

УДК: 51-72, 519.688

Численная идентификация модели дегидрирования в грид-системе на базе BOINC

И. А. Чернов^{1,a}, Е. Е. Ивашко^{1,b}, Н. Н. Никитина^{1,c}, И. Е. Габис^{2,d}

¹Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН,
Россия, 185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11

²Физический факультет СПбГУ,
Россия, 198504, г. Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ульяновская, 3

E-mail: ^a IACHernov@yandex.ru, ^b ivashko@krc.karelia.ru, ^c nikitina@krc.karelia.ru, ^d igor.gabis@gmail.com

Получено 01 ноября 2012 г.

В работе рассматривается обратная задача определения по экспериментальным данным параметров модели выделения водорода из порошка гидрида металла. Методом слепого поиска в пространстве параметров установлено, что задача имеет многочисленные физически разумные решения. Решения задачи получены с помощью высокопроизводительного численного моделирования в грид-системе на базе платформы BOINC.

Ключевые слова: обратная задача, оценка параметров, математическое моделирование, вычислительные методы в физике, грид-системы, BOINC

Numerical identification of the dehydrating model in a BOINC-based grid system

I. A. Chernov¹, E. E. Ivashko¹, N. N. Nikitina¹, I. E. Gabis²

¹Institute of Applied Math Research, 11 Pushkinskaya street, Petrozavodsk, 185910, Russia

²Department of Physics, Saint-Petersburg State University, 3 Ulianovskaya Street, Petrodvorets, Saint-Petersburg, 198504, Russia

Abstract. — In the paper we consider the inverse problem of evaluating kinetic parameters of the model of dehydrating of metal powder using experimental data. The «blind search» in the space of parameters revealed multiple physically reasonable solutions. The solutions were obtained using high-performance computational modeling based on BOINC-grid.

Keywords: inverse problem, evaluation of parameters, mathematical modelling, computation methods in physics, grid systems, BOINC

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 1, pp. 37–45 (Russian).

Работа выполнена при поддержке гранта СПбГУ №11.38.68.2012 и гранта РФФИ №13-07-00008 А.

Введение

Обратные задачи определения параметров математических моделей по измеряемым данным играют важную роль в физике. Способность модели воспроизводить наблюдаемые зависимости является важнейшим критерием ее адекватности. Модель, как правило, содержит несколько параметров, имеющих определенный физический смысл. Нелинейное взаимодействие различных элементарных процессов существенно обесценивает методы суперпозиции, призванные определить характеристики элементарных процессов по отдельности. Адекватная математическая модель эксперимента аппроксимирует не только отдельный экспериментальный результат, но целую серию, причем при близких значениях параметров (однако допустимый разброс для разных параметров может быть различным). Удачная модель опирается на описания элементарных процессов и общие законы природы (например законы сохранения) и потому содержит более одного параметра.

Общих методов решения обратных задач не существует. Обратные задачи, как правило, нелинейны даже для линейных моделей (уже потому, что решение линейного дифференциального уравнения в общем случае нелинейно) и некорректны [Aster et al, 2005; Тихонов, Арсенин, 1979]. Существующие методы обеспечивают в лучшем случае локальную сходимость, что оставляет открытым вопрос об альтернативных решениях. Различные попытки обеспечить единственность решения требуют, по существу, знания решения априори.

Критерием качества найденного решения является способность полученного набора параметров аппроксимировать серию экспериментальных кривых, а также физическая разумность, то есть соответствие ограничениям, налагаемым физическим смыслом. К очевидным ограничениям относится положительность величин, оценки сверху на параметры, имеющие смысл вероятности или доли, и т. п. Существуют и иные ограничения на параметры, связанные с физическими оценками. В ряде случаев оценки «мягкие» (например, если известно, что некоторая скорость существенно меньше скорости звука, но более точные оценки отсутствуют), приводящие к проверке маловероятных потенциальных решений.

Однако и в области допустимых значений параметров возможно несколько решений обратной задачи. Для определенности будем считать, что речь идет о минимизации среднеквадратичной невязки. Если параметров не слишком много, имеет смысл «слепой» поиск по сетке в области допустимых значений. Узлы, в которых обнаружены локально-минимальные значения функционала, могут служить начальными данными для тех или иных итерационных алгоритмов.

