УДК 519.6

Функціональна ідентифікація параметрів дифузії в неоднорідних наномульти-композитах: перетворення та градієнтні методи

В. С. Дейнека[1], М. Р. Петрик[2]

[1]*Інститут кібернетики імені В. Глушкова НАН України, Україна*

[2]*Тернопільський національний технічний університет ім. Івана Пулюя, Україна*

Розглянуті математичні постановки прямих і зворотніх крайових задач ідентифікації параметрів дифузії в неоднорідних наномультикомпозитах та методика побудови аналітичних розв'язків для функціональної і параметричної ідентифікації з використанням інтеґральних перетворень Фур'є та регуляризаційних градієнтних методів. Виконана числова функціональна ідентифікація коефіцієнтів дифузії двох взаємодифундованих компонентів за слідами розв'язку прямої задачі.

Ключові слова: *функціональна і параметрична ідентифікація, пряма і зворотня початково-крайові задачі, математична модель, масоперенос, наномультикомпозит, інтегральне перетворення Фур'є, градієнт функціонала-нев'язки*

Рассмотрены математические постановки прямих и обратных задач идентификации параметров диффузии в неоднородных нанокомпозитах и методика построения аналитических решений для функциональной и параметрической идентификации с использованием интегральных преобразований Фурье и регуляризационных градиентных методов. Выполнена численная идентификация коэффициентов диффузии двух взаимодиффундируемых компонентов за следами решения прямой задачи .

Ключевые слова: *функциональная и параметрическая идентификация, прямая и обратная начальноо-граничные задачи, математическая модель, масоперенос, наномультикомпозит, интегральное преобазование Фурье, градиент функционала-невязки*

The article deals with mathematical formulation of direct and inverse problems of diffusion in heteroneous nano multilayers and finding of analytical solutions for functional and parametrical identificati using the Fourier integral transformation and regularization gradient methods. The functional identification of diffusion coefficients for two codiffusion components is executed.

Key words :*functional and parametrical identification, direct and inverse mathematical model, mass transfer, nano multilayer, the Fourier integral transformation gradient of functional error.*

1. Вступ

Дослідження дифузії в багатошарових нанокомпозизитах тонких плівок, отриманих шляхом агрегації матеріалів з різними і навіть взаємно протилежними властивостями є одним із пріоритетних напрямів сучасної нанофізики. Такі розробки прогнозують створення на базі матеріалів з відомими властивостями новітніх матеріалів та середовищ з новими властивостями (нові явища електричної та магнітної провідності, дифузійно-адсорбційні ефекти тощо). Виникнення подібних ефектів в значній мірі пов'язано зі структурними змінами середовищ при аґрегатуванні наношарів (плівок) з різними властивостями та наявністю змінних ґрадієнтів концентрацій, що мають місце на інтерфейсних поверхнях розділу цих середовищ [1-4]. Останнє вимагає розробки нових методів і моделей для моделювання та ідентифікації параметрів специфіки переносу в таких мульти композитних середовищах таких явищ з врахуванням наявності великої кількості інтерфейсів між суміжними наношарами [5-11]. Зокрема, дуже актуальним є дослідження згущених (Fe/Dy, Fe/Te) магнітних багатошарових плівок, що утворені композитним способом почерговою агрегацією наношарів з високопровідними («активними») і низько провідними («пасивними») матеріалами (наприклад, магнетики (ферум) і рідкоземельні елементи (тербій, диспрозіум тощо)) [2-4].

2. Загальний фізичний опис, схематизація переносу та математична модель з урахуванням двосторонніх градієнтних взаємодій в елементах мультишару

Розглядається багатошарове середовище, що складається з n подвійних наношарів двох середовищ з різними властивостями. Процес дифузії атомів компоненти 1 (Fe) і компоненти 2 (Dy) між суміжними наношарами, спричинений наявністю градієнтів концентрацій, змінних в часі на інтерфейсних межах приводять до хімічного змішування границь розділу. Схематизація елементу такої градієнтної інтерфейсної взаємодії між двома суміжними наношарами середовища показана на рис. 1.

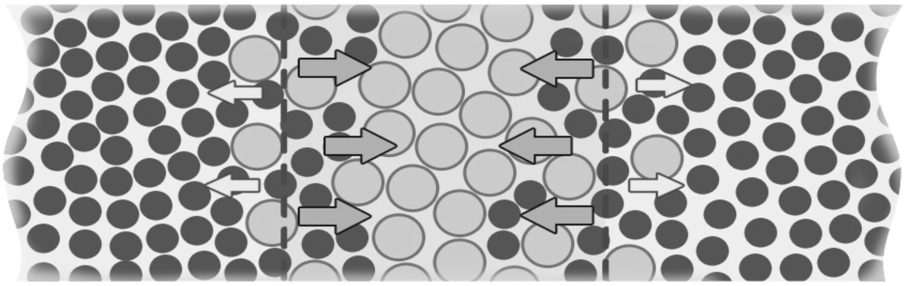


Рис. 1. Схематизація елементу градієнтної інтерфейсної взаємодії компонент між двома суміжними наношарами середовища

Концентраційні профілі для такої багатошарової системи можна одержати із системи рівнянь переносу, отриманих на основі закону Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх наношарів та системою інтерфейсних умов між послідовними наношарами середовища. Математична модель такого переносу з урахуванням вказаних фізичних чинників може бути описана у вигляді наступної змішаної крайової задачі. На областях

$$\Omega_{k_T} = (0,T)\times\Omega_k, \ \left(\Omega_k = \left(l_{k-1}, l_k\right), k=\overline{1,n+1}, l_0 = 0 < l_1 < ... < l_{n+1} = l < \infty\right)$$

концентрації $U_{1_k}\left(t,z\right)$, $U_{2_k}\left(t,z\right)$, з урахуванням [3-4, 6-8] задовольняють системі рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial}{\partial t}U_{1_k}\left(t,z\right) = D_{11_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1_k} - D_{12_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_k}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}U_{2_k}(t,z) = -D_{21_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1_k} + D_{22_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_k}. \qquad (1)$$

Початкові умови:

$$U_{1_k}(t,z)\Big|_{t=o} \equiv U_{01_k} = \begin{cases} 0, & z\in(l_{k-1},l_k),\ k=2i+1;\ i=\overline{0,[n/2]} \\ 1, & z\in(l_k,l_{k+1}),\ k=2i+2;\ i=\overline{0,[n/2]-2} \end{cases},$$

$$U_{2_k}(t,z)\Big|_{t=o} \equiv U_{02_k} = \begin{cases} 1, & z\in(l_{k-1},l_k),\ k=2i+1;\ i=\overline{0,[n/2]} \\ 0, & z\in(l_k,l_{k+1}),\ k=2i+2;\ i=\overline{0,[n/2]-2} \end{cases}, \qquad (2)$$

