

УДК 519.6

**В. С. Дейнека\***, д-р фіз.-мат. наук, професор, академік НАН України,  
**М. Р. Петрик\*\***, канд. техн. наук, доцент

\* Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, м. Київ,

\*\* Тернопільський національний технічний університет  
імені Івана Пулюя, м. Тернопіль

## **ПАРАМЕТРИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДИФУЗІЇ В БАГАТОШАРОВИХ НЕОДНОРІДНИХ Fe/Dy- НАНОМУЛЬТИКОМПОЗИТАХ**

Обґрунтовані постановки прямих і спряжених крайових задач ідентифікації для моделей дифузійного масопереносу в неоднорідних мультикомпонентних середовищах. Здійснена параметрична ідентифікація коефіцієнтів дифузії та перевірка моделей на адекватність з використанням методології оптимального керування станом складних багатоконпонентних розподілених систем, операційного числення Гевісайда та скінченних інтегральних перетворень Фур'є.

**Ключові слова:** *математична модель масопереносу, параметрична ідентифікація, пряма і спряжена початково-крайові задачі, наномультікомползит, операційний метод Гевісайда, скінченне інтегральне перетворення Фур'є, градієнт функціонала-нев'язки.*

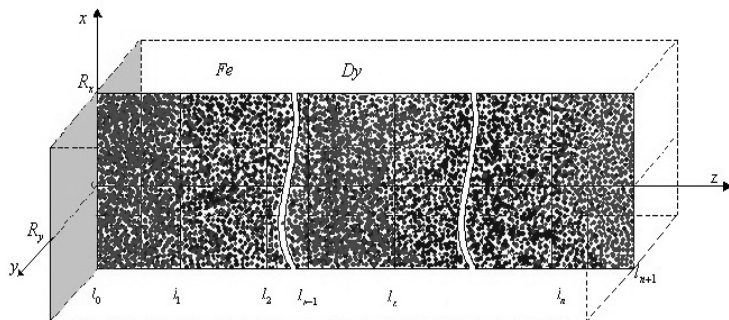
**Вступ.** Важливим напрямом сучасної нанофізики є вивчення дифузії в багатошарових мульти-нанокомползитах (nano multysouche) різної природи, зокрема тонких наноплівок, отриманих високотехнологічним способом шляхом агрегації матеріалів з різними і навіть взаємно протилежними властивостями. Такі розробки є предметом сучасних нанофізичних досліджень, що прогнозують створення на базі матеріалів та середовищ з відомими властивостями новітніх матеріалів та середовищ з новими невідомими до цього часу властивостями (нові явища магнітної та електричної провідності, дифузійно-адсорбційні ефекти тощо).

У значній мірі, як пояснюють дослідники, виникнення подібних ефектів пов'язано зі структурними змінами середовищ при агрегуванні наночарів з різними властивостями та наявністю змінних градієнтів концентрацій, що мають місце на інтерфейсних поверхнях розділу цих середовищ. Останнє вимагає розробки нових методів моделювання і математичних моделей для опису специфіки переносу в таких мультикомползитах середовищах цих явищ з урахуванням наявності великої кількості інтерфейсів між суміжними наночарами [1—7]. Зокрема, дуже актуальним є дослідження згущених (Fe/Dy, Fe/Te) магнітних багатошарових плівок, що утворені композитним способом почерговою агрегацією наночарів з високопровідними і низькопровідними матеріалами (на-

приклад, магнетики (ферум) і рідкоземельні елементи (тербій, диспрозіум тощо). Одна із перших серій таких мультикомполітів та їх експериментальні концентраційні профілі складових компонент були одержані при допомозі томографічно-атомного аналізу групою фізики матеріалів GPM CNRS UMR 6634 Університету м. Руан [2—4]. Окремі розрахунки магнітно-дифузійних характеристик таких середовищ (Fe 4нм/ Dy 3нм) виконані при участі авторів (Руан, Франція, 2003—2004).

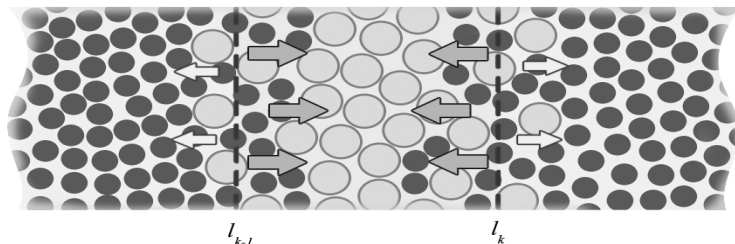
1. Загальний фізичний опис, схематизація переносу та математична модель з урахуванням двосторонніх градієнтних взаємодій в елементах мультишару

Розглядається багатшарове середовище, що складається з  $n$  подвійних наншарів двох середовищ з різними властивостями (рис. 1).



**Рис. 1.** Схематизація мультикомполітного Fe/Dy — наншарового середовища

Процес дифузії атомів компоненти 1 (Fe) і компоненти 2 (Dy) між суміжними наншарами, спричинений наявністю градієнтів концентрацій, змінних в часі на інтерфейсних межах приводять до хімічного змішування границь розділу. Схематизація елемента такої градієнтної інтерфейсної взаємодії між двома суміжними наншарами середовища показана на рис. 2.



**Рис. 2.** Схематизація елемента градієнтної інтерфейсної взаємодії компонент між двома суміжними наншарами середовища

Концентраційні профілі для такої багатшарової системи можна одержати із системи рівнянь переносу, отриманих на основі закону

Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх наночарів та системою інтерфейсних умов між послідовними наночарами середовища.

