

чки зору економії грошових ресурсів на придбання спеціалізованих пристроїв для використання ресурсоемних продукційних систем. Проведено наступні дослідження: ринку планшетних пристроїв, найширше представлені в Україні; оболонки продукційних систем, які можуть застосовуватися на мобільних пристроях; більш детально, з виділенням значимих характеристик, розглянуто вільно поширювані обгортки продукційних систем. Описано основні класи алгоритмів співставлення зі зразком. Представлені результати досліджень щодо доцільності застосування Rete та TREAT для загальних випадків в прикладних задачах.

**Ключові слова:** *продукційні системи, співставлення зі зразком, портативні пристрої.*

Отримано: 18.03.2015

УДК 519.6:539.3

**М. Р. Петрик**, д-р фіз.-мат. наук, професор

Тернопільський національний технічний університет  
імені Івана Пулюя, м. Тернопіль

### **МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОМУЛЬТИКОМПОЗИТАХ ГРАДІЄНТНИМИ МЕТОДАМИ ТА ІНТЕГРАЛЬНИМИ ПЕРЕТВОРЕННЯМИ**

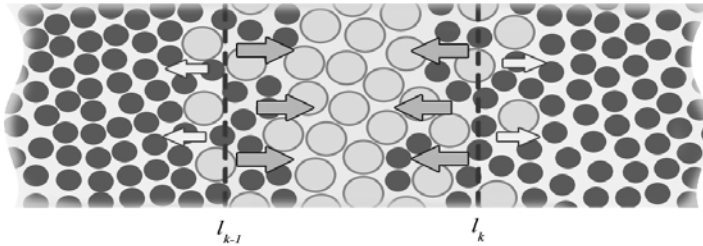
Розроблена та обґрунтована на основі теорії оптимального керування станами багатокомпонентних систем, інтегральних перетворень Фур'є та Лапласа методика моделювання та функціональної ідентифікації параметрів дифузії для неоднорідних наномультікомполімерів, отримані аналітичні вирази градієнтів функціоналів нев'язок, компонентами яких є побудовані аналітичні розв'язки прямої і спряженої вихідної неоднорідної крайової задачі переносу та спряженої їй за Лагранжем задачі, виконано відновлення коефіцієнтів дифузії для різних поверхонь спостережень.

**Ключові слова:** *масоперенос, математична модель, функціональна ідентифікація, інтегральне перетворення, неоднорідні середовища, градієнт функціонала невязки.*

**Вступ.** Дослідження дифузійних процесів в багатошарових нанокполімерів і тонких наноплівках відкриває перспективи створення на базі матеріалів з відомими властивостями матеріалів та середовищ з новими властивостями (нові явища провідності, дифузійно-адсорбційні ефекти тощо), виникнення яких головно пов'язано зі структурними змінами середовищ при агрегуванні наночастинок з різними властивостями [1–4; 15]. В цій праці на прикладі задач дифузії в згущених (Fe/Dy) магнітних багатошарових наноплівках, утворених агрегацією наночастинок з високопровідними і низькопровідними матеріалами (ферромагнетики і

рідкоземельні елементи — диспрозіум, тербій), розроблена на основі теорії оптимального керування станами багатокомпонентних систем [5–11; 17–18], інтегральних перетворень Фур'є та Лапласа [12–13] методика функціональної ідентифікації параметрів дифузії для неоднорідних наномультикомпозитів, отримані аналітичні вирази градієнтів функціоналів нев'язок [8; 14] та виконано відновлення коефіцієнтів дифузії для різних поверхонь спостережень.

**1. Неоднорідна математична модель з урахуванням двосторонніх градієнтних взаємодій в елементах мультикомпозиту.** Враховучи [1; 3], для мультикомпозитного наносередовища з  $n$  подвійних наношарів двох середовищ з різними властивостями, для яких дифузія атомів компонентів 1 (Fe) і 2 (Du) між суміжними наношарами, викликана наявністю змінних в часі градієнтів концентрацій на інтерфейсних межах (рис. 1), математична модель такого переносу може бути описана так.



**Рис. 1.** Схема градієнтної взаємодії компонентів між суміжними наношарами середовища

На областях

$$\Omega_{k_T} = (0, T) \times \Omega_k,$$

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

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U_{1_k}(t, z) &= D_{11_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_k} - D_{12_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_k}, \\ \frac{\partial}{\partial t} U_{2_k}(t, z) &= -D_{21_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_k} + D_{22_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_k}. \end{aligned} \quad (1)$$

Початкові умови:

$$U_{1_k}(t, z) \Big|_{t=0} \equiv U_{01_k} = \begin{cases} 0, & \theta_{1_k}, \\ 1, & \theta_{2_k}, \end{cases} \quad U_{2_k}(t, z) \Big|_{t=0} \equiv U_{02_k} = \begin{cases} 1, & \theta_{1_k}, \\ 0, & \theta_{2_k}. \end{cases} \quad (2)$$

$$\theta_{1_k} = \left\{ z \in (l_{k-1}, l_k), k = 2i + 1; i = \overline{0, \lfloor n/2 \rfloor} \right\},$$

$$\theta_{2_k} = \left\{ z \in (l_k, l_{k+1}), \quad k = 2i + 2; i = \overline{0, [n/2] - 2} \right\}.$$

Крайові та інтерфейсні умови між тонкими шарами по  $z$

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

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

$$\left( D_{s_1} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} U_{1_{s_1}}(t, z) \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{2_{s_1}}(t, z) \end{bmatrix} - D_{s_2} \begin{bmatrix} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{1_{s_2}}(t, z) \\ \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s_2}}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Bigg|_{z=l_k} = 0, \quad (4)$$

$$D_k = \begin{bmatrix} D_{1k} & -D_{12k} \\ -D_{21k} & D_{22k} \end{bmatrix}, \quad k = \overline{1, n},$$

$$\text{де } \begin{cases} s_1 = k, s_2 = k + 1; & k = 2i + 1; i = \overline{0, [n/2]} \\ s_1 = k + 1, s_2 = k; & k = 2i + 2; i = \overline{0, [n/2] - 2} \end{cases}$$

З позиції практичних застосувань є важливими випадки, коли  $D_{1k} = 0$  або  $D_{2k} = 0$ , що відповідає кінетиці взаємодії двох елементів з протилежними показниками параметрів: «активної» (високий) і «пасивної» компоненти (низький) і приводить до нових фізичних ефектів [1; 2]. Дифузія в такій системі взаємодій «активний елемент» ( $Fe$ ) — «пасивний елемент» ( $Dy$ ) визначатиметься обмеженою проникністю «пасивного» елемента в зону «активного» та значною проникністю «активного» елемента в зону «пасивного».