Крайові та інтерфейсні умови між тонкими шарами по z

$$D_1\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix} U_{1_1}(t,z) \\ U_{2_1}(t,z)\end{bmatrix}_{z=0} = 0,\quad D_{n+1}\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix} U_{1_n}(t,z) \\ U_{2_n}(t,z)\end{bmatrix}_{z=l} = 0,\ t\in(0,T), \qquad (3)$$

$$\left[U_{s_k}(t,z) - U_{s_{k+1}}(t,z)\right]\Big|_{z=l_k} = 0,\quad s=1,2, \qquad (4)$$

$$\left.\left(D_{s_1}\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z}U_{1_{s_1}}(t,z) \\ \left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial t}\right)U_{2_{s_1}}(t,z)\end{bmatrix} - D_{s_2}\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial t}\right)U_{1_{s_2}}(t,z) \\ \frac{\partial}{\partial z}U_{2_{s_2}}(t,z)\end{bmatrix}\right)\right|_{z=l_k} = 0;\ k=\overline{1,n}, \qquad (5)$$

де $D_k = \begin{bmatrix} D_{11_k} & -D_{12_k} \\ -D_{21_k} & D_{22_k}\end{bmatrix}$, $\begin{cases} s_1=k, s_2=k+1; & k=2i+1; i=\overline{0,[n/2]} \\ s_1=k+1, s_2=k; & k=2i+1; i=\overline{0,[n/2]} \end{cases}$,

$\sim_{jk} \in [0,1], k=\overline{1,n};\ j=\overline{1,2}$ – кінетичні константи, що враховують додатковий вплив швидкостей зміни концентрацій на масообмінних межах.

Зауважимо, що з позиції практичних застосувань є важливими випадки, коли $D_k = \begin{bmatrix} D_{11_k} & 0 \\ -D_{21_k} & D_{22_k}\end{bmatrix}$ або $D_k = \begin{bmatrix} D_{11_k} & -D_{12_k} \\ 0 & D_{22_k}\end{bmatrix}$. Останнє відповідатиме кінетиці взаємодії двох елементів з протилежними показниками кінетичних параметрів, так званих «активної» (високий показник) і «пасивної» компоненти (низький)[1, 2, 9]. В [8] нами встановлені умови розв'язності задачі і побудований методом функцій впливу Коші з використанням інтегрального перетворення Лапласа загальний розв'язок задачі у вигляді:

$$U_{s_k}(t,z)=\sum_{j=1}^{n}\int_0^t\Big(E_{s1_k}\mathcal{R}^1_{k,j}(t-²,z)+E_{s2_k}\mathcal{R}^2_{k,j}(t-²,z)\Big)\mu_{s_j}(²)d² +$$
$$+\int_0^t\sum_{j=1}^{n+1}\int_{l_{j-1}}^{l_j}\Big(E_{s1_k}\mathcal{H}^1_{k,j}(t-²,z,¶)+E_{s2_k}\mathcal{H}^2_{k,j}(t-²,z,¶)\Big)\mathcal{F}_{s_j}(²,¶)d¶\,d²\,;k=\overline{1,n+1} \qquad (6)$$

,

де $\mathcal{H}^s_{k,j}(t-²,z,¶)$ $\mathcal{R}^s_{k,j}(t-²,z),\ s=\overline{1,2}$ – функції впливу задачі, визначені в [8, 21].

3. Постановка і розв’язок прямої крайової задачі моделювання переносу в мультишарах типу Fe/Dy-систем із взаємодіями типу «активний-пасивний елемент»

Розглядається багатошарове нанокомпозитне середовище, що складається з *n* подвійних наношарів (Fe/Dy)-середовищ, один з яких заповнений «активним» елементом – з високими показниками кінетичних параметрів переносу, намагнічуваності, феромагнетик (Fe), а суміжний є «пасивним» – з відповідними низькими показниками (парамагнетик, рідкоземельний елемент (Dy), діалектрик, тонкий шар вуглецю тощо). Процес дифузії атомів в такій багатокомпонентній системі взаємодій є лімітований обмеженою проникністю «пасивного» елементу в суміжний шар, що заповнений «активним» елементом. Зворотній процес супроводжуватиметься значною проникністю «активного» елемента в зону «пасивного». Математична модель такого переносу з урахуванням вказаних фізичних чинників може бути описана у вигляді наступної змішаної крайової задачі. На областях

$$\Omega_{k_T}=(0,T)\times\Omega_k,\ \Big(\Omega_k=\big(l_{k-1},l_k\big),k=\overline{1,n+1},l_0=0<l_1<...<l_{n+1}=l<\infty\Big)$$

концентрації $U_{1_k}\left(t,z\right),\ U_{2_k}\left(t,z\right)$, з урахуванням [4, 6, 7] задовольняють системі рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial}{\partial t}U_{1_k}\left(t,z\right)=D_{11_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1_k}-D_{12_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_k}$$
$$\frac{\partial}{\partial t}U_{2_k}\left(t,z\right)=D_{22_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_k}. \qquad (7)$$

з початковими умовами (2), крайовими умовами(3) та інтерфейсними умови між тонкими шарами по *z* (4) та умовами

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}\Big(D_{11_{s_1}}U_{1_{s_1}}\left(t,z\right)+D_{12_{s_1}}U_{2_{s_1}}\left(t,z\right)\Big)-\left(D_{11_{s_2}}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial t}\right)U_{1_{s_2}}\left(t,z\right)+D_{12_{s_2}}\frac{\partial}{\partial z}U_{2_{s_2}}\left(t,z\right)\right)\right)\Bigg|_{z=l_k}=0 \qquad (8)$$

$$\left(D_{22_k}\frac{\partial}{\partial z}U_{2_k}\left(t,z\right)-D_{22_{k+1}}\frac{\partial}{\partial z}U_{2_{k+1}}\left(t,z\right)\right)\Bigg|_{z=l_k}=0,\ k=\overline{1,n},\ t\in\left(0,T\right). \qquad (9)$$

Тут $D_{k} = \begin{bmatrix} D_{11_k} & -D_{12_k} \\ 0 & D_{22_k} \end{bmatrix}$; $\begin{cases} s_1 = k, s_2 = k+1; \quad k = 2i+1; i = \overline{0,[n/2]} \\ s_1 = k+1, s_2 = k; \quad k = 2i+1; i = \overline{0,[n/2]} \end{cases}$.

З використанням інтегрального перетворення Фур'є, визначеного інтеґральними операторами [12]

$$F_n\left[U_2(t,z)\right] = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} U_{2_k}(t,z) V_k\left(z, \quad _m\right) ± _k dz \equiv U_{2_n}(t) \qquad (10)$$

$$F_n^{-1}[\ldots] = \begin{bmatrix} \ldots \\ \sum_{m=1}^{\infty} \ldots V_k\left(z, \quad _m\right)\left(\left\|V\left(z, \quad _m\right)\right\|_1^2\right)^{-1} \\ \ldots \end{bmatrix}, k = \overline{1, n+1}\,, \qquad (11)$$

отримуємо компоненти

$$U_{2_k}(t,z) = \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{k,k_1}\left(t - ², z, ¶\right) U_{02_k}(¶) ± _k d¶ +$$
$$+ \sum_{k_1=1}^{n} \int_0^t \mathcal{R}^2_{k,k_1}\left(t - ², z\right) µ_{2_{k_1}}(²) d², \quad k = \overline{1, n+1} \qquad (12)$$

$$U_{1_k}(t,z) = \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{k,k_1}(t-², z, ¶)\left[D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(², ¶) - U_{01_{k_1}}(¶)¢_+(²)\right] ±_{k_1} d¶ d² -$$
$$- \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \mathcal{R}^1_{k,k_1}(t-², z)\left(D_{12_{s_1}}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial ²}\right) U_{2_{s_1}}(², z) - D_{12_{s_2}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s_2}}(², z)\right) d², \; s_1, s_2 \in \{k_1, k_1+1\}, k = \overline{1, n+1} \qquad (13)$$

вектор-функції $U_1(t,z) = \left\{U_{1_1}(t,z), U_{1_2}(t,z), \ldots, U_{1_{n+1}}(t,z)\right\}$, що повністю визначає єдиний розв'язок крайової задачі (7), (2)-(4), (8), (9).