Математична модель такого переносу з урахуванням вказаних фізичних чинників може бути описана у вигляді такої мішаної крайової задачі. На областях  $\Omega_{k_T} = (0, T) \times \Omega_k$  ( $\Omega_k = (l_{k-1}, l_k)$ ,  $k = \overline{1, n+1}$ ,  $l_0 = 0 < l_1 < \dots < l_{n+1} = l < \infty$ ) концентрації  $U_{1_k}(t, z), U_{2_k}(t, z)$ , з урахуванням [2—4; 8—10] задовольняють системі рівнянь з частинними похідними

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

початкові умови

$$\begin{aligned} U_{1_k}(t, z) \Big|_{t=0} &\equiv U_{01k} = \begin{cases} 0, & z \in (l_{k-1}, l_k), \quad k = 2i+1; i = \overline{0, \lfloor n/2 \rfloor} \\ 1, & z \in (l_k, l_{k+1}), \quad k = 2i+2; i = \overline{0, \lfloor n/2 \rfloor - 2} \end{cases}, \\ U_{2_k}(t, z) \Big|_{t=0} &\equiv U_{02k} = \begin{cases} 1, & z \in (l_{k-1}, l_k), \quad k = 2i+1; i = \overline{0, \lfloor n/2 \rfloor} \\ 0, & z \in (l_k, l_{k+1}), \quad k = 2i+2; i = \overline{0, \lfloor n/2 \rfloor - 2} \end{cases}, \end{aligned} \quad (2)$$

крайові та інтерфейсні умови між тонкими шарами по  $z$

$$\begin{aligned} D_1 \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1_1}(t, z) \\ U_{2_1}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{z=0} &= 0, \quad D_{n+1} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1_n}(t, z) \\ U_{2_n}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{z=l} = 0, \quad t \in (0, T), \\ \left[ U_{s_m}(t, z) - U_{s_{m+1}}(t, z) \right] \Big|_{z=l_m} &= 0, \quad s = 1, 2, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \left( D_{s_1} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} U_{1_{s_1}}(t, z) \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{2_{s_1}}(t, z) \end{bmatrix} - D_{s_2} \begin{bmatrix} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{1_{s_2}}(t, z) \\ \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s_2}}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} &= \\ = (-1)^{k+1} \omega_k(t), \quad k = \overline{1, n} \end{aligned} \quad (4)$$

де

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

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

Варто зауважити, що з позиції практичних застосувань — важливі випадки, коли  $D_k = \begin{bmatrix} D_{11k} & 0 \\ -D_{21k} & D_{22k} \end{bmatrix}$  або  $D_k = \begin{bmatrix} D_{11k} & -D_{12k} \\ 0 & D_{22k} \end{bmatrix}$ , на що

буде в подальшому додатково зосереджена увага. Це відповідатиме кінетиці взаємодії двох елементів з протилежними показниками кінетичних параметрів, так званих «активної» (високий показник) і «пасивної» компоненти (низький), що як підтверджують низка експериментів приводить до отримання нових фізичних ефектів [1; 2; 4; 5]. Умова (4) тут записана дещо в загальнішому вигляді, враховуючи наявність фазового переходу для певної кількості дифундованих частинок в газоподібну фазу на межах розділу шарів при застосуванні особливих режимів дифузії. Без урахування цього факту, функції у правій частині (4) слід покласти такими, що дорівнюють нулю:  $\omega_k(t) = 0$ .

У припущенні, що задані та шукані функції є оригіналами за Лапласом стосовно змінної  $t$ , в зображенні за Лапласом [11] для  $U_{i_k}^*(p, z) \equiv L[U_{i_k}(t, z)] = \int_0^\infty U_{i_k}(t, z) e^{-pt} dt, i = \overline{1, 2}$ , отримуємо задачу про структуру 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  $z$

$$D_{1_i} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1_k}^*(p, z) \\ U_{2_k}^*(p, z) \end{bmatrix}_{z=0} = 0, \quad D_{n+1} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1_{n+1}}^*(p, z) \\ U_{2_{n+1}}^*(p, z) \end{bmatrix}_{z=l} = 0, \quad (6)$$

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

$$\left( D_{s1} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} U_{1_{s1}}^*(p, z) \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} + p \right) U_{2_{s1}}^*(p, z) \end{bmatrix} - D_{s2} \begin{bmatrix} \left( \frac{\partial}{\partial z} + p \right) U_{1_{s2}}^*(p, z) \\ \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s2}}^*(p, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} =$$

$$= \frac{(-1)^{k+1}}{p} \omega_k^*(p), \quad k = \overline{1, n}$$

Встановлюється, що система (5) є строго параболічною за Петровським при умові  $D_{intra11_k} D_{intra22_k} - D_{intra12_k} D_{intra21_k} > 0$  та при використанні підходу, описаного в [11; 12], вона зводиться до диференціального рівняння четвертого порядку

$$\begin{aligned} & \left( D_{intra11_k} D_{intra22_k} - D_{intra12_k} D_{intra21_k} \right) \frac{d^4 w_k^*}{dr^4} - \\ & - \left( D_{intra11_k} + D_{intra22_k} \right) p \frac{d^2 v_k^*}{dr^2} + p^2 w_k^* = \mathcal{F}_k^*(p), i = \overline{1, 2}, \end{aligned} \quad (8)$$

