_0)$, $X_\ell(t_0)$;
 - система ОДУ интегрируется в пакете Scilab на отрезке $[t_0, t_*]$;
 - находятся концентрации, модельные зависимости $p_{0,\ell}(t)$ и сравниваются с экспериментальными данными;
 - коррекция значения параметров в зависимости от результата.
- 6) Разработана программа, которая на основе экспериментальных данных находит решение системы ОДУ и строит модельные кривые давлений.
- 7) Представлен обзор модели гидрирования пластины Zr–1Nb, состоящий из двух этапов: растворения водорода в сплаве и гидридообразования.
- а) Pushilina N. S., Kudiiarov V. N., Laptev R. S., Lider A. M., Teresov A. D.
 Microstructure changes in Zr–1Nb alloy after pulsed electron beam surface modification and hydrogenation Surface and Coatings Technology. 2015. Vol. 284.
 P. 63–68. doi:10.1016/j.surfcoat.2015.07.082.
- б) Заика, Ю.В. Краевая задача со свободной границей: гидрирование циркониевого сплава / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2016. №8. — С. 24–33.
- 8) Вычислительный алгоритм:
- I Этап:** неявная разностная схема для уравнения диффузии в $(L - \ell_0)$ -слое и неявный метод Эйлера для ОДУ ($\dot{i}(t)$). Для поиска численного решения используется алгоритм Томаса.
- II Этап. Проблемы:**
- построение сетки при движущейся границе;
 - различное время протекания физических процессов в гидриде и в сплаве.

Решения:

- Подвижные отрезки $[0, \ell(t)]$ и $[\ell(t), L]$ преобразуются в $[0, 1]$ и затем выбирается равномерная сетка. Выполняется замена $t = \frac{L^2}{\sqrt{DD_*}} t'$.
- Замена переменных с новым отсчетом времени ($t'_0 = 0$): $(t', x) \leftrightarrow (t', y)$, $x = \ell(t')y$, $\hat{v}(t', y) = v(t', x(t', y))$; $(t', x) \leftrightarrow (t', z)$, $x = \ell(t') + z[L - \ell(t')]$, $\hat{c}(t', z) = c(t', x(t', z))$, $\hat{c} := \hat{c}/\bar{u}$, $\hat{v} := \hat{v}/\bar{v}$.
- Вводится относительная скорость: $\lambda(t') \equiv \frac{\dot{\ell}(t')}{\ell(t')} = \frac{d}{dt'} \ln \ell(t')$.

Вычислительный алгоритм использует неявные разностные схемы и содержит многократные итерации, каждая из которых направлена на уточнение значения $\lambda(t')$ на последующем временном уровне.

9) Модификация модели гидрирования циркониевого сплава:

- Имеется цилиндр из циркониевого сплава (трубка ТВЕЛа).
- Внутренняя поверхность цилиндра – непроницаема.
- Предполагается равномерное распределение Н по высоте и углу поворота цилиндра.
- Водород поступает к внешней поверхности цилиндра.

10) Преобразование модифицированной модели.

- Выполняется замена времени: $t = (R - r_0)^2 D^{-1} t'$ и $t = \frac{(R-r_0)^2}{\sqrt{DD_*}} t'$ на I и II этапе.
- Дополнительно на II этапе вводится функция: $\lambda(t') \equiv \frac{\dot{\rho}(t')}{\rho(t')} = \frac{d}{dt'} \ln \rho(t')$.
- **Трудности:** построение сетки: начало координат находится в центре окружности, а направление движения потока частиц к центру.
- **Решения:** при переходе к безразмерному виду использовать следующие замены переменных: $r = \rho_0 + z[r_0 - \rho_0]$, $\hat{c}(t', z) = c(t(t'), r(z))$ на I этапе; $r = \rho(t') + y[R - \rho(t')]$, $v \rightarrow \hat{v}(t', y)$ и $r = r_0 + z[\rho(t') - r_0]$, $c \rightarrow \hat{c}(t', z)$ на II этапе.

Содержание главы 2

- 1) Представлен обзор модели продуцирования и переноса углекислого газа в лесных песчаных почвах.

- Заика Ю. В. Краевая задача переноса CO_2 в лесных песчаных почвах / Ю. В. Заика, О. Н. Бахмет // Труды Карельского научного центра РАН. — 2020. №7. С. 34–45. doi: 10.17076/mat1244

2) Получена модель температурных волн из уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial(c_v(t, z)T(t, z))}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(t, z) \cdot \frac{\partial T(t, z)}{\partial z} \right),$$

$$z \in (0, H), \quad t > 0, \quad T(t, 0) = \varphi^*(t), \quad T(t, H) = T_H,$$

для однородной среды.