Описанная задача принадлежит к классу проблем, эффективно решаемых в рамках грид-систем и систем распределенных вычислений [Foster, Kesselman, 1999; Foster, Kesselman, Tuecke, 2001]:

1. отдельные подзадачи (расчеты модели в узлах сетки в пространстве параметров и вычисление среднеквадратичной невязки) никак не связаны между собой, могут решаться параллельно и не требуют синхронизации;
2. подзадачи выполняются быстро и не требовательны к вычислительной мощности;
3. объем входных данных невелик (вектор пространства параметров, массив экспериментальных значений пересылается однократно), а выходные данные — одно вещественное число (значение функционала), что не предъявляет высоких требований к скорости линий связи.

В настоящей работе мы рассматриваем слепой поиск решений задачи идентификации модели разложения гидрида алюминия методом наименьших квадратов в грид-системе. Гидриды металлов являются одним из перспективных способов хранения водорода, обеспечивая относительно высокую емкость водородных аккумуляторов при достаточно низком равновесном

давлении; кроме того, эндогенность реакции разложения гидрида приводит к снижению температуры при дегидрировании, что способствует пожаробезопасности [Тарасов, Лотоцкий, Яртысь, 2006]. Однако необходимо детальное понимание процессов формирования и разложения гидридов, в частности оценки кинетических констант.

В дальнейшем речь идет о выделении водорода из порошка гидрида алюминия [Gabis et al, 2012]. Алюминий является перспективным материалом в силу своего малого атомного веса и относительно высокого содержания водорода в гидриде (алане). Работа с порошком обусловлена особенностями синтеза гидрида алюминия методами мокрой химии. Одним из недостатков алана является длительный период инкубации — формирования зародышей фазы металла, служащих каналом облегченной десорбции водорода и, таким образом, обеспечивающих быстрое выделение водорода. Однако этот период может быть сокращен путем активации. Одним из способов активации является облучение порошка ультрафиолетовым светом. При длительной экспозиции можно упрощенно считать, что часть S_0 поверхности частиц, подвергшаяся облучению, соответствует тонкому слою фазы металла; при короткой экспозиции и перемешивании с целью облучить всю поверхность частиц считаем, что образуются зародыши новой фазы, занимающие некоторую долю поверхности S_0 .

Математическая модель

Экспериментальные данные по неактивированному алану получены методом барометрии. Небольшие количества (доли грамма) порошка $\alpha - AlH_3$ помещались в автоклав и вакуумировались. Затем автоклав соединялся с термостатированной камерой с калиброванным объемом и нагревался до заданной температуры. Нагревался только автоклав, объем которого пренебрежимо мал по отношению к объему камеры. Количество выделившегося водорода определялось по изменению давления в калиброванном объеме.

Активация ультрафиолетовым (УФ) светом проводилась как для выяснения деталей физических процессов, идущих во время инкубации дегидрирования, так и для сокращения ее длительности [Gabis et al, 2012]. В первой серии экспериментов алан, насыпанный тонким слоем на термостол в вакуумной камере, облучался через прозрачное для УФ окно. При этом частицы порошка алана засвечивались с одной стороны и могли экранировать нижние частицы. После окончания экспозиции УФ выключался, термостол нагревался до заданной температуры и происходило выделение водорода. Подробности постановки эксперимента можно найти в статье [Габис и др., 2012]

Во второй серии экспериментов алан при активации УФ помещался на вибрирующий стол, что позволило облучать его частицы со всех сторон. Эта процедура проводилась на атмосфере, затем образец засыпался в автоклав, и проводилось выделение водорода. СЭМ фотографии образцов, дегидрированных на 15% (см. [Gabis et al, 2012]) показывают наличие большого числа металлических зародышей, равномерно распределенных по поверхности частиц алана.