де

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

Розв'язок неоднорідної крайової задачі (5)–(7) будуюмо з використанням методу функцій Коші [11]:

$$\begin{aligned} U_{i_k}^*(p, z) &= \mathcal{L}_i^* \left[ w_k^*(p, z) \right], \mathcal{L}_i^* = \left( D_{ss_k} - D_{is_k} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + p, \\ w_k^*(p, z) &= A_{1_k} \operatorname{ch} \varphi_{1_k} z + A_{2_k} \operatorname{sh} \varphi_{1_k} z + A_{3_k} \operatorname{ch} \varphi_{2_k} z + A_{4_k} \operatorname{sh} \varphi_{2_k} z + \\ &+ \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \mathcal{F}_k^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n+1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Тут  $\operatorname{ch} \varphi_{1_k} \sqrt{pz}$ ,  $\operatorname{sh} \varphi_{1_k} \sqrt{pz}$ ,  $\operatorname{ch} \varphi_{2_k} \sqrt{pz}$ ,  $\operatorname{sh} \varphi_{2_k} \sqrt{pz}$ ,  $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi)$ ,  $k = \overline{1, n+1}$  складають фундаментальну систему розв'язків однорідного рівняння (8),  $\varphi_{i_k} = \beta_{i_k} / \sqrt{p}$ ,  $k = \overline{1, 2}$ ,

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

ні характеристичного многочлена диференціальної системи (5)

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

Функції Коші  $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi)$  будуються у вигляді

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

де невідомі коефіцієнти  $C_k^s; k = \overline{1, 4}; s = 1, 2$ , визначаються із умов [7; 8]:

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

та додаткових однорідних умов, визначених умовами вихідної крайової задачі:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k^{+*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, \frac{d}{dz} \mathcal{E}_k^{+*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, \mathcal{E}_k^{-*} \Big|_{z=l_k-0} = 0, \\ \frac{d}{dz} \mathcal{E}_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0, \frac{d}{dz} \mathcal{E}_1^{+*} \Big|_{z=0} = 0, \frac{d}{dz} \mathcal{E}_{n+1}^{-*} \Big|_{z=l_{n+1}} = 0, k = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (12)$$

Із чотирьох умов (12), розв'язуючи систему рівнянь четвертого порядку, отримуємо:

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

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

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

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

$$C_{1_k}^2 \varphi_{1_k} sh\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{2_k}^2 \varphi_{1_k} \sqrt{p} ch\varphi_{1_k} \sqrt{pl_{k-1}} + C_{3_k}^2 \varphi_{2_k} sh\varphi_{2_k} \sqrt{pl_{k-1}} +$$

$$+C_{4_k}^2 \varphi_{2_k} \sqrt{p} ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} = - \frac{1}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{2}{3}}} \sum_{i=1}^2 ch \varphi_{i_k} (\xi - l_{k-1}), \quad (14)$$

$$C_{1_k}^2 ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k + C_{2_k}^2 sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k + C_{3_k}^2 ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k + C_{4_k}^2 sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k = 0,$$

$$C_{1_k}^2 \varphi_{1_k} sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k + C_{2_k}^2 \varphi_{1_k} ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k +$$

$$+ C_{3_k}^2 \varphi_{2_k} sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k + C_{4_k}^2 \varphi_{2_k} ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k = 0.$$

У результаті розв'язання системи (14) маємо:

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

$$\left. + \Gamma_k^{li} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) \frac{sh \varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1})}{\varphi_{i_k}} \right)$$

$$\Gamma_{1_k}^{11} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{14} -$$

$$- \varphi_{2_k} sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{24} + \varphi_{2_k} ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{23},$$

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

$$\Gamma_{1_k}^{21} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{34} -$$

$$- \varphi_{2_k} sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{14} + \varphi_{2_k} ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{13},$$

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

$$\Gamma_{2_k}^{11} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{24} -$$

$$- \varphi_{1_k} ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{14} + \varphi_{2_k} ch \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{12},$$

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

$$\Gamma_{2_k}^{21} (\varphi_{1_k}, \varphi_{2_k}, l_{k-1}, l_k) = \varphi_{1_k} sh \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{23} -$$

$$- \varphi_{1_k} ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{13} + \varphi_{2_k} sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_{k-1} \Delta_{12},$$

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

$$\Delta_{12} = \varphi_{1_k}, \Delta_{34} = \varphi_{2_k}, \Delta_{13} = \varphi_{2_k} ch \varphi_{1_k} \sqrt{p} l_k sh \varphi_{2_k} \sqrt{p} l_k -$$

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

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

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

Таким чином, функція Коші однозначно визначена і має вигляд

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) = & \frac{1}{(\varphi_{1_k}^2 - \varphi_{2_k}^2) p^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\varphi_i} \times \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & sh\varphi_{i_k} \sqrt{p} (z - \xi) + N_{li_k}(p, z) \left( sh\varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) + \frac{\varphi_{i_k}}{\varphi_{2_k}} sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) \right) + \\ & sh\varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - z) + N_{li_k}(p, \xi) \left( sh\varphi_{i_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1}) + \frac{\varphi_{i_k}}{\varphi_{2_k}} sh\varphi_{2_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1}) \right) + \\ & + N_{2i_k}(p, z) (ch\varphi_{i_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1}) + ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} (\xi - l_{k-1})); \quad l_{k-1} < z < \xi < l_k, \\ & + N_{2i_k}(p, \xi) (ch\varphi_{i_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1}) + ch\varphi_{2_k} \sqrt{p} (z - l_{k-1})); \quad l_{k-1} < \xi < z < l_k, \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