- 3) Представлен обзор модели температурных волн в случае неоднородности среды с использованием функций Бесселя и Макдональда (модель Чудновского–Нерпина).
- 4) Предложена упрощенная модель температурных волн (в температурную волну для случая однородной среды вместо χ подставили линейную зависимость $\chi(z)$) для слоистого профиля почвы и определена невязка.
- 5) Сравнение работы двух моделей: Чудновского–Нерпина и упрощенной, показывает применимость второй для моделирования суточного колебания температурной волны.
- 6) Вычислительный алгоритм основан на применении техники разностных схем к уравнению материального баланса с переменным коэффициентом $\widehat{D}(t', x)$. Для диффузионного слагаемого используется техника неявных разностных схем, а для конвективного — явных.

Литература

1. Алексеев, Е. Р. Scilab: Решение инженерных и математических задач / Е. Р. Алексеев, О. В. Чеснокова, Е. А. Рудченко. — М.: ALT Linux; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. — 260 с.
2. Архангельская Т. А. Температурный режим комплексного почвенного покрова. — М.: ГЕОС, 2012. — 282 с. ISBN 978-5-118-569-2.
3. Взаимодействие водорода с металлами / под ред. А. П. Захаров. — М.: Наука, 1987. — 296 с.
4. Власова Е. А. Приближенные методы математической физики: учеб. для вузов / Е. А. Власова, В. С. Зарубин, Г. Н. Кувыркин. — М.: Изд-во МГТУ им.Н.Э. Баумана, 2001. — 700 с.
5. Водород в металлах: в 2 т. / под ред. Г. Алефельд, И. Фелькль. — М.: Мир, 1981.
6. Волков, Е. А. Численные методы: учеб. пособие для вузов. — 2-е изд., испр. — М.: Наука, 1987. — 248 с.
7. Гамзаев Х. М. Численный метод решения коэффициентной обратной задачи для уравнения диффузии — конвекции — реакции. // Вестник Томского Государственного университета. Математика и механика. — 2017. №50. С. 67 — 78. doi: 10.17223/19988621/50/6
8. Гидридные системы: справ. изд. / Б. А. Колачев [и др.]. — М.: Металлургия, 1992. — 352 с.
9. Грудова К. В. Моделирование суточных колебаний температурных волн в лесных песчаных почвах // Труды Карельского научного центра РАН. — 2024. (в печати)

10. Грудова К.В. Моделирование суточных колебаний температуры корнеобитаемого слоя лесных песчаных почв // Труды Карельского научного центра РАН. —2023. №4. С. 24–30. DOI: 10.17076/mat1775
11. Грудова К.В. Разностная схема краевой задачи переноса CO_2 в лесных песчаных почвах // Труды Карельского научного центра РАН. —2021. №6. С. 13–19. DOI: 10.17076/mat1454
12. Динамическое моделирование процессов трансформации органического вещества почв. Модель ROMUL / О.Г. Чертов [и др.]. — СПб., 2007. — 96 с.
13. Дульнев Г.Н. Применение ЭВМ для решения задач теплообмена: учеб. пособие для теплофизич. и теплоэнергетич. спец. вузов / Г.Н.Дульнев, В.Г. Парфенов, А.В. Сигалов. — М.: Высш. Шк., 1990. — С. 71–111.
14. Заика Ю.В. Интегральные операторы прогнозирования и идентификации моделей водородопроницаемости / Ю.В. Заика. — Петрозаводск: КарНЦ РАН, 2013. — 505 с.
15. Заика, Ю.В. Краевая задача водородопроницаемости мембран газоразделения / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2015. №10. — С. 55–68.
16. Заика Ю.В. Краевая задача переноса CO_2 в лесных песчаных почвах / Ю.В. Заика, О.Н. Бахмет // Труды Карельского научного центра РАН. — 2020. №7. С. 34–45. doi: 10.17076/mat1244
17. Заика, Ю.В. Краевая задача со свободной границей: гидрирование циркониевого сплава / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2016. №8. — С. 24–33.
18. Заика, Ю.В. Численное моделирование динамики свободной границы гидридообразования / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова, К.В. Грудова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2018. №7. — С. 14–24.
19. Заика Ю.В. Численное моделирование динамики свободной границы фазового перехода "металл-гидрид" / Ю.В. Заика, Н.И. Родченкова, К.В. Грудова // ФизикА.СПб Тезисы докладов международной конференции. — М.: Литео, 2018. — С. 60–61.
20. Зоммерфельд А. Дифференциальные уравнения в частных производных физики. — М.: ИЛ, 1950. — 457 с.