Методика и выбранный подход к математическому моделированию формирования и разложения гидридов достаточно подробно описаны в работе [Chernov, Gabis, 2011] (см. также библиографию там). Там же обосновано утверждение о малом влиянии формы частиц на кинетику и о допустимости одночастичного приближения — замены порошка одной частицей простой формы. Кратко опишем модельные допущения:

- частицы порошка сферические, рассматриваем одну частицу радиуса L ;
- предполагаем сценарий «сжимающегося ядра» — формирование слоя металла (корки) на поверхности частицы и его дальнейшее утолщение;

- сплошная корка занимает сферический слой, ограниченный парой концентрических сфер с радиусами L и $\rho < L$;
- формирующаяся корка состоит из зародышей симметричной формы и описывается в сферических координатах (r, φ, θ) декартовым произведением $\Omega \times [\rho, L]$, где Ω — произвольное измеримое множество на поверхности сферы; отношение его площади к поверхности частицы обозначим S .

При этих предположениях состояние частицы полностью описывается в каждый момент времени величинами ρ и S .

Физические допущения следующие: диффузию в фазе металла считаем быстрой в том смысле, что градиенты концентрации пренебрежимо малы; температура образца поддерживается постоянной; пренебрегаем реадсорбцией, то есть десорбция водорода идет в вакуум; десорбция с фазы металла идет непосредственно с границы раздела фаз (через поры); концентрация водорода c в фазе металла постоянна и мала по сравнению с принимаемой за единицу концентрацией в гидриде; размер частицы не меняется в ходе реакции. Пренебрегая концентрацией c , считаем поток десорбции, тем не менее, ненулевой величиной.

Плотности потоков десорбции постоянны, обозначим их J' для гидрида и J для металла. Полный поток десорбции тогда равен

$$J'(1 - S(t)) \cdot 4\pi L^2 + JS(t)4\pi\rho^2.$$

Учет радиального роста формируемой корки сводится к предположению, что доля ν потока десорбции с фазы металла обусловлена распадом ядра и, тем самым, приводит к движению границы ρ . Это движение описывается уравнением

$$\dot{\rho} = -\nu J, \quad \rho > 0. \quad (1)$$

Запись закона сохранения (полное количество водорода меняется только за счет десорбции с поверхности гидрида $4\pi L^2(1 - S)$ и поверхности металла $4\pi\rho^2 S$) приводит к уравнению

$$\dot{S}(t) \frac{L^3 - \rho^3}{3} = J'(1 - S(t))L^2 + (1 - \nu)JS(t)\rho^2. \quad (2)$$

Предполагаем, что $\nu = 1$, если $S = 1$, то есть при сформированной корке вся десорбция идет с ядра. При $S < 1$ возможно любое $\nu \in [0, 1]$. Отсутствие радиального роста означает $\nu = 0$.

Измеряемой в эксперименте величиной была доля прореагировавшего вещества, то есть относительный объем фазы металла. В модели это

$$f(t) = (1 - \check{\rho}^3(t))S(t), \quad \check{\rho}(t) = \rho(t)/L.$$

Модель (1)–(2) содержит следующие пять параметров: плотности потоков десорбции с двух фаз J и J' ; начальные данные для толщины корки ρ_0 и площади, занимаемой зародышами на начало десорбции S_0 (причем эта величина известна — равна нулю — в случае неактивированной десорбции); доля потока за счет радиального роста зародышей ν . Все параметры неотрицательны, кроме того, $S_0 \leq 1$, $\rho_0 \leq L$, $\nu \leq 1$. Таким образом, рассмотрение по N значений каждого параметра приводит к необходимости решения N^5 однотипных независимых задач. Кроме того, при вычислении f в эксперименте используется полное количество водорода, содержащиеся в частице изначально, неизвестное точно; в связи с этим экспериментальная кривая

может быть умножена на масштабный множитель s , ограниченный сверху и снизу (в пределах 1 ± 0.1). При расчете величина s выбиралась из условия минимизации среднеквадратичной невязки при неизменной модельной кривой $f(t)$. Таким образом, минимизируемый функционал

$$F = \min_{s \in [0.9, 1.1]} \int_0^{\bar{t}} (f(t) - s\hat{f}(t))^2 dt \cdot \left(\bar{t} \cdot \max_{t \in [0, \bar{t}]} \hat{f}(t) \right)^{-1},$$

$\hat{f}(t)$ — экспериментальные данные. Численно интеграл заменяется формулой трапеций с интерполяцией модельных значений. Нормировка обеспечивает безразмерность функционала и независимость от интервала времени \bar{t} (десорбция без активации протекает существенно дольше, а время эксперимента сильно варьируется в зависимости от температуры). Далее значения F выражены в процентах.