**Побудова розв'язку.** В припущенні, що задані та шукані функції є оригіналами за Лапласом стосовно  $t$ , в зображенні за Лапласом [12] для  $U_{i_k}^*(p, z) \equiv L[U_{i_k}] = \int_0^\infty U_{i_k}(t, z) e^{-pt} dt, i = \overline{1, 2}$ , отримаємо за-

дачу про конструкцію обмеженого в  $I_n = \bigcup_{k=1}^{n+1} \Omega_k$  розв'язку системи диференціальних рівнянь переносу

$$\begin{bmatrix} D_{11k} \frac{d^2}{dz^2} - p & -D_{12k} \frac{d^2}{dz^2} \\ -D_{21k} \frac{d^2}{dz^2} & D_{22k} \frac{d^2}{dz^2} - p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1_k}^* \\ U_{2_k}^* \end{bmatrix} = 0 \quad (5)$$

з крайовими та інтерфейсними умовами між тонкими шарами по  $z$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ U_{1_k}^* (p, z) \right]_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} \left[ U_{2_k}^* (p, z) \right]_{z=l} = 0, \quad (6)$$

$$\left[ U_{s_k}^* (p, z) - U_{s_{k+1}}^* (p, z) \right]_{z=l_k} = 0, \quad s = \overline{1, 2},$$

$$\left( \left( \theta_k \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( D_k \left[ U_{1_k}^* (p, z) \right] \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{k+1} \left[ U_{1_{k+1}}^* (p, z) \right] \right) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, k = \overline{1, n}. \quad (7)$$

Встановлюється, що система (5) є строго параболічною за Петровським [15] при умові  $D_{11_k} D_{22_k} - D_{12_k} D_{21_k} > 0$  та при використанні підходу, описаного в [13] зводиться до диференціальне рівняння четвертого порядку

$$\left( D_{11_k} D_{22_k} - D_{12_k} D_{21_k} \right) \frac{d^4 w_k^*}{dr^4} - \left( D_{11_k} + D_{22_k} \right) p \frac{d^2 w_k^*}{dr^2} + p^2 w_k^* = \mathcal{F}_k^* (p), \quad i = \overline{1, 2},$$

де

$$\mathcal{F}_i^* = (D_{ss_i} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + p) U_{0i}^* (p) - D_{si_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{0i}^* (p) \equiv p \left( \frac{D_{ss_k}}{p} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 1 \right) U_{0i} - D_{si_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{0s}.$$

Розв'язок неоднорідної крайової задачі (5)–(7) будемо з використанням методу функцій впливу Коші

$$U_{i_k}^* (p, z) = \mathcal{L}_i^* \left[ w_k^* (p, z) \right], \quad \mathcal{L}_i^* = \left( D_{ss_k} - D_{is_k} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + p$$

$$w_k^* (p, z) = A_{1_k} ch \varphi_{1_k} z + A_{2_k} sh \varphi_{1_k} z + A_{3_k} ch \varphi_{2_k} z + A_{4_k} sh \varphi_{2_k} z +$$

$$+ \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{E}_k^* (p, z, \xi) \mathcal{F}_k^* (p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n+1}. \quad (9)$$

Тут  $ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} z$ ,  $sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} z$ ,  $ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} z$ ,  $sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} z$ ,  $k = \overline{1, n+1}$  складають фундаментальну систему розв'язків однорідного рівняння (8),

$$\varphi_k = \beta_i / \sqrt{p}, \quad i = \overline{1, 2},$$

$$\beta_{1,2_k} = \sqrt{\frac{\left( D_{11_k} + D_{22_k} \right) \pm \sqrt{\left( D_{11_k} - D_{22_k} \right)^2 + 4 D_{12_k} D_{21_k}}}{2 \left( D_{11_k} D_{22_k} - D_{12_k} D_{21_k} \right)}} \sqrt{p}$$

корені характеристичного многочлена

$$\left(D_{11_k} D_{22_k} - D_{12_k} D_{21_k}\right) \beta^4 - \left(D_{11_k} + D_{22_k}\right) p \beta^2 + p^2 = 0$$

диференціальної системи (5).

Функції Коші  $\varepsilon_k^*(p, z, \xi)$  будуються у вигляді [13]

$$\begin{aligned} & \varepsilon_k^*(p, z, \xi) = \\ & = \begin{cases} \varepsilon_k^{-*} = C_{1_k}^1 ch\varphi_{1_k} z + C_{2_k}^1 sh\varphi_{1_k} z + C_{3_k}^1 ch\varphi_{2_k} z + C_{4_k}^1 sh\varphi_{2_k} z; l_{k-1} < z < \xi < l_k, \\ \varepsilon_k^{+*} = C_{1_k}^2 ch\varphi_{1_k} z + C_{2_k}^2 sh\varphi_{1_k} z + C_{3_k}^2 ch\varphi_{2_k} z + C_{4_k}^2 sh\varphi_{2_k} z; l_{k-1} < \xi < z < l_k, \end{cases} \end{aligned} \quad (10)$$

де невідомі коефіцієнти  $C_k^s$ ,  $k = \overline{1, 4}$ ,  $s = \overline{1, 2}$ , визначаються із умов [13]

$$\begin{aligned} & \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0, \\ & \frac{d}{dz} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0, \\ & \frac{d^2}{dz^2} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d^2}{dz^2} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0, \\ & \frac{d^3}{dz^3} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d^3}{dz^3} \varepsilon_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 1 \end{aligned} \quad (11)$$

та додаткових однорідних умов, визначених умовами вихідної крайової задачі

$$\begin{aligned} & \varepsilon_k^{+*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, \frac{d}{dz} \varepsilon_k^{+*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, \varepsilon_k^{-*} \Big|_{z=l_k-0} = 0, \\ & \frac{d}{dz} \varepsilon_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, k = \overline{1, n}, \frac{d}{dz} \varepsilon_1^{+*} \Big|_{z=0} = 0, \frac{d}{dz} \varepsilon_{n+1}^{-*} \Big|_{z=l_{n+1}} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Із чотирьох умов (11), розв'язуючи систему рівнянь четвертого порядку, отримуємо

$$\begin{aligned} & C_{1_k}^2 - C_{1_k}^1 = \frac{sh(\varphi_{1_k} \sqrt{p\xi})}{\varphi_{1_k} (\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{3/2}}, \quad C_{2_k}^2 - C_{2_k}^1 = -\frac{ch(\varphi_{1_k} \sqrt{p\xi})}{\varphi_{1_k} (\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{3/2}}, \\ & C_{3_k}^2 - C_{3_k}^1 = \frac{sh(\varphi_{2_k} \sqrt{p\xi})}{\varphi_{2_k} (\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{3/2}}, \quad C_{4_k}^2 - C_{4_k}^1 = -\frac{ch(\varphi_{2_k} \sqrt{p\xi})}{\varphi_{2_k} (\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{3/2}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Тут  $C_{1_1}^1 = 0$ ,  $C_{3_1}^1 = 0$ ,  $C_{3_{n+1}}^2 = 0$ ,  $C_{4_{n+1}}^2 = 0$ .