де

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

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

$B_1, A_2, B_2, k = \overline{1, n+1}$  в (9):

$$\left. \begin{aligned} & v_{s_{1m}}^{1,1}(\varphi_{1_1} l_1) A_1 + v_{s_{1m}}^{1,3}(\varphi_{2_1} l_1) A_3 - \sum_{i=1}^4 v_{s_{12m}}^{1,i}(\varphi_{j_2} l_1) A_2 = 0 \\ & v_{s_{2m}}^{1,1}(\varphi_{1_1} l_1) A_1 + v_{s_{2m}}^{1,3}(\varphi_{2_1} l_1) A_3 - \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{1,i}(\varphi_{j_2} l_1) A_2 = 0 \\ & \dots \\ & \sum_{i=1}^4 v_{s_{1m}}^{k,i}(\varphi_{j_k} l_k) A_i - \sum_{i=1}^4 v_{s_{1m}}^{k,i}(\varphi_{j_{k+1}} l_k) A_{i_{k+1}} = \\ & \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{k,i}(\varphi_{j_k} l_k) C_i - \sum_{i=1}^4 v_{s_{2m}}^{k,i}(\varphi_{j_{k+1}} l_k) A_{i_{k+1}} = \omega_{s_k} + G_k^* \\ & \dots \\ & \sum_{i=1}^4 v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) A_{i_{n+1}} = 0, \quad s = \overline{1, 2}, \quad j = \begin{cases} 1; & i = 1, 2 \\ 2; & i = 2, 4 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$





$$\begin{aligned}
 \Phi_{s_m}^{k,2}(\varphi_{2_q} l_k, \varphi_{2_q} z) &= v_{s_m}^{k,4}(\varphi_{2_q} l_k) ch\varphi_{2_q} \sqrt{pz} - v_{s_m}^{k,3}(\varphi_{2_q} l_k) sh\varphi_{2_q} \sqrt{pz}; q \in \{k, k+1\}, \\
 v_{s_1}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) &= E_{s_k} ch\varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{2, n}; \\
 i = 1, 3; v_{s_1}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) &= E_{s_k} sh\varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{1, n}; i = 2, 4 \\
 v_{s_{21}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) &= (D_{s_{1_q}} E_{1_q} + D_{s_{2_q}} E_{2_q}) \varphi_{j_q} sh\varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{2, n}; i = 1, 3; \\
 v_{s_{21}}^{k,i}(\varphi_{j_q} l_k) &= (D_{s_{1_q}} E_{1_q} + D_{s_{2_q}} E_{2_q}) \varphi_{j_q} ch\varphi_{j_q} \sqrt{pl_k}, \quad k = \overline{1, n}; i = 2, 4; \\
 v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) &= E_{s_{n+1}} ch\varphi_{j_{n+1}} \sqrt{pl_{n+1}}, \quad i = 1, 3; \\
 v_{s_{22}}^{n+1,i}(\varphi_{j_{n+1}} l_{n+1}) &= E_{s_{n+1}}(p) sh\varphi_{j_{n+1}} \sqrt{pl_{n+1}}, \quad i = 2, 4; j = \begin{cases} 1; & i = 1, 2, \\ 3; & i = 3, 4. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Використовуючи підхід щодо визначення елементів матриці впливу Коші та методику праць [11; 12], можна привести вирази для обчислення компонент вектор-функцій  $U_{s_k}^*(p, z)$  (17) до класичного вигляду:

$$\begin{aligned}
 U_{s_k}^*(p, z) &= \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} \left( E_{s_{2_k}} \mathcal{H}_{k,j}^{1*}(p, z, \xi) + E_{s_{2_k}} \mathcal{H}_{k,j}^{2*}(p, z, \xi) \right) \mathcal{F}_{s_j}^*(p, \xi) d\xi + \\
 &+ \sum_{j=1}^n \left( E_{s_{1_k}} \mathcal{R}_{k,j}^{1*}(p, z) + E_{s_{2_k}} \mathcal{R}_{k,j}^{2*}(p, z) \right) \omega_{s_j}^*; k = \overline{1, n+1}.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Тут компоненти матриць впливу  $\left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z) \right]$  та  $\left[ \mathcal{R}_{k,j}^{i*}(p, z) \right]$ , 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, які містяться у виразах (19) згідно рекурентних формул, поданих у [6]. Без урахування  $\omega_{s_k}(\tau) = 0$ ,  $k = \overline{1, n}, s = \overline{1, 2}$ , тобто, коли відсутні фазові перетворення дифундованих компонент на межах, формула (18) і не будуть включати в себе других сум.

Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (5) — (7) — матриць впливу  $\left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(p, z) \right]$  та  $\left[ \mathcal{R}_{k,j}^{i*}(p, z) \right]$ , є точки галузження  $p = \infty$ . 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 осі [11]:

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

$$\mathcal{R}_{kj}^i(t, z) = L^{-1} \left[ \mathcal{R}_{kj}^{i*}(p, z) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \mathcal{R}e \left[ \mathcal{H}_{kj}^{i*}(is, z) e^{ist} \right] ds, \quad i = \overline{1, 2}; k, j = \overline{1, n} \quad (19)$$

**Теорема 1** (про існування і обчислення оригіналів елементів матриці впливу). При обмеженнях на коефіцієнти матриці  $D = [D_{ij}]$ ,  $i, j = \overline{1, 2}$  (є сталими величинами, що не перетворюються в нуль), елементи матриці впливу при  $p \rightarrow \infty$  прямують до нуля і існують оригінали за Лапласом елементів матриці впливу (19).

У результаті з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (5)—(7) та формул (19), отримуюмо єдиний розв'язок, що описує розглянутий вид масопереносу:

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

Викладене вище дає підстави сформулювати таку теорему.