21. Изотопы водорода. Фундаментальные и прикладные исследования / под ред. А. А. Юхимчук. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. — 697 с.
22. Концентрация CO₂ в воздухе почв горных туманных лесов южной Мексики / Е. Н. Икконен [и др.] // Почвоведение. — 2013. №2. С. 172–176.
23. Калиткин Н. Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978. С. 380–384
24. Лапина Л. Э. Метод вычисления коэффициента эффективной теплопроводности по данным измерений температуры почвы // Известия Коми НЦ УрО РАН. — 2017. №2. С. 12–15
25. Лыков А. В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. — М.: ГИТТЛ, 1954. — 298 с.
26. Ортега Дж. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений / Дж. Ортега, У. Пул. — М.: Наука, 1986. — С. 221–234.
27. Писарев А. А. Проницаемость водорода через металлы / А. А. Писарев, И. В. Цветков, Е. Д. Маренков, С. С. Ярко. — М.: МИФИ, 2008. — 144 с.
28. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. — М.: Наука, 1977. — 664 с.
29. Полуэктов Р. А. Модели продукционного процесса сельскохозяйственных культур / Р. А. Полуэктов, Э. И. Смоляр, В. В. Тарлеев, А. Г. Топаж. — СПб.: СПбГУ, 2006. — 396 с.
30. Разработка системы комплексного мониторинга окружающей среды Восточной Финляндии, входящей в Арктическую зону РФ, с использованием дистанционных и контактных средств наблюдения для прогнозирования изменений водных и наземных экосистем // Отчет о научно-исследовательской работе. — Петрозаводск, 2022. С. 97–102
31. Решение инженерных задач в Scilab: учеб. пособие / А. Б. Андриевский [и др.]. — СПб.: НИУ ИТМО, 2013. — 97 с.
32. Ризниченко Г. Ю. Математические модели в биофизике и экологии. — Москва–Ижевск, 2003. — 184 с.

33. Родченкова Н. И. Численное моделирование движения границы гидридообразования в оболочке из циркониевого сплава / Н. И. Родченкова, К. В. Грудова // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2019. №7. — С. 42–52.
34. Сивухин Д. В. Общий курс физики: Учеб. пособие: Для вузов. В 5 т. Т. II. Термодинамика и молекулярная физика. — 5-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 544 с. ISBN 5-9221-0601-5
35. Смагин А. В. Газовая фаза почв. — М.: МГУ, 2005. — 301 с.
36. Тарасов П. А. Исследование влияния мульчирования сплошной вырубki на температуру почвы / П. А. Тарасов, Е. О. Бакшеева, В. А. Иванов // Вестник КрасГАУ. — 2015. №8. С. 75–80
37. Тарко А. М. Антропогенные изменения глобальных биосферных процессов. Математическое моделирование. — М.: Физматлит, 2005. — 232 с.
38. Черданцев Ю. П. Методы исследования систем металл–водород / Ю. П. Черданцев, И. П. Чернов, Ю. И. Тюрин. — Томск: ТПУ, 2008. — 286 с.
39. Чертов А. Г. Единицы физических величин: учеб. пособие для вузов. — М.: Высшая школа, 1977. — 287 с.
40. Чудновский А. Ф., Теплофизика почв. — М.: Наука, 1976. 352 с.
41. Чудновский А. Ф. Физика почвы. / А. Ф. Чудновский, С. В. Нерпин. — М.: Наука, 1967. 584 с.
42. Шеин Е. В. Курс физики почв. — М.: МГУ, 2005. — 432 с.
43. Шеин Е. В. Математическое моделирование в почвоведении / Е. В. Шеин, И. М. Рыжова. — М., 2016. — 377 с.
44. Шеин Е. В. Определение профильного распределения температуры почвы на основании температуры ее поверхности / Е. В. Шеин, А. Г. Болотов, М. А. Мазиров, А. И. Мартынов // Земледелие. — 2018. №7. С. 26–29. doi: 10.24411/0044-3913-2018-10707
45. Шеин Е. В. Теплофизические характеристики почв — основа расчета и управления тепловым режимом почв / Е. В. Шеин, М. А. Мазиров, Ф. Д. Михайлов, А. И. Мартынов // Земледелие. — 2016. №6. С. 20–23