Підставляючи (13) в (11) для  $k$ -го шару отримуємо систему рівнянь четвертого порядку для визначення  $C_{1_k}^2, C_{2_k}^2, C_{3_k}^2, C_{4_k}^2$

$$\begin{aligned}
 C_{1_k}^2 ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{2_k}^2 sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{3_k}^2 ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{4_k}^2 sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} = \\
 = \frac{1}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=1}^2 \frac{sh\varphi_{i_k} (\xi - l_{k-1})}{\varphi_{i_k}}, \\
 C_{1_k}^2 \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{2_k}^2 \varphi_{1_k} \sqrt{p} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{3_k}^2 \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} + \\
 + C_{4_k}^2 \varphi_{2_k} \sqrt{p} ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} = - \frac{1}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=1}^2 ch\varphi_{i_k} (\xi - l_{k-1}), \\
 C_{1_k}^2 ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_k} + C_{2_k}^2 sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_k} + C_{3_k}^2 ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_k} + C_{4_k}^2 sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_k} = 0, \\
 C_{1_k}^2 \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_k} + C_{2_k}^2 \varphi_{1_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_k} + \\
 + C_{3_k}^2 \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_k} + C_{4_k}^2 \varphi_{2_k} ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_k} = 0.
 \end{aligned} \tag{14}$$

В результаті розв'язання системи (14) отримуємо

$$\begin{aligned}
 C_{s_k}^2 = \frac{(-1)^{s-1}}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{3}{2}}} \sum_{s=1}^2 \left( \Gamma_k^{2i} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) ch\varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) + \right. \\
 \left. + \Gamma_k^{1i} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) \frac{sh\varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1})}{\varphi_{i_k}} \right),
 \end{aligned}$$

$$\Gamma_{1_k}^{11} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} - \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{24} + \varphi_{2_k} ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{23},$$

$$\Gamma_{1_k}^{12} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} - ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{24} + sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{23},$$

$$\Gamma_{1_k}^{21} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{34} - \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} + \varphi_{2_k} ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{13},$$

$$\Gamma_{1_k}^{22} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{34} - sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} + sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{13},$$

$$\Gamma_{2_k}^{11} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{24} - \varphi_{1_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} + \varphi_{2_k} ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{12},$$

$$\Gamma_{2_k}^{12} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{24} - sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{14} + sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{12},$$

$$\Gamma_{2_k}^{21} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{23} - \varphi_{1_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{13} + \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{12},$$

$$\Gamma_{2_k}^{22} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{23} - sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{13} + ch\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} \Delta_{12},$$

$$\Delta_{12} = \varphi_{1_k}, \Delta_{34} = \varphi_{2_k},$$

$$\Delta_{13} = \varphi_{2_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k - \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k,$$

$$\Delta_{14} = \varphi_{2_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k - \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k$$

$$\Delta_{23} = \varphi_{2_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k - \varphi_{1_k} ch\varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k.$$

В результаті функція Коші однозначно визначена і має вигляд

$$\varepsilon_k^*(p, z, \xi) = \frac{1}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{3}{2}}} \times$$

$$\times \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\varphi_i} \left\{ \begin{array}{l} sh\varphi_k \sqrt{p} (z - \xi) + N_{i_k}(p, z) \left( sh\varphi_k \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) + \frac{\varphi_k}{\varphi_{2_k}} sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) \right) + \\ + N_{2_k}(p, z) (ch\varphi_{1_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) + ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1})); l_{k-1} < z < \xi < l_k, \\ sh\varphi_k \sqrt{p} (\xi - z) + N_{i_k}(p, \xi) \left( sh\varphi_k \sqrt{p} (z - l_{k-1}) + \frac{\varphi_k}{\varphi_{2_k}} sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1}) \right) + \\ + N_{2_k}(p, \xi) (ch\varphi_{1_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1}) + ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1})); l_{k-1} < \xi < z < l_k. \end{array} \right.$$

Тут  $N_{s_k}(p, z) = \Gamma_{ik}^{s1} ch\varphi_{i_k} \sqrt{p} z - \Gamma_{ik}^{s2} ch\varphi_{i_k} \sqrt{p} z$ ,  $s = \overline{1, 2}$ .

Крайові та інтерфейсні умови (6), (7) дають систему рівнянь  $(4n+2)$ -го порядку для визначення невідомих констант  $A_1, A_2,$

$A_k, B_k, A_{2_k}, B_{2_k}, k = \overline{1, n+1}$  в (9),

$$\left. \begin{array}{l} v_{s_{1m}}^{1,1}(\varphi_{1_1} l_1) A_{1_1} + v_{s_{1m}}^{1,3}(\varphi_{2_1} l_1) A_{3_1} - \sum_{i=1}^4 v_{s_{1_2m}}^{1,i}(\varphi_{j_2} l_1) A_{i_2} = 0 \\ v_{s_{2m}}^{1,1}(\varphi_{1_1} l_1) A_{1_1} + v_{s_{2m}}^{1,3}(\varphi_{2_1} l_1) A_{3_1} - \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{1,i}(\varphi_{j_2} l_1) A_{i_2} = 0 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^4 v_{s_{1m}}^{k,i}(\varphi_{j_k} l_k) A_{i_k} - \sum_{i=1}^4 v_{s_{1m}}^{k,i}(\varphi_{j_{k+1}} l_k) A_{i_{k+1}} = \\ = \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{k,i}(\varphi_{j_k} l_k) C_{i_k} - \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{k,i}(\varphi_{j_{k+1}} l_k) A_{i_{k+1}} = \omega_{s_k} + G_k^* \\ \dots \\ \sum_{i=1}^4 v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) A_{i_{n+1}} = 0, \quad s = \overline{1, 2}, \quad j = \begin{cases} 1; i = 1, 2, \\ 2; i = 2, 4. \end{cases} \end{array} \right\}. \quad (15)$$





Тут  $E_{ij_k} = (D_{2s_k} - D_{1s_k}) \varphi_{j_k}^2 - 1, i = \begin{cases} 1, & s = 2 \\ 2, & s = 1 \end{cases}, j = \overline{1, 2},$

$$\Phi_{s_{im}}^{k,1}(\varphi_{1_q} l_k, \varphi_{1_q} z) = v_{s_{im}}^{k,2}(\varphi_{1_q} l_k) ch \varphi_{1_q} \sqrt{pz} - v_{s_{im}}^{k,1}(\varphi_{1_q} l_k) sh \varphi_{1_q} \sqrt{pz},$$

$$\Phi_{s_{im}}^{k,2}(\varphi_{2_q} l_k, \varphi_{2_q} z) = v_{s_{im}}^{k,4}(\varphi_{2_q} l_k) ch \varphi_{2_q} \sqrt{pz} - v_{s_{im}}^{k,3}(\varphi_{2_q} l_k) sh \varphi_{2_q} \sqrt{pz},$$

$$s, m = \overline{1, 2}, q \in \{k, k+1\},$$

$$v_{s_{im}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) = E_{s_k} ch \varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{2, n}; i = 1, 3;$$

$$v_{s_{im}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) = E_{s_k} sh \varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{1, n}; i = 2, 4;$$

$$v_{s_{21}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) = (D_{s_{1q}} E_{1_q} + D_{s_{2q}} E_{2_q}) \varphi_{j_q} sh \varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{2, n}; i = 1, 3;$$

$$v_{s_{21}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) = (D_{s_{1q}} E_{1_q} + D_{s_{2q}} E_{2_q}) \varphi_{j_q} ch \varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{1, n}; i = 2, 4;$$

$$v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) = E_{s_{n+1}} ch \varphi_{j_{n+1}} \sqrt{pl_{n+1}}, i = 1, 3;$$

$$v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) = E_{s_{n+1}}(p) sh \varphi_{j_{n+1}} \sqrt{pl_{n+1}}, i = 2, 4; \quad j = \begin{cases} 1; i = 1, 2, \\ 3; i = 3, 4. \end{cases}$$