Тут головні розв'язки здачі:

– матриця впливу Коші, породжена неоднорідністю початкових умов системи (2):

$$\mathcal{H}_{k,k_1}(t, z, ¶) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{- \;\; ^2_m t} \frac{V_k\left(z, \quad _m\right) V_{k_1}\left(¶, \quad _m\right)}{\left\|V\left(z, \quad _m\right)\right\|_1^2}; k, k_1 = \overline{1, n+1}, \qquad (14)$$

– матриці функцій Ґріна, породжених системою інтерфейсних умов $z = l_k$.

$$\mathcal{R}^s_{kk_1}(t,z) = ±_{k_1} \sum_{m=1}^{\infty} e^{- \;\; ^2_m t} \frac{{}_m D_{11_{k_1}} \frac{d}{dz} V_{k_1+1}\left(l_{k_1}, \quad _m\right)}{\left\|V\left(z, \quad _m\right)\right\|_1^2} V_k\left(z, \quad _m\right), \quad s = \overline{1,2}\,,$$

де $\mathcal{F}_{1_m}(t) = f_{1_m}(t) + \sum_{k=1}^{n} ±_k \left[\quad {}_m D_{11_k} \frac{d}{dz} V_{k+1}\left(l_k, \quad _m\right)\Big|_{z=l_k} µ_{1k}(t)\right]$,

$V_k\left(z, \ {}_m\right)$ – компоненти власної функції системи, визначені в [12].

4. Постановка прямої крайової задачі ідентифікації коефіцієнтів дифузії

З метою отримання регуляризаційних виразів для відновлення компонентів коефіцієнтів дифузії на основі теорії оптимального керування станом багатокомпонентними системами [13, 15-18], розглянемо пряму крайову задачу ідентифікації коефіцієнтів дифузії в параметричній та функціональній постановках.

а) **Параметрична ідентифікація**. На областях Ω_{k_T} концентрації $U_{1_k}\left(t,z\right)$, $U_{2_k}\left(t,z\right)$, з урахуванням [5, 7] задовольняють системі рівнянь в частинних похідних (7) з початковими умовами (2) крайовими умовами (3) та інтерфейсними умови між тонкими шарами по z (15)

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{\mathrm{k}}\begin{bmatrix}U_{1_k}\left(t,z\right)\\ U_{2_k}\left(t,z\right)\end{bmatrix}-D_{\mathrm{k+1}}\begin{bmatrix}U_{1_{k+1}}\left(t,z\right)\\ U_{2_{k+1}}\left(t,z\right)\end{bmatrix}\right)\Bigg|_{z=l_k}=0\ ,\ k=\overline{1,n},\ t\in\left(0,T\right). \qquad (15)$$

б) Функціональна ідентифікація. З урахуванням того, що розв'язок прямої задачі необхідно мати у формі, зручній для реалізації процедури функціональної ідентифікації та при умові, що відомі сліди розв'язку для кожного досить тонкого k-го сегмента, $k=\overline{1,N+1}$, можна переформатувати пряму крайову задачу (7), (2), (3), (15) в систему – однорідних крайових задач для послідовних тонких дифузійних наношарів (23), (2), (16) та крайовими умовами першого роду

$$U_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{z=l_{k-1}}=U_{sl_{k-1}};\ \ U_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{z=l_k}=U_{sl_k},\ \ s=\overline{1,2}\,. \qquad (16)$$

Вибір функціонала-нев'язки. Вважаємо, що коєфіцієнти дифузії D_{sp}, $s,p=\overline{1,2}$ крайової задачі (7), (2), (3), (15) є невідомими. Однак на поверхнях областей $\text{¥}_k\subset\Omega_k$, $k=\overline{1,n+1}$, неоднорідного середовища відомі сліди розв'язків (концентраций):

$$U_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{\text{¥}_k}=f_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{\text{¥}_k}. \qquad (17)$$

Тим самим отримана задача (7), (2), (3), (15), що полягає в знахожденні функцій $D_{sp_k}\in D$, де $D=\left\{\neg\left(t,z\right):\ \neg\big|_{\Omega_{k_T}}\in C\left(\Omega_{k_T}\right),\ \neg>0,\ k=\overline{1,n+1}\right\}$.

Функціонал-нев'язку, що визначає величину відхилення шуканого розв'язку від слідів розв'язку, отриманого емпіричним шляхом на поверхнях ¥_k, для задачі параметричної ідентифікації запишем у вигляд [16, 19]:

$$J_s\left(D_{sp}(t)\right)=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n+1}\int_{l_{k-1}}^{l_k}\left(\left\|U_{s_k}\left(\text{²},z,D_{sp_k}\right)-f_{s_k}\right\|^2_{L_2(\text{¥}_k)}\right)\pm_k dz \qquad (18)$$

де $\left\|\text{¨}\right\|^2_{L_2(\text{¥}_m)}=\int_{\text{¥}_m}\text{¨}^{\,2}d\text{¥}_m$ – квадрат норми. Тут $\left\|\text{¨}\right\|_{L_2(\text{¥}_m)}=\left|\text{¨}\left(t,z\right)\right|_{z=\text{¥}_m}$.

При відомих концентраціях $U_{s_m}(t,z)$ крайова задача (7), (2), (3), (14) може бути розглянута для кожної точки z для кожного m-го сегмента. Функціонал-нев'язка відхилення шуканого розв'язку від його слідів на поверхнях спостереження $\gamma \in \Omega_m$ для функціональної ідентифікації запишеться у вигляді

$$J_s\left(D_{sp}\right)=\frac{1}{2}\int_0^T\left(\left\|U_{s_k}\left(t,l_k,D_{sp_k}\right)-f_{s_k}\right\|^2_{L_2(¥_k)}\right)dt. \qquad (19)$$

Аналітичний розв'язок прямої задачі ідентифікації. Слідуючи [12], з використанням інтегральних перетворення Фур'є, розв'язок прямої задачі параметричної ідентифікації (7), (2), (3), (15) матиме вигляд

$$U_{2_k}(t,z)=\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k-1}}^{l_k}\mathcal{H}_{k,k_1}(t-²,z,¶)U_{02_k}(¶)±_k d¶,\quad k=\overline{1,n+1} \qquad (20)$$

$$U_{1_k}(t,z)=\int_0^t\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k-1}}^{l_k}\mathcal{H}_{k,k_1}(t-²,z,¶)\left[D_{12_{k_1}}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_{k_1}}(²,¶)-U_{01_{k_1}}(¶)¢_+(²)\right]±_{k_1}d¶d²-$$
$$-\sum_{k_1=1}^{n}\int_0^t\mathcal{R}^1_{k,k_1}(t-²,z)\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{12_{s_1}}U_{2_{s_1}}(²,z)-D_{12_{s_2}}U_{2_{s_2}}(²,z)\right)d²;\ s_1,s_2\in\{k_1,k_1+1\},k=\overline{1,n+1} \qquad (21)$$