46. Alloys based on 5 group metals for hydrogen purification membranes / S. Kojakhmetov, N. Sidorov, V. Piven, I. Sipatov, I. Gabis, B. Arinov // *J. of Alloys and Compounds*. — 2015. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.01.242>
47. Edmund M.R. Modeling soil CO₂ production and transport with dynamic source and diffusion terms: testing the steady-state assumption using DETECT v1.0 / M.R. Edmund, O. Kiona, K. Heather, E. S. Kimberly, C. Yolima, P. Elise. — *Geoscientific Model Development*. 2018. P. 1909–1928. doi: 10.5194/gmd-11-1909-2018
48. Enrique P.S. Improving the accuracy of the gradient method for determining soil carbon dioxide efflux / P.S. Enrique, L.S. Russell, Joost van H., A.B. Greg // *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*. — 2017. P. 50–64. doi: 10.1002/2016JG003530
49. Evard E. A. Kinetics of hydrogen evolution from MgH₂: Experimental studies, mechanism and modelling / E. A. Evard, I. E. Gabis, V. A. Yartys // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2010. Vol. 35. Iss. 17. — P. 9060–9069. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.05.092
50. Friedlingstein P. Persistent growth of CO₂ emissions and implications for reaching climate targets / P. Friedlingstein, R. M. Andrew, J. Rogelj, G. Peters, J. G. Canadell, R. Knutti, G. Luderer, M. R. Raupach, M. Schaeffer, D. P. Van Vuuren. — *Nat. Geosci.*, 7, 2014. P. 709–715. doi: 10.1038/ngeo2248
51. Glagolev M. V. On a problems related to a concept of soil thermal diffusivity and estimation of its dependence on soil moisture / M.V. Glagolev, A.F. Sabrekov // *Environmental Dynamics and Global Climate Change*. — 2019. Vol. 10. Iss. 2. P. 68–85. doi: 10.17816/edgcc21202
52. Handbook of hydrogen storage: new materials for future energy storage / edt. M. Hirscher. — Wiley–VCH, 2010. — 353 p.
53. Hashimoto S. Global spatiotemporal distribution of soil respiration modeled using a global database / S. Hashimoto, N. Carvalhais, A. Ito, M. Migliavacca, K. Nishina, M. Reichstein. — *Biogeosciences*, 12, 2015. P. 4121–4132. doi: 10.5194/bg-12-4121-2015
54. Metal hydride hydrogen compressors: a review / M.V. Lototskyy , V. A. Yartys, B. G. Pollet, R. C. Jr. Bowman // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2014. Vol. 39. Iss. 11. — P. 5818–5851. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.01.158.

55. Microstructure changes in Zr–1Nb alloy after pulsed electron beam surface modification and hydrogenation / N.S. Pushilina, V.N. Kudiiarov, R.S. Laptev, A.M. Lider, A.D. Teresov // *Surface and Coatings Technology*. — 2015. Vol. 284. — P. 63–68. doi: 10.1016/j.surfcoat.2015.07.082
56. Peculiarities of hydrogen permeation through Zr–1%Nb alloy and evaluation of terminal solid solubility / E.A. Denisov, M.V. Kompaniets, T.N. Kompaniets, I.S. Bobkova // *Journal of Nuclear Materials*. — 2016. Vol. 472. — P. 13–19. doi: 10.1016/j.jnucmat.2016.01.022
57. Pundt A. Hydrogen in metals: Microstructural Aspects / A. Pundt, R. Kirchheim // *Annual Review of Materials Research*. — 2006. Vol. 36. — P. 555–608. doi: 10.1146/annurev.matsci.36.090804.094451
58. Raich J.W. The global carbon dioxide flux in soil respiration and its relationship to vegetation and climate / J.W. Raich, W.H. Schlesinger. — *Tellus B* 44(2), 1992. P. 81–99. doi: 10.1034/j.1600-0889.1992.t01-1-00001.x
59. Richter J. *The Soil as a Reactor: Modelling Processes in the Soil*. — Catena Verlag, 1987. — 192 p.
60. Rodchenkova N.I. Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface / N.I. Rodchenkova, Yu. V. Zaika // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2011. Vol. 36, Iss. 1. — P. 1239–1247. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.06.121
61. *The hydrogen economy* / eds. M. Ball, M. Wietschel. — Cambridge University Press, 2009. — 646 p.
62. Varin R. A. *Nanomaterials for solid state hydrogen storage* / R. A. Varin, T. Czujko, Z. S. Wronski. — Springer, New York, 2009. — 338 p. doi: 10.1007/978-0-387-77712-2
63. Zaika Yu. V. Boundary value problem of CO_2 production and transport in forest sandy soil / Yu. V. Zaika, O. N. Bakhmet / In the book: *A Closer Look at Boundary Value Problems*. — Nova Science Publishers, New York, 2020.
64. Zaika Yu. V. Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydriding / Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova // *Appl. Math. Model.* — 2009. Vol. 33. №10. — P. 3776. doi: 10.1016/j.apm.2008.12.018

65. Zaika Yu. V. Hydrogen-solid boundary-value problems with dynamical conditions on surface / Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova // *Mathematical Modelling*. Nova Sci. Publishers. — 2013. — P. 269–302.
66. Zaika Yu. V. Numerical modelling of free boundary dynamics in "metal-hydride" phase transition / Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova, K. V. Grudova // *Journal of Physics: Conference series*. — 2018. Vol. 1135. doi: 10.1088/1742-6596/1135/1/012025
67. Zaika, Yu. V. Parametric identification of a hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations / Yu. V. Zaika, E. P. Bormatova // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2011. Vol. 36. №1. — P. 1295–1305. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.099