Уравнения модели несложны и могут быть проинтегрированы в элементарных функциях, однако оценки показывают, что численное интегрирование уравнений и вычисление функционала эффективнее расчета по сложной формуле; кроме того, такой подход сильно упрощает модификацию программного обеспечения в случае уточнения или изменения модели. Численный алгоритм типа предиктор-корректор реализован на языке Fortran-90/95 без использования нестандартных возможностей и библиотек, что обеспечивает работоспособность для большинства платформ.

Организация вычислительных экспериментов

Численное моделирование результатов экспериментов проводилось на локальной грид-системе, реализованной в ЦКП КарНЦ РАН «Центр высокопроизводительной обработки данных» [ЦКП КарНЦ РАН, 2012] на базе программной платформы BOINC (Berkeley Open Infrastructure for Network Computing) [Anderson, 2004]. BOINC является одной из наиболее популярных и активно развиваемых в настоящее время систем промежуточного программного обеспечения с открытым исходным кодом (LGPL) для организации проектов добровольных вычислений в сети Интернет, а также грид-систем в рамках локальной сети. Данные системы предполагают объединение в единую структуру неспециализированных вычислительных единиц — в частности персональных компьютеров, принадлежащих организации или отдельным лицам. При этом сравнительно небольшая мощность отдельных вычислительных узлов компенсируется их большим количеством и наличием высокоскоростных каналов связи между ними, таких как локальная коммуникационная сеть организации и Интернет.

Платформа BOINC позволяет выполнять в подобной распределенной вычислительной среде ресурсоемкие приложения, которые могут быть разделены на большое количество независимых подзадач (рабочих заданий). При этом не требуется, чтобы приложения имели открытый исходный код или были специальным образом адаптированы. BOINC имеет архитектуру «клиент-сервер»: сервер, или управляющий узел, генерирует рабочие задания и помещает их в очередь. Узлы-клиенты запрашивают новые задания при наличии на узле свободных ресурсов (процессорное время, оперативная и дисковая память), выполняют вычисления и отсылают результаты расчетов на сервер.

Грид-системы на базе платформы BOINC могут использоваться как для проведения ресурсоемких вычислительных экспериментов (см., например, [Ивашко, Никитина, 2012]), так и для высокопроизводительной обработки данных (см. [Ивашко, Головин, 2012]).

В качестве управляющего узла грид-сегмента КарНЦ РАН используется выделенный сервер. Для проведения вычислительных экспериментов клиентская часть была установлена на один настольный компьютер, два сервера, один управляющий и три вычислительных узла кластера

ЦКП КарНЦ РАН (на каждом узле кластера — два четырехъядерных процессора). Таким образом, при условии, что вычислительные узлы не заняты выполнением каких-либо программ и предоставляют в пользование BOINC все свои ресурсы, возможен одновременный расчет 43 вычислительных заданий. Использование BOINC-грид для выполнения серий однотипных экспериментов позволяет гибко управлять приоритетами задач, выполняемых на вычислительном кластере. При этом накладные расходы, вносимые грид-сетью, невелики, что позволяет достаточно эффективно задействовать ресурсы кластера.

Для выполнения расчетов использовалось однопоточное Linux-приложение, разработанное на языке Fortran-90/95. Так как приложение не адаптировалось для выполнения в BOINC-грид, для его запуска использовалось специальное приложение-обертка BOINC Wrapper [GenWrapper], организующее взаимодействие исходного приложения с BOINC-клиентом.

Результатом расчета является значение сеточного среднеквадратичного функционала; если оно не превосходит заданного порога, результат считается допустимым решением.