Розв'язок кожної k-ої крайової задачі функціональної ідентифікації (7), (2), (16) з використання скінченних інтегральних перетворень Фур'є та підстановки конкретних виразів функцій впливу після інтегрування та низки перетворень отримуємо у вигляді [12, 14] :

$$U_{2_{k_1}}(t,z)=\frac{2}{\Delta h}\sum_{m=1}^{\infty}\left[\begin{array}{l}U_{02_{k_1}}\left[1-(-1)^m\right]e^{-D_{22_k}\ {}^2_m t}-\\-\left((-1)^m U_{2l_{k_1}}-U_{2l_{k_1-1}}\right)\left(1-e^{-D_{22_{k_1}}\ {}^2_m t}\right)\end{array}\right]\frac{\sin\ _m\left(z-l_{k_1}\right)}{_m}$$

$$k_1=\overline{1,N_1+1}$$

$$U_{1_{k_1}}(t,z)=\frac{2}{\Delta h}\sum_{m=1}^{\infty}\left[\begin{array}{l}U_{01_{k_1}}\left[1-(-1)^m\right]e^{-D_{11_{k_1}}\ {}^2_m t}-\\-\left((-1)^m U_{1l_{k_1}}-U_{1l_{k_1-1}}\right)\left(1-e^{-D_{11_{k_1}}\ {}^2_m t}\right)-\\-D_{12_{k_1}}\ _m\int_0^t e^{-D_{11_{k_1}}\ {}^2_m(t-²)}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_{k_1}}(²,z)dz\end{array}\right]\frac{\sin\ _m\left(l_{k-1}-z\right)}{_m} \qquad (22)$$

$$_m=\frac{m®}{\Delta h},k_1=\overline{1,N_1+1}$$

5. Постановки та розв’язки неоднорідних спряжених крайових задач. Неоднорідна постановка початково-крайової задачі для приростів.

З урахуванням приростів коефіцієнтів дифузії $D^n_{sp_m} + \Delta D^n_{sp_m}$, на основі задачі (7), (2), (3), (15) отримаємо відповідні прирости v_{s_m} для концентрацій $U_{s_m} + v_{s_m}$. Нехтуючи членами другого порядку малості, для приростів v_{s_m} ,. отримаємо наступну початково-крайову задачу [16-18]:

$$\frac{\partial}{\partial t} v_{1_m}(t,z) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{11_m}\frac{\partial}{\partial z}v_{1_m}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{12_m}\frac{\partial}{\partial z}v_{2_m}\right) + \Delta D^n_{11_m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1_m} - \Delta D^n_{12_m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_m},\ z\in\Omega_{m_T},\ m=\overline{1,N+1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} v_{2_m}(t,z) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{22_m}\frac{\partial}{\partial z}v_{2_m}\right) + \Delta D^n_{22_m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_m},\ z\in\Omega_{m_T},\ m=\overline{1,N+1} \qquad (23)$$

з початковими умовами

$$v_{s_s}(t,z)_{t=0} = 0,\ \ z\in\Omega_m,\ \ m=\overline{1,N+1}, \qquad (24)$$

крайовими та інтерфейсними умовами між шарами плівок по z:

$$D_1\frac{\partial}{\partial z}v_{s_1}(t,z)_{z=0} = 0,\ D_{n+1}\frac{\partial}{\partial z}v_{s_{N+1}}(t,z)_{z=l} = 0,\ \ t\in(0,T), \qquad (25)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{11_m}v_{1_m}(t,z) + D^n_{12_m}v_{2_m}(t,z)\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{11_{m+1}}v_{1_{m+1}}(t,z) + D^n_{12_{m+1}}v_{2_{m+1}}(t,z)\right)\right)_{z=l_m} =$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial z}\left(\Delta D^n_{11_{m+1}}U_{1_{m+1}}(t,z) + \Delta D^n_{12_{m+1}}U_{2_{m+1}}(t,z)\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\Delta D^n_{11_m}U_{1_m}(t,z) + \Delta D^n_{12_m}U_{2_m}(t,z)\right)\right)_{z=l_m} \qquad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(D^n_{22_m}v_{2_m}(t,z) - D^n_{22_{m+1}}v_{2_{m+1}}(t,z)\right)_{z=l_m} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\Delta D^n_{22_{m+1}}U_{2_{m+1}}(t,z) - \Delta D^n_{22_m}U_{2_m}(t,z)\right)_{z=l_m},\ k=\overline{1,n},\ t\in(0,T)$$

Постановки неоднорідних спряжених крайових задач для параметричної і функціональної ідентифікації. З урахуванням викладених вище міркувань у відповідності з вихідною крайовою задачею, слідуючи [13, 15-18] для кожного наближення $D^n_{inter\ m}, D^n_{intra\ m}$, розв’язку $D_{inter\ m}, D_{intra\ m}$ вводимо до розгляду неоднорідну спряжену крайову задачу параметричної ідентифікації

$$\frac{\partial}{\partial t}¤_{1_m}(t,z) + D_{11_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}¤_{1_k}(t,z) = \left(U^n_{1_k} - f_{1_k}\right)\Big|_{z=¥_k}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}¤_{2_k}(t,z) - D_{12_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}¤_{1_k}(t,z) + D_{22_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}¤_{2_k}(t,z) = \left(U^n_{2_k} - f_{2_k}\right)\Big|_{z=¥_k},\ k=\overline{1,n+1} \quad . \qquad (27)$$

Умови при $t = T$:

$$¤_k(t,z)_{|t=T} = 0. \qquad (28)$$

Крайові та інтерфейсні умови по змінній z

$$\frac{\partial}{\partial z}¤_{s_1}\left(t,z\right)_{|z=0}=0;\ \frac{\partial}{\partial z}¤_{s_{N+1}}\left(t,z\right)_{|z=l}=0,\ t\in\left(0,T\right) \quad (29)$$

та інтерфейсні умови між тонкими шарами по z

$$\left[¤_{s_m}\left(t,z\right)-¤_{s_{m+1}}\left(t,z\right)\right]_{z=l_m}=0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{11_{s_1}}¤_{1_{s_1}}+D_{21_{s_1}}¤_{2_{s_1}}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{11_{s_2}}¤_{1_{s_2}}+D_{21_{s_2}}¤_{1_{s_2}}\right)\right)\Bigg|_{z=l_k}=0$$

(30)

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{22_k}¤_{2_k}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{22_{k+1}}¤_{2_{k+1}}\right)\right)\Bigg|_{z=l_k}=0,\ k=\overline{1,n},\ t\in\left(0,T\right).$$