Використовуючи підхід щодо визначення елементів матриці впливу Коші та методику праць [12; 13], можна привести вирази для обчислення компонентів вектор-функцій  $U_{s_k}^*(p, z)$  (17) приводяться до класичного вигляду:

$$U_{s_k}^*(p, z) = \sum_{j=1}^n \left( E_{s_{1k}} \mathcal{R}_{k,j}^{1*}(p, z) + E_{s_{2k}} \mathcal{R}_{k,j}^{2*}(p, z) \right) \omega_{s_j} +$$

$$+ \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} \left( E_{s_{2k}} \mathcal{H}_{k,j}^{1*}(p, z, \xi) + E_{s_{2k}} \mathcal{H}_{k,j}^{2*}(p, z, \xi) \right) \mathcal{F}_{s_j}^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n+1}. \quad (18)$$

Тут компоненти матриць впливу  $[\mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z)]$  та  $[\mathcal{R}_{k,j}^{i*}(p, z)]$ , що включають структури типу  $\Phi_{s_{jm}}^{k,i} v_{s_{jm}}^{k,i}, s, m, j = \overline{1, 2}, i = \overline{1, 4}$  і одержуються рекурентним способом шляхом обчислення визначників, що містяться у виразах (18) [13].

Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (5)–(7) — матриць впливу  $[\mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z)]$  та  $[\mathcal{R}_{k,j}^{i*}(p, z)]$ , є точки галуження  $p = \infty$ . Тому, згідно методики переходу до оригіналів, що ґрунтується на основі теореми Коші та леми Жордана, виконуємо перехід до

оригіналів за Лапласом, заміною інтегралу по контуру Бромвіча інтегралом по уявній вісі [12]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{kj}^i(t, z) &= L^{-1} \left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z) e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z) e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{H}_{kj}^{i*}(is, z) e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \mathcal{R}e \left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(is, z) e^{ist} \right] ds, \quad i = \overline{1, 2}, k, j = \overline{1, n+1}. \\ \mathcal{R}_{kj}^i(t, z) &= L^{-1} \left[ \mathcal{R}_{kj}^{i*}(p, z) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \mathcal{R}e \left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(is, z) e^{ist} \right] ds, \quad i = \overline{1, 2}, k, j = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (19)$$

**Теорема 2.1** (про існування і обчислення оригіналів елементів матриці впливу). Якщо виконується умова параболічності вихідної системи (5)  $D_{11_k} D_{22_k} - D_{12_k} D_{21_k} > 0$ , де коефіцієнти  $D = [D_{ij}]$  системи,  $i, j = \overline{1, 2}$  є обмеженими величинами, то елементи матриці впливу при  $p \rightarrow \infty$  прямують до нуля і існують оригінали за Лапласом елементів матриці впливу (19) [12].

В результаті з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (5)–(7) та формул (19), отримуємо єдиний розв'язок що описує даний вид масопереносу

$$\begin{aligned} U_{s_k}(t, z) &= \sum_{j=1}^n \int_0^t \left( E_{s1_k} \mathcal{R}_{k,j}^1(t-\tau, z) + E_{s2_k} \mathcal{R}_{k,j}^2(t-\tau, z) \right) \omega_{s_j}(\tau) d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} \left( E_{s1_k} \mathcal{H}_{k,j}^1(t-\tau, z, \xi) + E_{s2_k} \mathcal{H}_{k,j}^2(t-\tau, z, \xi) \right) \mathcal{F}_{s_j}(\tau, \xi) d\xi d\tau; \end{aligned} \quad (20)$$

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

Викладене вище дає підстави сформулювати наступну теорему.

**Теорема 2.2** (про розв'язність крайової задачі). Якщо виконується умова однозначної розв'язності неоднорідної змішаної крайової задачі, задані і шукані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок змішаної крайової задачі (5)–(7) існує і єдиний та визначається формулами (20) [6; 13].

**2. Постановка крайової задачі ідентифікації.** Слідуючи [4; 10], пряма задача ідентифікації формулюється на основі вихідної задачі (1)–(4) із модифікацією умови (4) умовою

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \left( D_k U_k(t, z) - D_{k+1} U_{k+1}(t, z) \right) \right|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n}, \quad t \in (0, T). \quad (4_1)$$

Вважаємо, що коефіцієнти дифузії  $D_{sp}$ ,  $s, p = \overline{1, 2}$  крайової задачі (1)–(3), (4<sub>1</sub>) є невідомими. Однак на поверхнях областей  $\gamma_k \subset \Omega_k$ ,  $k = \overline{1, n+1}$ , неоднорідного середовища відомі сліди розв’язків (концентрацій)

$$U_{s_k}(t, z) \Big|_{\gamma_k} = f_{s_k}(t, z) \Big|_{\gamma_k}. \quad (21)$$

Тим самим отримана задача (1)–(3), (4<sub>1</sub>), (21), що полягає в знаходженні функцій  $D_{sp_k} \in C_{(0, T)}$ .

Функціонал-нев’язка, що визначає величину відхилення шуканого розв’язку від слідів розв’язку, отриманого емпіричним шляхом на поверхнях  $\gamma_k$ , запишеться у вигляді [8; 17]:

$$J_s(D_{sp}(t)) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left( \|U_{1_k}(\tau, z, D_{sp_k}) - f_{1_k}\|^2 + \|U_{2_k}(\tau, z, D_{sp_k}) - f_{2_k}\|^2 \right) \sigma_k dz, \quad (22)$$

де  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)}^2 = \int_{\gamma_k} \varphi^2 d\gamma_k$  — квадрат норми. Тут  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)} = |\varphi(t, z)|_{z=\gamma_k}$ .