Показатели эффективности для двух описанных выше экспериментов — сравнение активированного и неактивированного разложения гидроксида алюминия (эксперимент № 1) и дегидрирование при пяти значениях постоянной температуры (эксперимент № 2) приведены в таблице 1. Для второго эксперимента общее число заданий составило 250 000, однако, поскольку в грид-системе наиболее эффективно выполняются вычислительные задачи, время счета которых существенно превышает время на передачу данных, каждое из 250 «пакетных» рабочих заданий последовательно решало 1 000 задач. Высокая точность расчета модели для первого эксперимента связана с большим количеством экспериментальных точек и призвана снизить влияние интерполяции.

Таблица 1. Показатели эффективности расчета

Характеристика	№ 1	№ 2
Число заданий	15 000	250
Число узлов сетки по времени	10^5	10^2
Общее время расчета на грид	6 ч. 13 мин.	66 мин.
Среднее время расчета рабочего задания	25.43 с.	12 мин. 3 с.
Время выполнения эксперимента на одном ПК	79 ч. 10 мин.	26 ч.

Результаты расчетов и обсуждение

Область параметров была ограничена исходя из физических оценок на значения параметров; пороговые значения определялись на основе эталонного решения, найденного стандартным методом наименьших квадратов.

Для первого эксперимента эталонный набор параметров: $\bar{J} = 1.025 \cdot 10^{-7}$ см/с, $\bar{J}' = 3.593 \cdot 10^{-9}$ см/с, $\bar{\rho}_0 = 0.82L$, $\bar{S}_0 = 0$ для случая без активации и $\bar{\rho}_0 = 0.85L$, $\bar{S}_0 = 0.09$ для активированной десорбции, $\bar{\nu} = 0$. Для плотностей потоков проверялось пять значений: \bar{J} , $(1 \pm 0.25)\bar{J}$ и $(1 \pm 0.5)\bar{J}$, аналогично для J' . Для ρ_0 — тоже пять: 0.5, 0.6, 0.7, $\bar{\rho}_0$, 0.9. Для S_0 — шесть: 0, 1/24, 1/12, 0.09, 1/8, 1/6, а для параметра ν , наименее известного, — десять: $\nu = 0.1i$, $i = 1 : 10$. Итого сетка состоит из 7 500 узлов, а расчет для двух случаев — активированного и неактивированного — приводит к решению 15 000 задач.

Для второго эксперимента эталонные значения \bar{J} и \bar{J}' выбраны для каждой температуры (поскольку скорости реакций существенно зависят от температуры). Сетки значений для всех

параметров — равномерные. Для плотностей потоков ρ_0 и ν проверялось десять значений: от $0.2\bar{J}$ до $2\bar{J}$, аналогично для J' , от 0.8 до 0.98 для ρ_0 и от 0 до 0.9 для ν . Для S_0 — пять: от 0 до 0.04. Итого сетка состоит из 50 000 узлов, а расчет для пяти экспериментальных кривых для разных температур приводит к решению 250 000 задач.

Опишем первый эксперимент. Пороговое значение F , при которых набор параметров считался допустимым решением, выбрано 6% без активации и 4% при активации. Из 15 тысяч кривых тест прошли 74, в том числе 9 кривых для неактивированной десорбции. Таким образом, мы имеем множество возможных решений задачи. Уменьшение их количества введением более жестких условий отбора не оправдано, поскольку при этом потеряются потенциальные решения, которые выглядят приемлемо — в отсутствие других решений они вполне удовлетворительны с физической точки зрения. Однако можно предложить некоторые дополнительные ограничения: потребовать радиальный рост ($\nu > 0$), для кривых с активацией необходимо $S_0 > 0$ (это результат активации), ограничить толщину корки снизу ($\rho_0 \geq 0.9L$), ограничить масштабный множитель ($s \geq 1$, для активированных кривых $s < 1.05$). При этом остается 9 решений (таблица 2), в том числе 4 (№№ 1–4) — для неактивированной десорбции.