З урахуванням того, що розв’язок прямої задачі необхідно мати у формі, зручній для реалізації процедури функціональної ідентифікації та при умові, що відомі сліди розв’язку для кожного досить тонкого k-го сегмента, $k=\overline{1,N+1}$, можна форматувати спряжену крайову задачу (27)- (30) в систему – однорідних крайових задач для послідовних тонких дифузійних наношарів (27), (28) та крайовими умовами першого роду

$$¤_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{z=l_{k-1}}=0;\ ¤_{s_k}\left(t,z\right)\Big|_{z=l_k}=0,\ s=\overline{1,2}. \quad (31)$$

Аналітичний розв’язок спряженої неоднорідної крайової задачі. Для побудови аналітичного розв’язку спряженої неоднорідної крайової задачі параметричної ідентифікації (27)-(30) застосовувався підхід, описаний вище для прямої задачі з використанням запровадженого інтегрального перетворення [12, 14]. В результаті отримуємо

$$¤_{1_k}\left(t,z\right)=\int_t^T\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}}\bar{\mathcal{H}}_{k,k_1}\left(t-²,z,¶\right)\left(\left(U_{1_{k_1}}^n-f_{1_{k_1}}\right)\Big|_{z=¥_{k_1}}\right)\left(²\right)±_{k_1}d¶$$

(32)

$$¤_{2_k}\left(t,z\right)=\int_t^T\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}}\bar{\mathcal{H}}_{k,k_1}\left(t-²,z,¶\right)\left(\left(U_{2_{k_1}}^n-f_{2_{k_1}}\right)\Big|_{z=¥_{k_1}}+D_{12_{k_1}}\frac{\partial^2}{\partial z^2}¤_{1_{k_1}}\left(²,¶\right)\right)±_{k_1}d¶,\ k,k_1=\overline{1,n+1}$$

Тут $\bar{\mathcal{H}}_{k,k_1}\left(t-²,z,¶\right)$ – спряжена матриця впливу Коші (головних розв’язків задачі), породжених неоднорідністю спряженої системи (27):

$$\bar{\mathcal{H}}_{k,k_1}\left(t,z,¶\right)=\sum_{m=1}^{\infty}e^{\ _m^2t}\frac{V_k\left(z,\ _m\right)V_{k_1}\left(¶,\ _m\right)}{\left\|V\left(z,\ _m\right)\right\|_1^2};k,k_1=1,\overline{n+1},$$

де необхідні структурні компоненти запровадженого інтегрального перетворення (система власних функцій $\left\{V_k\left(z,\ _m\right)\right\}_{m=0}^{\infty}$, основна тотожність та інтегральні оператори прямої і зворотної дії) на відміну від прямої задачі одержуються для такого гібридного диференціального оператора Лапласа

$$\mathcal{L}_n=\left[\sum_{k=1}^{n} D_{11_k}{}^{-}\left(z-l_{k-1}\right)^{-}\left(l_k-z\right)+D_{11_{n+1}}{}^{-}\left(z-l_n\right)\right]\frac{d^2}{dz^2}.$$

Математичним обґрунтуванням одержаного розв’язку є наступна теорема.

Теорема (*про існування і єдність розв’язку спряженої неоднорідної крайової задачі* (27)-(30)). Якщо виконуються умови розв’язності часових задач

$$\left[\frac{d}{dt}-\ {}_{m}^{2}\right]\text{¤}_{1_m}\left(t\right)=\left[U_{1_{k_1}}^{n}\left(\text{²},\text{¥}_{k_1}\right)-f_{k_1}\left(\text{²}\right)\right]_m,\qquad \text{¤}_{1m}\left(t\right)\Big|_{t=T}=0, \tag{33}$$

$$\left[\frac{d}{dt}-\ {}_{m}^{2}\right]\text{¤}_{2_m}\left(t\right)=\left[\left(U_{2_{k_1}}^{n}\left(\text{²},\text{¥}_{k_1}\right)-f_{2k_1}\left(\text{²}\right)\right)+D_{12_{k_1}}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\text{¤}_{1_{k_1}}\left(\text{²},z\right)\right]_m, \tag{34}$$

то обмежений розв’язок спряженої неоднорідної крайової задачі (27)-(30) існує і єдиний та визначається формулами (32).

Встановлення факту розв’язності неоднорідної спряженої крайової задачі, що є основним результатом доведення теореми, безпосередньо отримується шляхом застосування методики інтегрального перетворення Фур’є для багатоскладового неоднорідного середовища, викладеного нами в [12].

Розв’язок кожної k-ої задачі функціональної ідентифікації (27), (28), (31) з використання скінченних інтегральних перетворень Фур’є та підстановки конкретних виразів функцій впливу після інтегрування та низки перетворень матиме вигляд [12, 14]:

$$\text{¤}_{1_{k_1}}\left(t,z\right)=\frac{2}{\Delta l}\sum_{m=1}^{\infty}\left(\sin\ _m\left(z-l_{k_1}\right)\int_t^T e^{D_{11_k}^{n}\ {}_{m}^{2}\left(t-\text{²}\right)}\left(U_{1_{k_1}}^{n}\left(\text{²},\text{¥}_{k_1}\right)-f_{1k_1}\left(\text{²}\right)\right)d\text{²}\right)$$

$$\text{¤}_{2_{k_1}}\left(t,z\right)=\frac{2}{\Delta l}\sum_{m=1}^{\infty}\left(\sin\ _m\left(z-l_{k_1}\right)\int_t^T e^{D_{22_{k_1}}^{n}\ {}_{m}^{2}\left(t-\text{²}\right)}\left(\begin{array}{l}\left(U_{2_{k_1}}^{n}\left(\text{²},\text{¥}_{k_1}\right)-f_{2k_1}\left(\text{²}\right)\right)+\\+D_{12_{k_1}}\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\text{¤}_{1_{k_1}}\left(\text{²},z\right)\end{array}\right)d\text{²}\right), \tag{35}$$

$$k_1=\overline{1,N_1+1}$$

З метою підвищення ефективності регуляризаційного процесу, використовуваного для ідентифікації, формули вирази (22), (35) перетворюються до аналітичних виразів.

6. Формули для компонентів ґрадієнтів

Слідуючи [16-20], отримуємо формули, що встановлюють зв’язок між прямою та спряженою задачами. Запишемо основні рівняння задачі для приростів (23) в операторній формі

$$\mathcal{L}v_{s_m}(t,z)=\mathrm{X}_{s_m}v_{s_m}\in\Omega_{mT}\text{ , де}$$

$$\mathcal{L}_1=\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{11_m}^{n}\frac{\partial}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{12_m}^{n}\frac{\partial}{\partial z}v_{2_m}\right),\ \mathcal{L}_2=\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{22_m}^{n}\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\mathrm{X}_{1_m}(t,z)=\Delta D_{11_m}^{n}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1_m}-\Delta D_{12_m}^{n}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_m},\ \mathrm{X}_{2_m}(t,z)=\Delta D_{22_m}^{n}\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2_m},$$

$$m = \overline{1, n+1}.$$

Розглянемо $\mathcal{L}_s$ як оператори, що відображають Ω_{mT} в простір L_2, визначивши скалярний добуток для пар елементів $\mathcal{L}_s v_{s_m}, ¤_{s_m} \in L_2$:

$$\left(\mathcal{L}_s v_{s_m}, ¤_{s_m}\right) = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\Omega_m} ¤_{s_m}\left(t,z\right) \mathcal{L}_s v_{s_m}\left(t,z\right) dz \,, \tag{36}$$