**Регуляризаційний вираз для  $n+1$ -го кроку** визначення функціональної залежності ідентифікації компоненти коефіцієнта дифузії  $D_{sp_{k_1}}^{n+1}$  від часу, слідуючи [8; 17–18], з використанням методу мінімальних похибок, для кожного  $k_1$ -го шару  $k_1 = \overline{1, N_1+1}$ :

$$D_{sp_{k_1}}^{n+1}(t) = D_{sp_{k_1}}^n(t) - \nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^n(t) \frac{\|U_{s_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}, D_{sp_{k_1}}) - f_{s_{k_1}}\|^2}{\|\nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^n(t)\|_{\gamma_{k_1}}^2}, \quad (23)$$

$$t \in (0, T), s, p = \overline{1, 2}; k_1 = \overline{1, N_1}.$$

Реалізація регуляризаційної процедури (23) полягає в послідовному ітераційному відновленні компонентів коефіцієнтів дифузії  $D_{11_{k_1}}^{n+1}(t)$ ,  $D_{12_{k_1}}^{n+1}(t)$ ,  $D_{22_{k_1}}^{n+1}(t)$  для кожної з поверхонь спостереження  $\gamma_{k_1}$ ,  $k_1 = \overline{1, N_1}$ , встановивши спочатку компоненту  $D_{11_{k_1}}^{n+1}(t)$  при константних значеннях інших (не залежних від часу). Наступним кроком є відновлення компоненти  $D_{22_{k_1}}^{n+1}(t)$  при відновленій  $D_{11_{k_1}}^{n+1}(t)$  для кожного  $k_1$ -го сегменту, далі здійснюється відновлення компоненти

$D_{12_{k_1}}^{n+1}(t)$  при відновлених  $D_{11_{k_1}}^{n+1}(t)$  і  $D_{22_{k_1}}^{n+1}(t)$  для кожного  $k_1$ -го сегменту і цикл повторюється ще раз.

**Аналітичні вирази для компонентів градієнтів функціонала** нев'язки (22), слідуючи мають вигляд [10, 11]:

$$\begin{aligned} \nabla J_{D_{11_{k_1}}}(t) &= \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \varphi_{1_{k_1}}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_{k_1}}(t, z) dz, \\ \nabla J_{D_{12_{k_1}}}(t) &= - \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \varphi_{1_{k_1}}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(t, z) dz, \\ \nabla J_{D_{22_{k_1}}}(t) &= \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \varphi_{2_{k_1}}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(t, z) dz, \\ \nabla J_{D_{21_{k_1}}}(t) &= - \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \varphi_{1_{k_1}}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(t, z) dz, \quad k_1 = \overline{1, N_1 + 1}. \end{aligned} \quad (24)$$

У [8] подані результати приведення інтегральних виразів типу (24) до аналітичного вигляду у формі зручній для обчислювальних процедур.

**4. Результати моделювання та ідентифікації.** Результати аналізу та ідентифікації коефіцієнтів дифузії для двох компонентів (**Fe** і **Dy**) з використанням запропонованої моделі ідентифікації подані на рис. 2–4 для різних дифузійних зрізів, що представляють поверхні спостереження  $\gamma_{k_1}$  із загальною тривалістю спостереження 48 год та товщиною наномультикомпозиту 20 нм. Розглядалось чотири наночастиці по 5 нм кожен. В якості даних експериментальних спостережень використовувались результати (рис. 3), для багатокомпонентних (Fe/Dy) наноплівкок отримані в лабораторії Фізики матеріалів Університету м. Руан (Франція) [1].

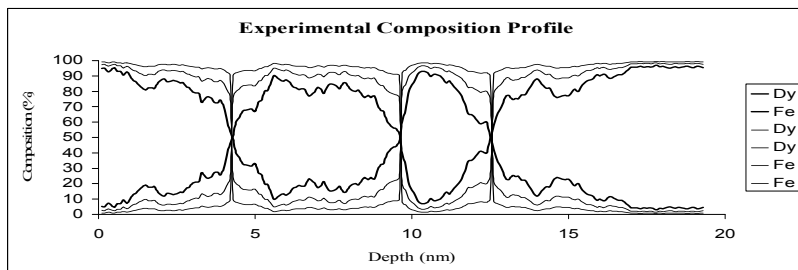
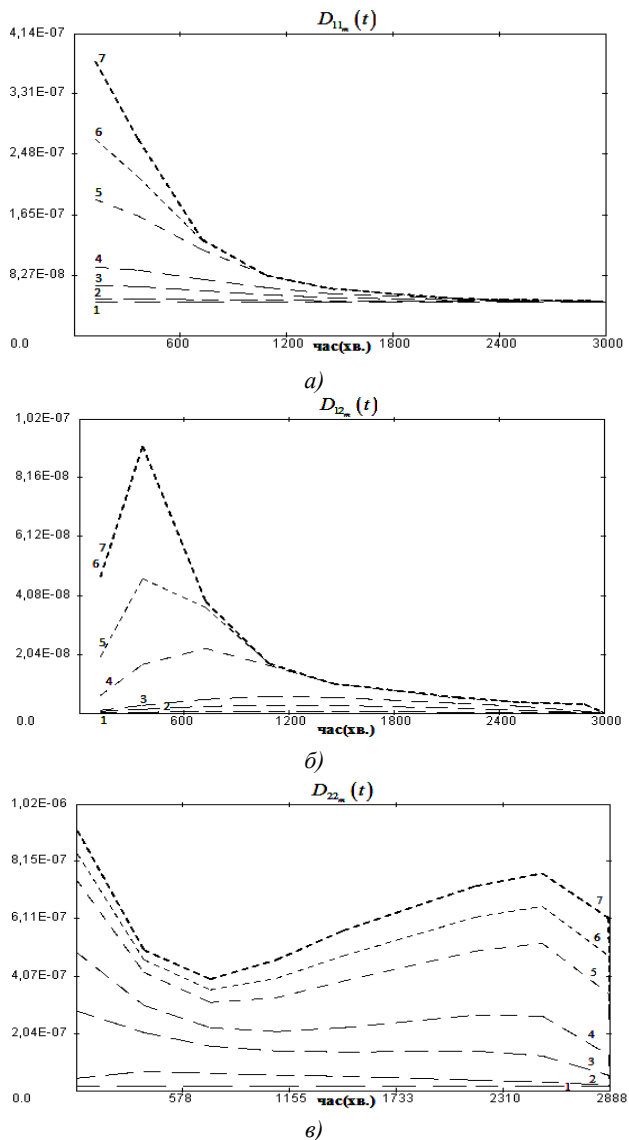


Рис. 2. Експериментальні концентраційні Fe/Dy профілі



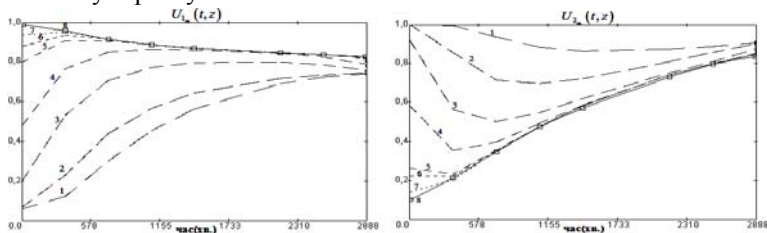
**Рис. 3.** Відновлення функціональної залежності компонентів  $D_{11_m}$ ,  $D_{12_m}$ ,