Таблица 2. Оценки параметров для первого эксперимента

№	$10^7 J$	$10^9 J'$	ρ_0/L	ν	S_0	s
1	1.281	2.695	0.9	0.2	0.000	1.092
2	1.025	3.593	0.9	0.2	0.000	1.070
3	1.025	1.797	0.9	0.1	0.000	1.084
4	0.769	3.593	0.9	0.1	0.000	1.051
5	1.025	4.491	0.9	0.2	0.083	1.018
6	1.025	3.593	0.9	0.2	0.090	1.011
7	1.025	5.389	0.9	0.1	0.042	1.041
8	1.281	3.593	0.9	0.2	0.042	1.031
9	1.025	4.491	0.9	0.1	0.042	1.017

Пара (2,6) является решением наилучшего качества в том смысле, что соответствующие параметры аппроксимируют две экспериментальные кривые при одних и тех же значениях параметров (различие S_0 отражает влияние активации, а масштабный множитель s , вообще говоря, свой для каждого измерения). Однако пары (1,8) и (2,9) также представляют интерес (константа десорбции с поверхности гидрида играет роль лишь на начальной стадии процесса и определяется хуже).

Для второго эксперимента решений еще больше: пороговое значение функционала в 6% преодолевается более чем в 57 000 случаях, поэтому порог был понижен до 1.6%: он преодолевается для 2 598 наборов параметров из 250 000. Введение дополнительных ограничений ($S_0 > 0$, $\nu > 0$) позволяет уменьшить число решений; их распределение по температурам эксперимента приведено в таблице 3 (N — число решений, а $\min F$ — минимальное значение функционала).

Отметим, что понижение порога возможно только по завершении расчета, поскольку при пороговом значении 1.5% решений для некоторых температур не обнаруживается. Оценка 6% была получена на основе поиска решения для некоторых начальных значений параметров стандартным методом наименьших квадратов — таким образом, слепой поиск позволил обнаружить решения существенно лучшего качества, в общем случае недоступные локально сходящимся методам, если окрестность решения не известна априори. Число обнаруженных решений снижа-

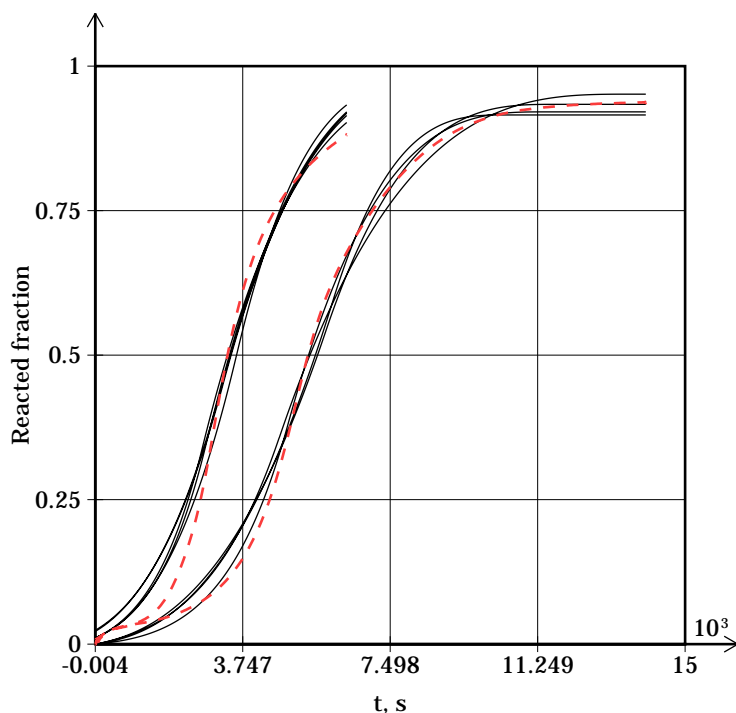


Рис. 1. Возможные решения задачи идентификации модели выделения водорода из активированного и неактивированного порошка гидрида алюминия; пунктирные линии — экспериментальные, сплошные — модельные аппроксимации.