де $¤_{s_m}(t,z)$ гладкі функції відповідно в $\bar{\Omega}_{mT}$. Перетворивши приріст функціонала нев'язки

$$\Delta J_s\left(t, D_{\text{sp}_\text{m}}\right) = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} v_{s_m}(t,z) e_{s_m}(t) ¢\left(z - l_m\right) dz + O(\max_m \left|\Delta U_{s_m}\right|) \,,$$

зробивши заміну $v_{s_m} = \mathcal{L}_s^{-1} \mathrm{X}_{\text{s}_\text{m}}$ із введенням спряженого оператора отримаємо

$$\Delta J_s\left(t, D_{\text{sp}_\text{m}}\right) = \sum_{m-1}^{n+1} \left(\left(\mathrm{X}_{s_m}(t,z), \mathcal{L}_s^{-1*}\left[e_{s_m}(t) ¢\left(z - l_m\right)\right]\right) + O(\max_m \left|\Delta U_{s_m}\right|\right). \tag{37}$$

Використовуючи рівність $\mathcal{L}^{-1*}\left[e_{s_m}(t) ¢\left(z - l_m\right)\right] = ¤_{s_m}$ в силу тожності Лаґранжа $\left(\mathcal{L}_s v_{s_m}, ¤_{s_m}\right) = \left(v_{s_m}, \mathcal{L}_s^{*} ¤_{s_m}\right)$, що має місце для (36) [19, 20], та розкриваючи в (37) $\mathrm{X}_{s_m}(t,z)$, одержуємо формулу зв'язку між прямою і спряженою задачами, що є визначає структуру виразів компонентів ґрадієнта функціоналу

$$\Delta J_2\left(t, D_{2\text{p}_\text{m}}\right) = \sum_{m=1}^{n+1}\left[\left(¤_{2_m}(t,z), \mathrm{X}_{2_m}(t,z)\right) + O(\max_m \left|\Delta U_{2_m}\right|)\right] = \sum_{m=1}^{n+1}\left(\begin{array}{l}\left(¤_{2_m}(t,z), \Delta D_{22_\text{m}}^{n} \dfrac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}(t,z)\right) + \\ + O(\max_m \left|\Delta u_m\right|)\end{array}\right), \tag{38}$$

$$\Delta J_1\left(t, D_{1\text{p}_\text{m}}\right) = \sum_{m=1}^{n+1}\left[\left(¤_{1_m}(t,z), \mathrm{X}_{1_m}(t,z)\right) + O(\max_m \left|\Delta U_{2_m}\right|)\right] = \sum_{m=1}^{n+1}\left(\begin{array}{l}\left(¤_{1_m}(t,z), \Delta D_{11_\text{m}}^{n} \dfrac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_m} - \Delta D_{12_\text{m}}^{n} \dfrac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}\right) + \\ + O(\max_m \left|\Delta u_m\right|)\end{array}\right). \tag{39}$$

Продиференціювавши (38) по ΔD_{22_m}, а (39) по ΔD_{11_m} та ΔD_{12_m} та розкривши скалярний добуток, одержуємо аналітичні вирази для ґрадієнтів функціоналу-нев'язки для компонентів коефіцієнтів дифузії D:

– для параметричної ідентифікації:

$$\nabla J_{D_{22}}\left(t\right) = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} ¤_{2m}(t,z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}(t,z) dz \,,$$

$$\nabla J_{D_{11}}\left(t\right) = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} ¤_{1m}(t,z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_m}(t,z) dz \,,$$

$$\nabla J_{D_{12}} = -\sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} \text{¤}_{1m}(t,z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2m}(t,z)dz\,. \qquad (40)$$

– для функціональної ідентифікації з врахуванням вигляду функціоналу-нев'язки (19):

$$\nabla J_{D_{22k_1}}(t) = \text{¤}_{2k_1}(t,\text{¥}_{k_1})\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2k_1}(t,\text{¥}_{k_1}),\ \nabla J_{D_{11k_1}}(t) = \text{¤}_{1k_1}(t,\text{¥}_{k_1})\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{1k}(t,\text{¥}_{k_1}),$$

$$\nabla J_{D_{12k_1}}(t) = -\text{¤}_{1k_1}(t,\text{¥}_{k_1})\frac{\partial^2}{\partial z^2}U_{2k_1}(t,\text{ª}_{k_1}),\ k_1 = \overline{1, N_1+1} \qquad (41)$$

Регуляризаційний вираз для $n+1$-го кроку визначення ідентифікуючої функциональної залежності. Слідуючи [16-19], з використанням методу мінімальних похибок, для визначення функціональної залежності ідентифікації компоненти коефіцієнта дифузії $D_{sp_{k_1}}^{n+1}$ від часу для кожного m-го шару $m=\overline{1,N+1}$, отримаємо наступний регуляризаційний вираз для наступного $n+1$-го кроку ідентифікації:

$$D_{sp_{k_1}}^{n+1}(t) = D_{sp_{k_1}}^{n}(t) - \nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^{n}(t)\frac{\left\|U_{s_{k_1}}\left(t,\text{¥}_{k_1},D_{sp_{k_1}}\right)-f_{s_{k_1}}\right\|^2}{\left\|\nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^{n}(t)\right\|_{\text{¥}_{k_1}}^2},\ t\in(0,T), s,p=\overline{1,2}; k_1=\overline{1,N_1} \quad (42)$$

7. Результати числового моделювання та ідентифікації

Результати числового аналізу та ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії для двох компонент (**Fe** і **Dy**) з використанням запропонованої моделі функціональної ідентифікації подані на рис. 2-8 для різних дифузійних зрізів, що представляють поверхні спостереження (¥_{k_1}) із загальною тривалістю спостереження 48 год. Досліжувна товщина наномультикомпозиту складала до 20 *нм*. Розглядалось чотири наношари по 5 нм кожен. В якості даних експериментальних спостережень використовувались результати (рис. 2), для багатокомпонентних (Fe/Dy) наноплівок отримані в лабораторії фізики матеріалів Університету м. Руан (Франція) [2-4].

На рис. 3 (діаграма зліва) для поверхні спостереження, що відповідає просторовому зрізу по товщині мультикомпозиту для координаті товщини z =7 nm, показаний процес еволюції функціональної залежності в часі коефіцієнта диффузії $D_{11_{k_1}}^{n}$, відновлений згідно регуляризаційної процедури ідентифікації, визначеною формулою (42). Тут подані групи ітерацій, що найсуттєвішим чином впливають на процес збіжності модельного розв'язку $U_{1_{k_1}}$ до його експериментального сліду $f_{1_{k_1}}(t,\text{¥}_{k_1})$, візуалізація якого показана на наступній діаграмі (рис. 4). В якості початкового наближення для ідентифікації функціональної залежності компоненти коефіцієнтf дифузії взято

$D^{0}_{11_m}(t) = 1.48\times10^{-7}$ м/с^2. По мірі прохождения ітерацій функціональна залежність $D^{n}_{11_{k_1}}(t)$ змінюється по всьому часовому діапазону. Для повноти картини тестування виконано понад 2500 ітерацій, розбитих на групи. Для останньої групи ітерацій, як видно з поданих діаграм, досягається достатньо стійка картина профілю залежності $D^{n}_{11_{k_1}}(t)$, що забезпечує максимальне наближення модельного розв'язку $U^{n}_{11_{k_1}}(t,¥_{k_1})$ до експериментального сліду $f_{k_1}(t)$.