**Теорема 2** (про розв'язність прямої крайової задачі). Якщо виконується умова однозначної розв'язності неоднорідної мішаної крайової задачі, задані і шукані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок мішаної крайової задачі (1)—(4) існує, єдиний і визначається за формулами (20).

2. Схематизація та модель переносу в мультишарах типу Fe/Dy-систем з урахуванням міжелементних взаємодій «активний-пасивний елемент».

Розглядається багат шарове нанокompозитне середовище, що складається з  $n$  подвійних наночарів (Fe/Dy)-середовищ, один з яких заповнений «активним» елементом, тобто з високими показниками кінетичних параметрів переносу, намагнічованості тощо, наприклад феромагне-

тик (Fe), а інший суміжний є «пасивним», тобто з низькими або дуже низькими показниками відповідних кінетичних параметрів, наприклад парамагнетик чи рідкоземельний елемент (Dy), діелектрик, тонкий шар вуглецю тощо. У результаті можна отримати нове мультишарове середовище зі зовсім новими практично важливими технологічними властивостями. Процес дифузії атомів в такій системі з наявністю елементних взаємодій «активний елемент» (Fe) — «пасивний елемент» (Dy); буде лімітований обмеженою проникністю «пасивного» елементу в суміжний шар, заповнений «активним» елементом. Зворотній процес буде супроводжуватись значною проникністю «активного» елемента в зону «пасивного», супроводжуючи його сумісну дифузію в шарі.

Математична модель такого переносу з урахуванням вказаних фізичних чинників може бути описана у вигляді такої мішаної крайової задачі. На областях  $\Omega_{k_T} = (0, T) \times \Omega_k$ , ( $\Omega_k = (l_{k-1}, l_k)$ ),  $k = \overline{1, n+1}$ ,  $l_0 = 0 < l_1 < \dots < l_{n+1} = l < \infty$  концентрації  $U_{1_k}(t, z), U_{2_k}(t, z)$ , з урахуванням [5; 7] задовольняють системі рівнянь з частинними похідними

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

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

$$\begin{aligned} &\left( \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{11_{s_1}} U_{1_{s_1}}(t, z) + D_{12_{s_1}} U_{2_{s_1}}(t, z) \right) - \right. \\ &\left. - \left( D_{11_{s_2}} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{1_{s_2}}(t, z) + D_{12_{s_2}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s_2}}(t, z) \right) \right) \Big|_{z=l_k} = (-1)^{k+1} \omega_k(t), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\left( D_{22_{2k}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{2k}}(t, z) - D_{22_{k+1}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{k+1}}(t, z) \right) \Big|_{z=l_k} = \omega_{2k}(t), \quad (23)$$

$$k = \overline{1, n}, \quad t \in (0, T),$$

де

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

**Вибір функціонала-нев'язки.** Вважаємо, що коефіцієнти дифузії  $D_{sp}$ ,  $s, p = \overline{1, 2}$  крайової задачі (21), (3), (4), (22), (23) є невідомими.

Однак на поверхнях областей  $\gamma_k \subset \Omega_k, k = \overline{1, n+1}$ , неоднорідного середовища відомі сліди розв'язків (концентрацій):

$$U_{s_k}(t, z)|_{\gamma_k} = f_{s_k}(t, z)|_{\gamma_k}. \quad (24)$$

Тим самим отримана задача (21), (3), (4), (22)—(24), що полягає в знаходженні функцій  $D_{sp_k} \in D$ , де

$$D = \left\{ v(t, z) : v|_{\Omega_{kT}} \in C(\Omega_{kT}), v > 0, k = \overline{1, n+1} \right\}.$$

Функціонал-нев'язку, що визначає величину відхилення шуканого розв'язку від слідів розв'язку, отриманого емпіричним шляхом на поверхнях  $\gamma_k$ , запишемо у вигляді [16]:

$$J_s(D_{sp}) = \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left( \|U_{s_k}(\tau, z, D_{sp_k}) - f_{s_k}\|_{L_2(\gamma_k)}^2 \right) \sigma_k dz d\tau, \quad (25)$$

де

$$\|\varphi\|_{L_2(\gamma_m)}^2 = \int_{\gamma_m} \varphi^2 d\gamma_m \text{ — квадрат норми.}$$

$$\text{У цьому випадку } \|\varphi\|_{L_2(\gamma_m)} = |\varphi(t, z)|_{z=\gamma_m}.$$

Схема алгоритму побудови аналітичного розв'язку прямої задачі  $u_1$ . Інтегральні оператори прямої і оберненої дії. Застосуємо до рівняння

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D_{22_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) U_{2_k} = 0, \quad k = \overline{1, n+1} \quad (26)$$

з початковими умовами

$$U_{2_k}(t, z)|_{t=0} = U_{02_k}(z), \quad (27)$$

крайовими та інтерфейсними умовами (3), (4) для  $s = 2$  та (23) запроваджене нами інтегральне перетворення Фур'є [11], визначене інтегральним оператором  $F_n$  прямої дії,

$$F_n[U_2(t, z)] = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} U_{2_k}(t, z) V_k(z, \beta_m) \sigma_k dz \equiv U_{2_n}(t). \quad (28)$$

інтегральним оператором  $F_n^{-1}$  зворотної до  $F_n$  дії:

$$F_n^{-1}[\dots] = \left[ \begin{array}{c} \dots \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_k(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|_1^2 \right)^{-1}, k = \overline{1, n+1}, \\ \dots \end{array} \right], \quad (29)$$

та основною тотожністю інтегрального перетворення диференціального оператора Лапласа

$$\mathcal{L}_n = \left[ \sum_{k=1}^n D_{22_k} \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + D_{22_{n+1}} \theta(z - l_n) \right] \frac{d^2}{dz^2},$$

де  $\theta$  — одинична функція Гевісайда

$$F_n \left[ \mathcal{L}_n \left[ U_2(t, z) \right] \right] = -\beta_m^2 U_{2_m}(t). \quad (30)$$

Математичне обґрунтування запровадженого нами інтегрального перетворення Фур'є подано в [11].