Таблица 3. Распределение полученных решений по различным экспериментальным кривым

$T^{\circ}\text{C}$	80	90	100	110	120
N	1,173	750	2	7	2
$\min F$	0.9 %	1.1 %	1.6 %	1.6 %	1.2 %

ется при увеличении точности, но пропорционально растет и время расчета. Анализ полученных решений позволяет сделать ряд выводов:

- константа скорости десорбции с поверхности гидрида J' определяется однозначно: во всех полученных наборах ее значение постоянно, кроме кривых для $T = 80^{\circ}\text{C}$, где присутствует вдвое большее значение, однако в конце списка (при $F = 1.6\%$);
- константа скорости десорбции с поверхности металла J определяется достаточно точно: разброс значений — в пределах 20 %;
- аппроксимация лучше при малых значениях S_0 , точнее, при $S_0 \leq 0.02$;
- скорость радиального роста зародышей ν имеет тенденцию к росту по отношению к температуре: для 120°C $\nu \leq 0.2$ для всех найденных решений (при $\min F \leq 6\%$), для 100°C с уже $\nu < 0.5$, а при 80°C $\nu > 0.6$, причем значение 0.9 — в начале списка;
- начальная толщина корки ρ_0 слабо зависит от температуры: $\rho_0 \approx 0.95 \pm 0.01$.

Сделанные выводы и оценки были использованы при получении результатов, изложенных в работе [Gabis et al, 2012].

Заключение

В работе описано решение задачи оценивания параметров математической модели выделения водорода из порошка гидрида металла путем минимизации среднеквадратичного функционала методом слепого поиска на сетке в пространстве параметров с помощью грид-системы на базе BOINC. Описана схема организации вычислений с учетом специфики задачи (большое количество малосвязанных небольших подзадач), получены оценки параметров и качественные выводы. Использование BOINC-грид позволило существенно сократить время, необходимое для проведения вычислительных экспериментов. Показано, что задача имеет большое количество «физически разумных» решений, причем введение дополнительных ограничений возможно лишь после завершения расчетов.

Список литературы

- Габис И. Е., Елец Д. И., Кузнецов В. Г., Барабан А. П., Добротворский М. А., Добротворский А. М. Термо- и фотоактивация разложения гидрида алюминия // Ж-л физ. химии. — 2012. — Т. 11. — С. 1864–1870.
- Ивашко Е. Е., Головин А. С. Методы DATA MINING для анализа больших массивов данных в гетерогенной грид на базе BOINC. Труды международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений». — 2012. — С. 196–199.
- Ивашко Е. Е., Никитина Н. Н. Организация квантовохимических расчетов с использованием пакета Firefly в гетерогенной грид-системе на базе BOINC // Вычислительные методы и программирование. Новые вычислительные технологии. — 2012. — Т. 13. — С. 8–12.
- Тарасов Б. П., Лотоцкий М. В., Яртысь В. А. Проблема хранения водорода и перспективы использования гидридов для аккумулирования водорода // Российский химический журнал. — 2006. — Т. 1, № 6. — С. 34–48.
- Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. изд. 2-е. — М.: Наука, 1979. — 285 с.
- Центр высокопроизводительной обработки данных ЦКП КарНЦ РАН / Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН. 2012. URL: <http://cluster.krc.karelia.ru> (дата обращения: 1.11.2012).
- Anderson D. P. BOINC: A System for Public-Resource Computing and Storage // 5th IEEE/ACM International Workshop on Grid Computing. Pittsburgh, PA. — 2004. — P. 365–372.
- Aster R. C., Borchers B., Thurber C. H. Parameter Estimation and Inverse Problems. — Elsevier, 2005. — 303 p.
- Chernov I. A., Gabis I. E. Mathematical Modelling of Hydride Formation // Mathematical Modeling, Clustering Algorithms and Applications / Caroline L. Wilson. Mathematics Research Developments series. Nova publishers. — 2011. — P. 203–246.
- Foster I., Kesselman C. The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure // Morgan Kaufmann, San Francisco. — 1999. — 675 p.
- Foster I., Kesselman C., Tuecke S. The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations // International J. Supercomputer Applications. — 2001. — V. 15, No. 3. — P. 200–222.
- Gabis I. E., Voyt A. P., Chernov I. A., Kuznetsov V. G., Baraban A. P., Elets D. I., Dobrotvorsky M. A. Ultraviolet activation of thermal decomposition of α -alane // International Journal of Hydrogen Energy. — 2012. — V. 37. — P. 14405–14412.
- GenWrapper. A generic BOINC wrapper for legacy applications. URL: <http://genwrapper.sourceforge.net> (дата обращения: 1.11.2012).