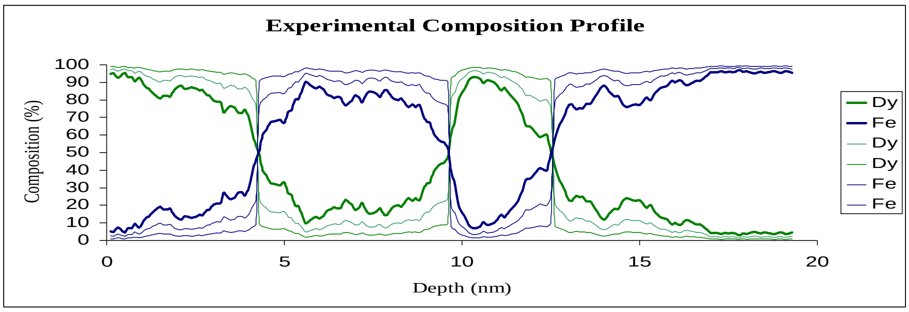


Рис. 2. Експериментальні концентраційні Fe/Dy профілі

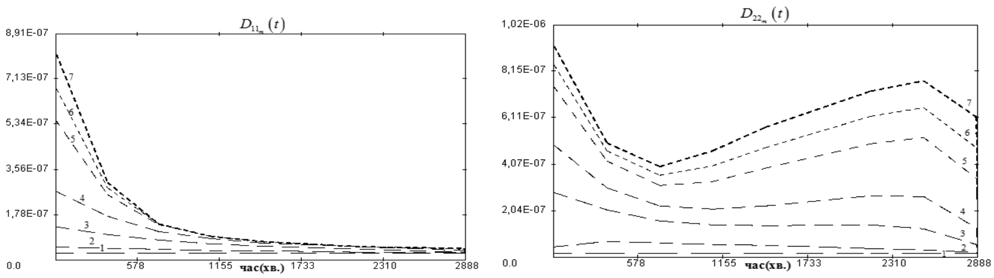


Рис. 3. Відновлення функціональної залежності компонентів D_{11_m}, D_{22_m} *коефіцієнта дифузії від часу на кожній ітерації [z = 7nm]: 1) початкове наближення , ітерації: 2) 100-та, 3) 500-та, 4) 1000-та, 5) 2500-та, 6) 3500-та, 7) 4500-та; 8) експеримент*

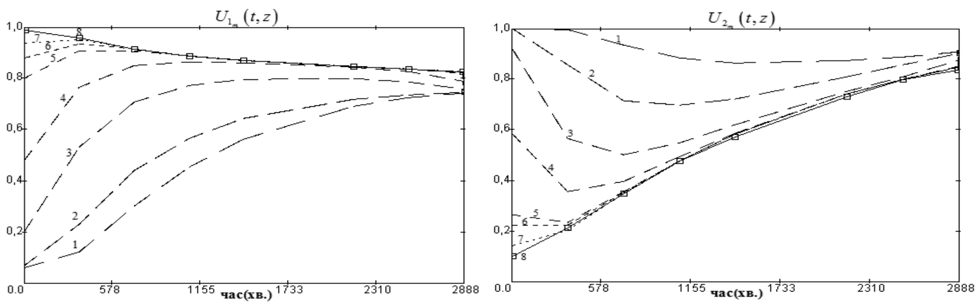


Рис. 4. Ітераційне наближення модельних концентраційних профілів U_{1_m} *та* U_{2_m} *до експериментального [z = 7nm]: 1) початкове наближення , ітерації: 2) 100-та, 3) 500-та, 4) 1000-та, 5) 2500-та, 6) 3500-та, 7) 4500-та; 8) експеримент*

Як видно з рис. 4, наближення кривих модельного розподілу концентрацій $U_{1_{k_1}}$ до кривої експериментального сліду здійснюється знизу вверх і забезпечує достатньо повну картину збіжності. Рис. 5 демонструє еволюцію зменшення значення функціоналу нев'язки між значеннями модельного концентраційного розподілу $U^{n}_{11_{k_1}}(t,¥_{k_1})$ і сліду на кожній ітерації. Практично уже на сьомій групі ітерацій спостерігається зменшення нев'язки до нуля.

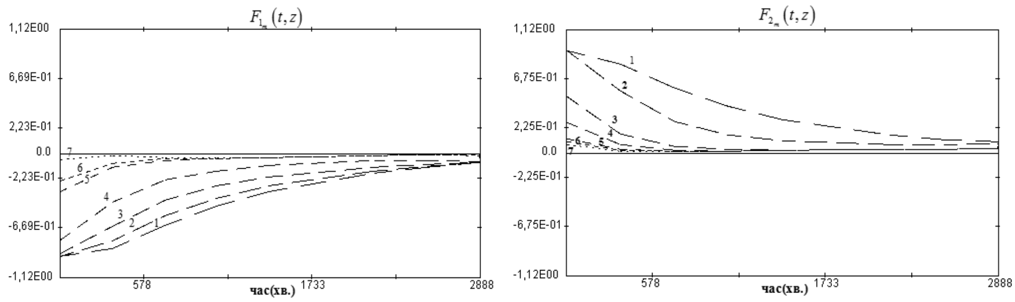


Рис. 5. Еволюція зменшення нев'язок на кожній ітерації

Діаграми справа на рис. 3-4 демонструють аналогічні результати ідентифікації, отримані для другої дифундованої компоненти для цієї ж поверхні спостереження (z = 7nm). В противагу до $U_{2_{k_1}}$ (рис. 4), $U_{1_{k_1}}$ демонструє наближення кривих модельного розподілу концентрацій зверху до кривої експериментального сліду, що також забезпечую достатню ефективність збіжності регуляризаційного процесу. Аналогічні результати отримані для інших поверхонь спостереження. Зокрема, на рис. 6-7 приведені подібні результати ідентифікації для поверхонь спостереження, що відповідають рівням товщини шару досліджуваного мультикомпозиту при z = 2.5nm.