У результаті застосування інтегральних операторів (28), (30) до розглядуваної крайової задачі отримуємо задачу Коші

$$\left[ \frac{d}{dt} + \beta_m^2 \right] U_{2_m}(t) = \mathcal{F}_{2_m}(t), \quad (31)$$

$$U_m(t) \Big|_{t=0} = U_{02_m},$$

де

$$U_{2_m}(t) = \sum_{k=1}^{n+1} U_{2_{km}}(t); \quad U_{2_{km}}(t) = \int_{l_{k-1}}^{l_k} U_{2_k}(t, z) V_k(z, \beta_m) \sigma_k dz;$$

$$\mathcal{F}_{2_m}(t) = \sum_{k=1}^n \sigma_k \left[ \beta_m D_{22_k} \frac{d}{dz} V_{k+1}(l_k, \beta_m) \Big|_{z=l_k} \omega_{2k}(t) \right], \quad U_{02_m} = \sum_{j=1}^{n+1} U_{02_{km}}(z).$$

Розв'язком задачі Коші (31) є функція

$$U_{2_m}(t) = e^{-\beta_m^2 t} U_{02_m} + \int_0^t e^{-\beta_m^2(t-\tau)} \mathcal{F}_{2_m}(\tau) d\tau. \quad (32)$$

Застосувавши за правилом множення матриць до  $\left[ U_{2_m}(t) \right]$  (32) як матриці-елемента операторну матрицю-стовпець (29), після нескладних перетворень отримуємо компоненти

$$U_{2_k}(t, z) = \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi) U_{02_{k_1}}(\xi) \sigma_k d\xi + \sum_{k_1=1}^n \int_0^t \mathcal{R}_{k, k_1}^2(t - \tau, z) \omega_{2_{k_1}}(\tau) d\tau, \quad k = \overline{1, n+1}$$
(33)

вектор-функції  $U_2(t, z) = \{U_{2_1}(t, z), U_{2_2}(t, z), \dots, U_{2_{n+1}}(t, z)\}$ , що означає єдиний розв'язок крайової задачі (26), (27), (3), (4), (23).

Тут головні розв'язки задачі :

- матриця впливу, породжена неоднорідністю системи (26)

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

- матриця Гріна, породжена системою інтерфейсних умов  $z = l_k$

$$\mathcal{R}_{kk_1}^2(t, z) = \sigma_{k_1} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{\beta_m D_{22_{k_1}} \frac{d}{dz} V_{k_1+1}(l_{k_1}, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_k(z, \beta_m).$$

Підставляючи отримані компоненти розв'язку  $U_2(t, z)$  в перше рівняння вихідної крайової задачі (21) (3), (4), (22), (23), отримаємо крайову задачу для визначення концентраційних розподілів  $U_1(t, z)$ :

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D_{11_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) U_{1_k} = D_{12_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_k}(t, z) \equiv f_{1_k}(t, z), \quad k = \overline{1, n+1} \quad (34)$$

з початковими умовами

$$U_{1_k}(t, z)|_{t=0} = U_{01_k}(z), \quad (35)$$

крайовими умовами та інтерфейсними умовами (3), (4) ( $s = 1$ ) та

$$\left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{11_{s1}} U_{1_{s1}}(t, z)) - \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) (D_{11_{s2}} U_{1_{s2}}(t, z)) \right) \Big|_{z=l_k} = \bar{\omega}_k(t). \quad (36)$$

Тут

$$\bar{\omega}_k(t) = (-1)^{k+1} \omega_k(t) - \left( D_{12_{s1}} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) U_{2_{s1}}(t, z) - D_{12_{s2}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s2}}(t, z) \right).$$

Застосувавши до крайової задачі (35)—(36), (3)—(4) інтегральний оператор прямої дії  $F_n$  (28) та основну тотожність (30), отримуємо задачу Коші:

$$\left[ \frac{d}{dt} + \beta_m^2 \right] U_{1_m}(t) = \mathcal{F}_{1_m}(t), \quad (37)$$

$$U_m(t)|_{t=0} = U_{01_m}.$$

$$\text{Тут } U_{1_m}(t) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} U_{1_k}(t, z) V_k(z, \beta_m) \sigma_k dz, \quad U_{01_m} = \sum_{j=1}^{n+1} U_{01_{jm}}(z),$$

$$\mathcal{F}_{1_m}(t) = f_{1_m}(t) + \sum_{k=1}^n \sigma_k \left[ \beta_m D_{11_k} \frac{d}{dz} V_{k+1}(l_k, \beta_m) \right]_{z=l_k} \bar{\omega}_k(t).$$

Розв'язком задачі Коші (37) є функція

$$U_{1_m}(t) = e^{-\beta_m^2 t} U_{01_m} + \int_0^t e^{-\beta_m^2(t-\tau)} \mathcal{F}_{1_m}(\tau) d\tau. \quad (38)$$