$D_{22_m}$  коефіцієнта дифузії від часу на кожній ітерації [ $z = 7\text{nm}$ ]:

- 1) початкове наближення, ітерації: 2) 100-та, 3) 500-та, 4) 1000-та, 5) 2500-та, 6) 3500-та, 7) 4500-та; 8) експеримент

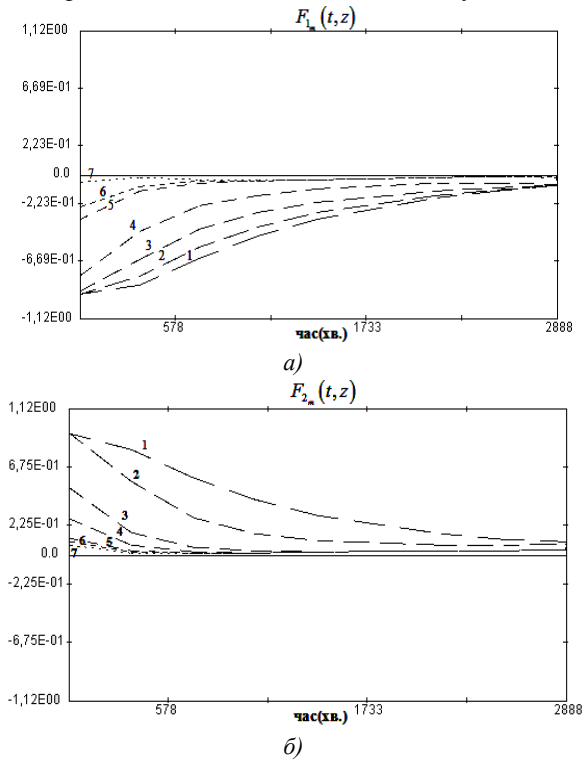
Розглянуте нанокompозитне середовище по товщині було розбите на 200 дифундуючих нанoshрив товщиною 0.1 нм, кожен з яких включає в себе відповідну поверхню спостереження. Такий підхід забезпечив ефективну пошарову реалізацію запропонованої методики функціональної ідентифікації компонентів коефіцієнтів дифузії, використовуючи результати спостережень покрокового атомно-томографічного аналізу зразка для усіх розглянутих поверхонь спостережень, що відповідає руху томографа вздовж зразка.

На рис. 3 (а)) для поверхні спостереження, що відповідає просторовому зрізу по товщині мультикомпозиту для координат товщини  $z = 7 \text{ nm}$ , показаний процес еволюції функціональної залежності в часі коефіцієнта дифузії  $D_{1_{k_1}}^n$ , відновлений згідно регуляризаційної процедури ідентифікації, визначеною формулою (13). Тут подані групи ітерацій, що найсуттєвішим чином впливають на процес збіжності модельного розв'язку  $U_{1_{k_1}}$  до його експериментального сліду  $f_{1_{k_1}}(t, \gamma_{k_1})$ , візуалізація якого показана на наступній діаграмі (рис. 4). В якості початкового наближення для ідентифікації функціональної залежності компоненти коефіцієнту дифузії взято  $D_{1_m}^0(t) = 1.0 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ . По мірі проходження ітерацій функціональна залежність  $D_{1_{k_1}}^n(t)$  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  $D_{1_{k_1}}^n(t)$ , що забезпечує максимальне наближення модельного розв'язку  $U_{1_{k_1}}^n(t, \gamma_{k_1})$  до експериментального сліду  $f_{k_1}(t)$ . Як видно з рис. 4. наближення кривих модельного розподілу концентрацій  $U_{1_{k_1}}$  до кривої експериментального сліду здійснюється знизу ввєрх і забезпечують достатньо повну картину збіжності.



**Рис. 4.** Ітераційне наближення модельних концентраційних профілів  $U_{1_m}$  та  $U_{1_n}$  до експериментального [ $z = 7 \text{ nm}$ ]: 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. 5 демонструє еволюцію зменшення значення функціоналу нев'язки між значеннями модельного концентраційного розподілу  $U_{1_{k_1}}^n(t, \gamma_{k_1})$  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 б) і в) на рис. 3 демонструють аналогічні результати ідентифікації, отримані щодо еволюції функціональної залежності в часі компонентів коефіцієнта дифузії  $D_{12_{k_1}}^n$  (що визначає дифузію першої компоненти в присутності другої) та  $D_{22_{k_1}}^n$  для цієї ж поверхні спостереження ( $z = 7\text{nm}$ ). Діаграма справа на рис. 4 візуалізує процес збіжності розв'язку  $U_{2_{k_1}}$  до його експериментального сліду  $f_{2_{k_1}}(t, \gamma_{k_1})$ . На противагу до  $U_{1_{k_1}}$ ,  $U_{2_{k_1}}$  демонструє наближення кривих модельного розподілу концентрацій зверху до кривої експериментального сліду, що також забезпечує достатню ефективність збіжності регуляризаційного процесу.

В табл. 1–3 подані важливі результати мінімізації значень функціоналів нев'язок в залежності від вибору початкових наближень компонентів коефіцієнтів дифузії  $D_{11}$ ,  $D_{12}$ . (часовий зріз  $t = 1250$  с, просторовий зріз спостереження  $z = 7$  nm) У відповідності з підходами викладеними в [10; 11], процеси регуляризації параметрів ідентифікації здійснюються за декількома циклами. На першому циклі регуляризації (табл. 1) поряд з відтворенням параметрів здійснюється аналіз значень функціоналу нев'язки для завершальної групи ітерацій при різних комбінаціях початкових наближень відтворюваної групи коефіцієнтів дифузії (в нашому випадку, зокрема, розглядалась група з компонентів —  $D_{11}$ ,  $D_{12}$ ). Для кожної із відтворюваних компонентів задаються початкові можливі діапазони зміни їх значень, зокрема для  $D_{11}$  взятий діапазон  $1.00\text{e-}08 \div 1.00\text{e-}06$ , для  $D_{12}$  — діапазон  $1.00\text{e-}10 \div 1.00\text{e-}08$ . Кожен з цих діапазонів розбивається на  $m_1$  (для  $D_{11}$ ) і  $m_2$  (відповідно для  $D_{12}$ ) проміжних наближень від мінімального до максимального до значення. Обчислені значення нев'язок при різних значеннях початкових наближень відновлюваних компонентів коефіцієнтів дифузії ( $D_{11}$ ,  $D_{12}$ ) занесені в табл. 1. На основі цих даних вибираються пара наближень, що відповідає мінімальному значенню нев'язки. В нашому випадку мінімальному значенню функціонала нев'язки для вказаних діапазонів початкових значень компонентів коефіцієнтів дифузії (цикл 1) складає  $J(D_{11}, D_{12})_{\min} = 0,00074$ , що відповідає відновлюваним значенням  $D_{11} = 1.00\text{e-}07$  та  $D_{12} = 1.00\text{e-}09$ .