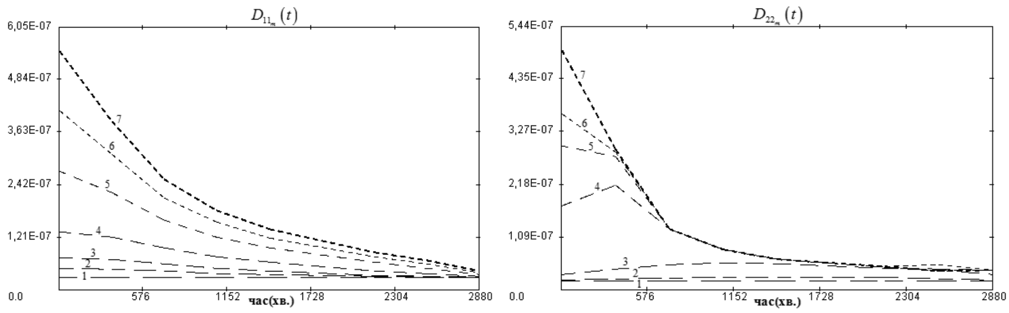


Рис. 6. Відновлення функціональної залежності компоненти коефіцієнта дифузії D_{11_m} та D_{22_m} від часу на кожній ітерації [z = 2,5 nm]: 1) початкове наближення , ітерації: 2) 100-та, 3) 500-та, 4) 1000-та, 5) 2500-та, 6) 3500-та, 7) 4500-та; 8) експеримент

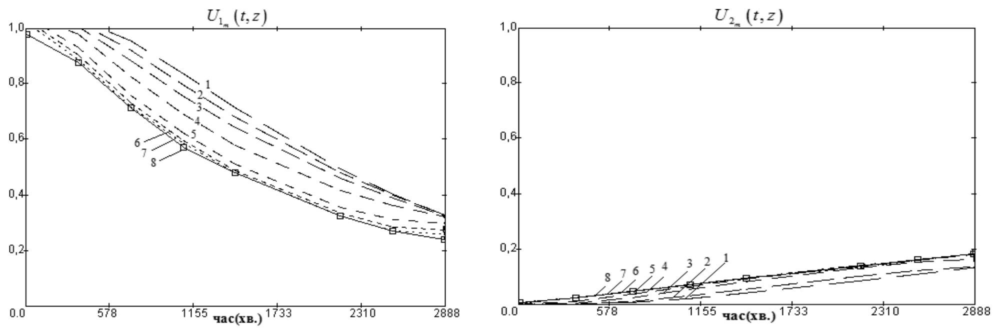
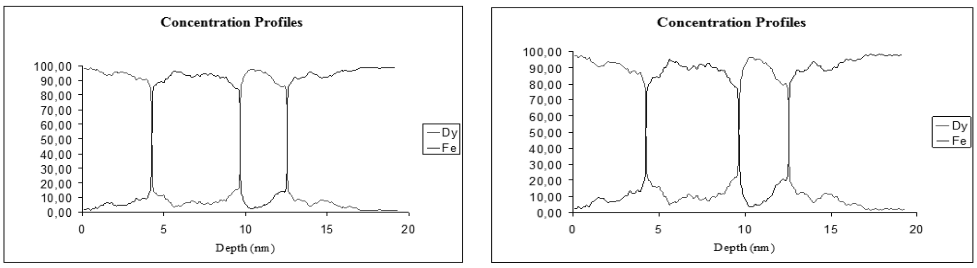


Рис. 7. Ітераційне наближення модельних профілів U_{1_m} , U_{2_m} *до експериментальних слідів*

На рис. 8 показані відтворені профілі концентрацій для дифундованих компонент Fe і Dy з використанням відновлених розподілів коефіцієнтів дифузії, що водночас відображають еволюцію структури шарів наномультикомпозиту.



а) час 24 год *б) час 36 год*

Рис. 8. Відтворені концентраційні Fe/Dy профілі

8. Висновки

Для моделей дифузійного масопереносу в неоднорідних мультикомпозитних середовищах обгрунтовані постановки прямих і зворотніх крайових задач функціональної ідентифікації. Реалізована методика функціональної ідентифікації компонентів коефіцієнтів дифузії з використанням методології оптимального керування станом складними багатокомпонентними системами, інтегральних перетворень та градієнтних методів. Виконано відновлення функціональних залежностей від часу компонентів коефіцієнтів дифузії для Fe/Dy-нано мультикомпозиту для різних поверхонь спостережень. Досліджено еволюцію функціонала нев’язки та виконана перевірка моделей на адекватність.. Отримані результати можуть бути використані: для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних нанопористих системах, дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Cadel E., Lemarchand D., Chambreland S., Blavette D. Atom probe tomography investigation of the microstructure of superalloys №18 // Acta materialia, volume 50, Issue 5, 2002, p. 957-966.
2. Tamion A., Cadel E., Bordel C., Blavette D. Three-dimensional atom probe investigation of Fe/Dy myltilayer. *Scripta Materialia*, *Volume 54*, *Issue 4*, *2006*, *671-675.*
3. Tamion A., Ott F., Berche P.-E.,Talbot E., Bordel C., Blavette D. Magnetization depth profile of (Fe/Dy) multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, *Volume 320, Issue 21*, *2008*, *2650-2659.*
4. Tamion A., Jurshek J., Bordel C. Investigation of (Fe/Dy) multilayers by ^{57}Fe Mössbauer spectrometry. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, *Volume 313, Issue 2*, *2007*, *306-311*.
5. Tamion A., Cadel E., Bordel C., Blavette D. Influence of the interface local chemistry on the magnetic anisotropy of (Fe/Dy) multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, *Volumes 290-291*, *Part 1*, *2005*, *238-241*.
6. Mehrer H. Diffusion in Solids/ Mehrer H. – Springer, 2007. – 650 p.
7. Kärger J. Diffusion fundamentals / Kärger J., Grinberg F., Heitjans P. – Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. – 615 p.
8. Дейнека В.С. Параметрична ідентифікація кінетичних параметрів дифузії в багатошарових неоднорідних Fe/Dy-наномультикомпозитах/ Дейнека В.С., Петрик М.Р. // Математичне та комп’ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: Зб. наук. праць / Інститут кібернетики ім. В. Глушкова НАН України, Кам’янець-Подільський національний університет ім. І. Огієнка, 2011. – Вип. 5. – С. 85-111.
9. Petryk M. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure / Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. // Diffusion Fundamentals. – 2007. – 4. – P. 11.1–11.23.
10. Petryk M. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 / Petryk M., Fraissard J., Leclerc S., Canet D. // Catalysis Today, Elsevier. – 2008 – 139(3). – P. 234-240.
11. Петрик М.Р., Фрессард Ж. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопоритых частиц / Петрик М.Р., Фрессард Ж. // Пробл. управления и информатики. − 2008. − № 5.
12. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення Фурє, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах / Ленюк М.П., Петрик М.Р. К. Наукова думка, 2000. − 372 с.
13. Deineka V.S. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system / Deineka V.S., Petryk M.R., Fraissard J. Cybernetics and System Analysis, Springer New York**,** Vol. 47, Number 5**,** (2011), P. 705-723.

14. Петрик М.Р. Математическое моделирование масопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и систем. анализ. – 2007. – № 1. – С. 114-134.
15. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Михалик Д.М. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах / Дейнека В.С., Петрик М.Р., Михалик Д. М. // Пробл. управления и информатики. − 2011. − № 2. – С. 12-25.
16. Дейнека В.С. Оптимальное управление неоднородными распределенными системами / Дейнека В.С., Сергиенко И.В. – Киев: Наукова думка, 2003. – 506 с.
17. Sergienko I.V., Deineka V.S. Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions. – New York: Kluwer Academic Publishers. – 2005. – 400 p.
18. Сергиенко И.В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / Сергиенко И.В., Дейнека В.С. – Киев, Наукова думка, 2009. – 638 с.
19. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов. – М.: Машиностроение, 1988. – 280 с.

Надійшла – 20.01.2012.