Застосувавши до  $[U_{1_m}(t)]$  (38) інтегральний оператор оберненої дії (30), після перетворень отримуємо компоненти

$$\begin{aligned} U_{1_k}(t, z) = & \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{k, k_1}(t-\tau, z, \xi) \times \\ & \times \left[ D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(\tau, \xi) - U_{01_{k_1}}(\xi) \delta_+(\tau) \right] \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\ & + \sum_{k_1=1}^n \int_0^t \mathcal{R}_{k, k_1}^1(t-\tau, z) \left( (-1)^{k_1+1} \omega_{l_{k_1}}(\tau) - \right. \\ & \left. - \left( D_{12_{s_1}} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \tau} \right) U_{2_{s_1}}(\tau, z) - D_{12_{s_2}} \frac{\partial}{\partial z} U_{2_{s_2}}(\tau, z) \right) \right) d\tau; \end{aligned} \quad (39)$$

$$s_1, s_2 \in \{k_1, k_1 + 1\}, k = \overline{1, n+1}$$

вектор-функції  $U_1(t, z) = \{U_{1_1}(t, z), U_{1_2}(t, z), \dots, U_{1_{n+1}}(t, z)\}$ , що визначає єдиний розв'язок крайової задачі (35)—(36), (3)—(4).

Тут матриця функцій Гріна, породжених системою інтерфейсних умов  $z = l_k$ :

$$\mathcal{R}_{kk_1}^1(t, z) = \sigma_{k_1} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{\beta_m D_{11_{k_1}} \frac{d}{dz} V_{k_1+1}(l_{k_1}, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_k(z, \beta_m).$$

Для випадку, коли відсутні фазові перетворення дифундованих компонент на межах, тобто коли функції  $\omega_{s_k}(\tau) = 0$ ,  $k = \overline{1, n}$ ;  $s = \overline{1, 2}$ , аналітичні вирази розв'язків (33), (39) спростяться і не будуть включати в себе відповідні компоненти, що містять ці функції.

**Неоднорідна постановка початково-крайової задачі для приростів.** З урахуванням приростів коефіцієнтів дифузії  $D_{sp_m}^n + \Delta D_{sp_m}^n$ , на основі задачі (35)—(36), (3)—(4) 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 таку початково-крайову задачу [13—17]:

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



$$\begin{aligned}
 & +\Delta D_{11_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_m} - \Delta D_{12_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}, \\
 & \frac{\partial}{\partial t} v_{2_m}(t, z) = \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{22_m}^n \frac{\partial}{\partial z} v_{2_m} \right) + \\
 & + \Delta D_{22_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}, z \in \Omega_{m_T}, m = \overline{1, N+1}
 \end{aligned} \tag{40}$$

з початковими умовами

$$v_{s_i}(t, z)|_{t=0} = 0, z \in \Omega_m, m = \overline{1, N+1}, \tag{41}$$

крайовими та інтерфейсними умовами між шарами частинок по  $z$ :

$$\begin{aligned}
 D_1 \frac{\partial}{\partial z} v_{s_1}(t, z)|_{z=0} = 0, D_{n+1} \frac{\partial}{\partial z} v_{s_{N+1}}(t, z)|_{z=l} = 0, t \in (0, T), \\
 \left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{11_m}^n v_{1_m}(t, z) + D_{12_m}^n v_{2_m}(t, z)) - \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \times \right. \\
 \left. \times (D_{11_{m+1}}^n v_{1_{m+1}}(t, z) + D_{12_{m+1}}^n v_{2_{m+1}}(t, z)) \right) \Big|_{z=l_m} = \\
 = \left( \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) (\Delta D_{11_{m+1}}^n U_{1_{m+1}}(t, z) + \Delta D_{12_{m+1}}^n U_{2_{m+1}}(t, z)) - \right. \\
 \left. - \frac{\partial}{\partial z} (\Delta D_{11_m}^n U_{1_m}(t, z) + \Delta D_{12_m}^n U_{2_m}(t, z)) \right) \Big|_{z=l_m} \\
 \frac{\partial}{\partial z} (D_{22_m}^n v_{2_m}(t, z) - D_{22_{m+1}}^n v_{2_{m+1}}(t, z)) \Big|_{z=l_m} = \\
 = \frac{\partial}{\partial z} (\Delta D_{22_{m+1}}^n U_{2_{m+1}}(t, z) - \Delta D_{22_m}^n U_{2_m}(t, z)) \Big|_{z=l_m}, k = \overline{1, n}, t \in (0, T)
 \end{aligned} \tag{42}$$

**Неоднорідна спряжена задача.** З урахуванням викладених вище міркувань у відповідності з вихідною крайовою задачею, наслідуючи [12; 13] для кожного наближення  $D_{inter\ m}^n, D_{intra\ m}^n$ , розв'язку  $D_{inter\ m}^n$ ,  $D_{intra\ m}^n$  вводимо до розгляду неоднорідну спряжену крайову задачу:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{1_m}(t, z) + D_{11_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{1_k}(t, z) &= (U_{1_k}^n - f_{1_k}) \Big|_{z=\gamma_k}, \\
 \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{2_k}(t, z) - D_{12_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{1_k}(t, z) &+ \\
 + D_{22_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{2_k}(t, z) &= (U_{2_k}^n - f_{2_k}) \Big|_{z=\gamma_k}, k = \overline{1, n+1},
 \end{aligned} \tag{44}$$

умови при  $t = T$

$$\varphi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0; \quad (45)$$

крайові та інтерфейсні умови по змінній  $z$

$$\frac{\partial}{\partial z} \varphi_{s_1}(t, z) \Big|_{z=0} = 0; \quad \frac{\partial}{\partial z} \varphi_{s_{N+1}}(t, z) \Big|_{z=l} = 0, \quad t \in (0, T); \quad (46)$$