Таблиця 1

*Залежності значень функціоналу-нев'язки від початкових значень  $D_{11}$ ,  $D_{12}$  (Цикл 1)*

Діапазони значень початкових наближень для:		коефіцієнта дифузії $D_{12}$				
		<b>1.00e-10</b>	<b>5.00e-10</b>	<b>1.00e-09</b>	<b>5.00e-09</b>	<b>1.00e-08</b>
коефіцієнта дифузії $D_{11}$	<b>1.00e-08</b>	0,52406	0,48816	0,44329	0,08432	0,36439
	<b>5.00e-08</b>	0,07822	0,05519	0,02639	0,20396	0,49190
	<b>1.00e-07</b>	0,01348	0,00133	0,00074	0,16797	0,35313
	<b>5.00e-07</b>	0,00982	0,00513	0,01985	0,04767	0,10633
	<b>1.00e-06</b>	0,01000	0,00602	0,00104	0,03876	0,08852

На другому циклі регуляризації (табл. 2) здійснюється аналогічний аналіз значень функціоналу нев'язки  $J(D_{11}, D_{12})$  для діапазонів початкових наближень відтворюваної групи параметрів, взятих в околах їх оптимальних значень, отриманих на попередньому циклі регуляризації, тобто  $D_{11} = 1.00\text{e-}07$ ,  $D_{12} = 1.00\text{e}$  — (табл. 1). Для  $D_{11}$  взятий діапазон  $0.80\text{e-}07 \div 2.00\text{e-}07$ , для  $D_{12}$  —  $0.700\text{e-}09 \div 3.00\text{e-}09$ . Кожен з цих діапазонів знову розбивається на ряд проміжних початкових наближень як для першого циклу. Нові обчислені значення нев'язок при різних значеннях початкових наближень відновлюваних параметрів ( $D_{11}$ ,  $D_{12}$ ) аналогічно заносяться в табл. 2. Парою набли-



жень, що відповідає мінімальному значенню функціонала нев'язки для даного циклу регуляризації (цикл 2) складає  $J(D_{11}, D_{12})_{\min} = 0,00005$ , що відповідає відновлюваним значенням коефіцієнтів дифузії  $D_{11} = 1.50e-07$  та  $D_{12} = 1.00e-09$ .

Таблиця 2

*Залежності значень функціоналу-нев'язки від початкових значень  $D_{11}, D_{12}$  (Цикл 2)*

Діапазони значень початкових наближень для:		коефіцієнта дифузії $D_{12}$				
		<b>0.7.0e-09</b>	<b>0.8.5e-09</b>	<b>1.00e-09</b>	<b>1.50e-09</b>	<b>3.00e-09</b>
коефіцієнта дифузії $D_{11}$	<b>0.8.0e-07</b>	0,00007	0,00244	0,00481	0,01271	0,03642
	<b>0.90e-07</b>	0,00180	0,000118	0,00215	0,00872	0,02842
	<b>1.00e-07</b>	0,00278	0,00102	0,000746	0,00661	0,02420
	<b>1.50e-07</b>	0,00333	0,00169	0,00005	0,00542	0,02182
	<b>2.00e-07</b>	0,00365	0,00208	0,00051	0,000473	0,02044

На третьому циклі регуляризації (табл. 3) аналізуються значення функціоналу нев'язки  $J(D_{11}, D_{12})$  для діапазонів початкових наближень відтворюваних параметрів, взятих в околах їх оптимальних значень, отриманих на другому циклі регуляризації, тобто  $D_{11} = 1.50e-07$ ,  $D_{12} = 1.00e-09$  (табл. 2). Для  $D_{11}$  взято діапазон  $1.30e-07 \div 1.70e-07$ , для  $D_{12}$  —  $0.80e-09 \div 1.20e-09$ , де кожен з них знову аналогічно попереднім циклом ще дрібніше розбивається на ряд проміжних початкових наближень. Нові обчислені значення нев'язок при різних значення початкових наближень відновлюваних параметрів ( $D_{11}, D_{12}$ ) аналогічно заносяться в табл. 3. Як видно з табл. 3 мінімальне значення функціонала нев'язки для даного циклу регуляризації (цикл 3) складає теж саме, що отримане на попередньому циклі регуляризації  $J(D_{11}, D_{12})_{\min} = 0,00005$ . Цьому мінімальному значенню функціонала відповідає та сама ж пара наближень, що і на попередньому циклі:  $D_{11} = 1.50e-07$  та  $D_{12} = 1.00e-09$ . Це свідчить по суті про досягнення глобального мінімуму, а відтак про завершення процесу регуляризації. Одержані у такий спосіб величини  $D_{11} = 1.50e-07$  та  $D_{12} = 1.00e-09$  можна прийняти за відновлювані значення коефіцієнтів дифузії для досліджуваних часових і просторово розподілених зрізів спостережень.

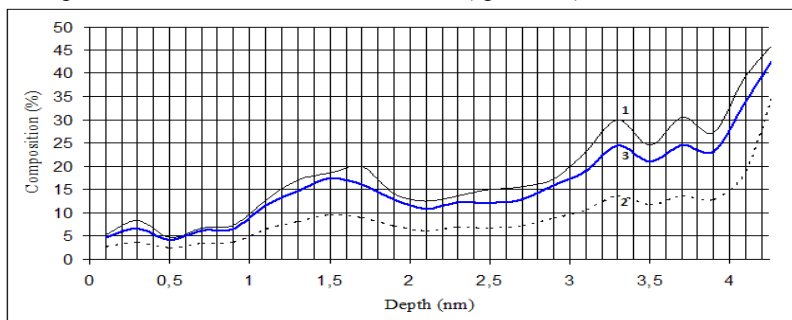
Таблиця 3

*Залежності значень функціоналу-нев'язки від початкових значень  $D_{11}, D_{12}$  (Цикл 3)*

Діапазони значень початкових наближень для:		коефіцієнта дифузії $D_{12}$				
		<b>0.80e-09</b>	<b>0.90e-09</b>	<b>1.00e-09</b>	<b>1.10e-09</b>	<b>1.20e-09</b>
коефіцієнта дифузії $D_{11}$	<b>1.30e-07</b>	0,00208	0,00097	0,00014	0,00126	0,00237
	<b>1.40e-07</b>	0,00214	0,00103	0,00008	0,00118	0,00229
	<b>1.50e-07</b>	0,00220	0,00111	0,00005	0,00105	0,00214
	<b>1.60e-07</b>	0,00224	0,00119	0,00011	0,00098	0,00205
	<b>1.70e-07</b>	0,00228	0,00123	0,00016	0,00092	0,00200

Слід відмітити, що дану запропоновану багато циклову схему регуляризації ідентифікованих параметрів можна поширити на системи переносу, що потребують одночасної ідентифікації трьох і більше кінетичних параметрів. Тоді для цих випадків будемо мати справу не з двовимірними матрицями значень функціоналів нев'язки, а з три- і більше вимірними масивами, для яких уже потрібно розглядати  $n$ -нарні (потрійні і більше) комбінації проміжних значень початкових наближень та знаходити для них мінімум функціоналу нев'язки. Реалізація такої  $n$ -нарної схеми ідентифікації буде більше представляти як технічну проблему, пов'язану з організацією паралельних обчислень та використанні високошвидкісних обчислювальних кластерів.

Рис. 6. ілюструє порівняльний аналіз побудованих концентраційних профілів (компонента Fe) вздовж координати товщини для окремого фрагменту мультикомпозиту в діапазоні  $0 < z < 4,3$  nm, а саме профілю концентрацій, побудованого з урахуванням відтворених коефіцієнтів дифузії  $D_{11_m}$  та  $D_{22_m}$  за процедурою функціональної ідентифікації (крива 1), профілю, побудованого — за константними початковими значеннями відповідних коефіцієнтів дифузії (2 — пунктирна крива), що як правила використовуються в традиційних наближених розрахунках та експериментальним слідом на цій ділянці (кривою 3).



**Рис. 6.** Концентраційні Fe профілі вздовж координати товщини, побудовані за коефіцієнтами дифузії  $D_{11_m}$  та  $D_{22_m}$ , відтвореними за процедурою функціональної ідентифікації (1 — суцільна крива) та — за константними початковими значеннями (2 — пунктирна крива) та експериментальним слідом (крива 3)

Як видно з рис. 6, концентраційна крива, отримана з допомогою ідентифікованих функціональних залежностей коефіцієнтів дифузії суттєво відрізняється (більше 20%) від профілю, побудованого — за усередненими константними значеннями відповідних коефіцієнтів дифузії, взятим в початковий момент часу та значно краще наближає

експериментальний профіль (крива 3) вздовж всього досліджуваного діапазону. Ідентифіковані функціональні залежності коефіцієнтів дифузії  $D_{11_m}$ ,  $D_{12_m}$  та  $D_{22_m}$  як функції від часу відображають реальні їх значення для конкретних моментів часу дифузії, відтворені за слідами конкретних спостережень, тому, без сумніву, концентраційна крива 1 дає якісніший опис кінетики дифузії, ніж крива 2, що підтверджується порівнянням з експериментальним слідом.

**Висновки:** Розроблена на основі теорії оптимального керування станами багатокomпонентних систем, інтегральних перетворень Фур'є та Лапласа методика моделювання та функціональної ідентифікації параметрів дифузії для неоднорідних наномультимкомполітиків, отримані аналітичні вирази градієнтів функціоналів нев'язок, компонентами яких є побудовані аналітичні розв'язки вихідної неоднорідної крайової задачі переносу та спряженої їй за Лагранжем задачі, виконано відновлення коефіцієнтів дифузії для різних поверхонь спостережень

#### Список використаних джерел:

1. Magnetization depth profile of (Fe/Dy) multilayers / A. Tamion, F. Ott, P.-E. Berche, E. Talbot, C. Bordel, D. Blavette // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2008. — Vol. 320. — Issue 21. — P. 2650–2659.
2. Mehrer H. *Diffusion in Solids* / H. Mehrer. — Springer, 2007. — 650 p.
3. Kärger J. *Diffusion fundamentals* / J. Kärger, F. Grinberg, P. Heitjans. — Leipzig : Leipziger Unviersite, 2005. — 615 p.
4. Дейнека В. С. Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах (компетитивна дифузія, адсорбція) / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. Кане, Ж. Фресар. — К. : Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова, 2014. — 177 с.
5. Сергієнко І. В. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / І. В. Сергієнко, М. Р. Петрик, С. Леклерк, Ж. Фресар. — К. : Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова, 2014. — 210 с.
6. Петрик М. Р. Моделі процесів дифузійного переносу і методи оцінювання параметрів в багато композитних наноплівках / М. Р. Петрик, П. В. Васильюк, Д. М. Михалик, Н. В. Бабій. — Тернопіль : Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2015. — 176 с.
7. Petryk M. Numerical and Analytical Modeling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials / M. Petryk, E. Vorobiev // *AIChE Journal*. — Wiley (USA), 2013. — Vol. 59. — Issue 12. — P. 4762–4771.
8. Дейнека В. С. Функціональна ідентифікація градієнтними методами та інтегральними перетвореннями / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик // *Доповіді НАН України*. — 2013. — №12. — С. 45–51.
9. Дейнека В. С. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультимкомполітиках с использованием градиентных методов / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик // *Компьютерная математика*. — 2012. — № 1. — С. 41–51.

10. Дейнека В. С. Параметрична ідентифікація кінетичних параметрів дифузії в багат шарових неоднорідних Fe/Dy-наномультимедіах / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фіз.-мат. науки : зб. наук. праць. — Кам'янець-Подільський : Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2011. — Вип. 5. — С. 85–111.
11. Deineka V. S. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system / V. S. Deineka, M. R. Petryk, J. Fraissard // Cybernetics and System Analysis. — New York, 2011. — Vol. 47, № 5. — P. 705–723.
12. Лаврентьев М. А. Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. — М. : Наука, 1973. — 736 с.
13. Ленюк М. П. Інтегральні перетворення Фурє, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах / М. П. Ленюк, М. Р. Петрик. — К. : Наукова думка, 2000. — 372 с.
14. Моделювання та ідентифікація параметрів процесів дифузійного перенесення в багат шарових оксидних наноплівках / М. Петрик, Д. Михалик, М. Шинкарик, О. Петрик, Н. Бабій // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць. — Кам'янець-Подільський : Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2014. — Вип. 10. — С. 167–178.
15. Петровский И. Г. Лекции об уравнениях с частными производными / И. Г. Петровский. — М. : Физматгиз, 1961. — 400 с.
16. Mathematical modeling and research for diffusion processes in multilayer and nanoporous media / M. Petryk, O. Shabliy, M. Leniuk, P. Vasyluk // Fluid Transport in Nanoporous Materials. NATO Science Series, Series II: Mathematics, Physics and Chemistry. — 2006. — Vol. 219. — P. 639–655.
17. Сергиенко И. В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека. — К. : Наукова думка, 2009. — 638 с.
18. Sergienko I. V. Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions / I. V. Sergienko, V. S. Deineka. — New York : Kluwer Academic Publishers, 2005. — 400 p.

The functional identification of parameters of diffusion in heterogeneous nano multilayers using the methodology of optimal control of distributed systems and integral transformations is proposed. The restoration of functional dependencies on the time for diffusion coefficients of Fe/Dy-nano multilayers is executed.

**Key words:** *mass transfer, mathematical model, functional identification, integral transformation, heterogeneous media, residual functional gradient.*

Отримано: 24.03.2015