інтерфейсні умови між тонкими шарами по  $z$

$$\left[ \varphi_{s_m}(t, z) - \varphi_{s_{m+1}}(t, z) \right]_{z=l_m} = 0, \quad (47)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{1,1s_1} \varphi_{1,1} + D_{2,1s_1} \varphi_{2,1}) - \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial t} \right) (D_{1,1s_2} \varphi_{1,2} + D_{2,1s_2} \varphi_{1,2}) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad (48)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{22k} \varphi_{2k}) - \frac{\partial}{\partial z} (D_{22k+1} \varphi_{2k+1}) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n}, \quad t \in (0, T). \quad (49)$$

**Побудова аналітичного розв'язку спряженої неоднорідної крайової задачі.** Для побудови аналітичного розв'язку спряженої неоднорідної крайової задачі (44)—(49) застосовувався підхід, описаний вище для прямої задачі з використанням запровадженого інтегрального перетворення [11; 12]. В результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} \varphi_{1_k}(t, z) &= \int_t^T \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \bar{\mathcal{H}}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi) \left( \left( U_{1_{k_1}}^n - f_{1_{k_1}} \right) \Big|_{z=\gamma_{k_1}} \right) (\tau) \sigma_{k_1} d\xi \\ \varphi_{2_k}(t, z) &= \int_t^T \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \bar{\mathcal{H}}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi) \left( \left( U_{2_{k_1}}^n - f_{2_{k_1}} \right) \Big|_{z=\gamma_{k_1}} \right) + \\ &+ D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{1_{k_1}}(\tau, \xi) \Big|_{z=l_{k_1}} \sigma_{k_1} d\xi, \quad k, k_1 = \overline{1, n+1}. \end{aligned} \quad (50)$$

Тут  $\bar{\mathcal{H}}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi)$  — спряжена матриця впливу Коші (головних розв'язків задачі), породжених неоднорідністю спряженої системи (44). Матриця впливу Коші, породжена неоднорідністю системи (26):

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

де необхідні структурні компоненти запровадженого інтегрального перетворення (система власних функцій  $\{V_k(z, \beta_m)\}_{m=0}^{\infty}$ , основна тожність та інтегральні оператори прямої і зворотної дії) на відміну

від прямої задачі одержуються для такого гібридного диференціального оператора Лапласа

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

**Формули для компонент градієнтів.** Наслідуючи [13—19], отримуємо формули, що встановлюють зв'язок між прямою та спряженою задачами. Запишемо основні рівняння задачі для приростів (40) в операторній формі

$$\mathcal{L}v_{s_m}(t, z) = X_{s_m} v_{s_m} \in \Omega_{mT},$$

де

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

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

$$X_{2_m}(t, z) = \Delta D_{22_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}, \quad m = \overline{1, n+1}.$$

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

$$\left( \mathcal{L}_s v_{s_m}, \varphi_{s_m} \right) = \sum_{m=1}^{n+1} \iint_{\Omega_{mT}} \varphi_{s_m} \mathcal{L}_s v_{s_m}(t, z) dz dt, \quad (51)$$

де  $\varphi_{s_m}(t, z)$  досить гладкі функції відповідно в  $\overline{\Omega}_{mT}$ .

Для (51) мають місце тотожності Лагранжа

$$\left( \mathcal{L}_s v_{s_m}, \varphi_{s_m} \right) = \left( v_{s_m}, \mathcal{L}_s^* \varphi_{s_m} \right). \quad (52)$$

Перетворивши приріст функціоналу-нев'язки

$$\Delta J_s(D_{sp_m}) = \int_0^T \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} v_{s_m}(t, z) e_{sm}(t) \delta(z-l_m) dz d\tau + O\left( \max_m |\Delta U_{s_m}| \right),$$

зробивши заміну  $v_{s_m} = \mathcal{L}_s^{-1} X_{s_m}$  із введенням спряженого оператора, отримаємо

$$\Delta J_s(D_{sp_m}) = \sum_{m=1}^{n+1} \left( \left( X_{s_m}(t, z), \mathcal{L}_s^{-1*} \left[ e_{s_m}(t) \delta(z-l_m) \right] \right) \right) + O\left( \max_m |\Delta U_{s_m}| \right). \quad (53)$$

Використовуючи рівність  $\mathcal{L}^{-1*} \left[ e_{s_m}(t) \delta(z-l_m) \right] = \varphi_{s_m}$  в силу тотожності Лагранжа (53), де  $\varphi_{s_m} = \varphi_{s_m}(t, z)$  — розв'язок спряженої

крайової задачі та розкриваючи в (53)  $X_{s_m}(t, z)$ , одержуємо формулу зв'язку між прямою і спряженою задачами, що визначає структуру виразу градієнта функціоналу

$$\Delta J_s(D_{s p_m}) = \sum_{m=1}^{n+1} \left[ \left( \varphi_{s_m}(t, z), X_{s_m}(t, z) \right) + O\left( \max_m |\Delta U_{s_m}| \right) \right],$$

або

$$\begin{aligned} \Delta J_2(D_{2 p_m}) &= \sum_{m=1}^{n+1} \left[ \left( \varphi_{2_m}(t, z), X_{2_m}(t, z) \right) + O\left( \max_m |\Delta U_{2_m}| \right) \right] = \\ &= \sum_{m=1}^{n+1} \left( \left( \varphi_{2_m}(t, z), \Delta D_{22_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}(t, z) \right) + O\left( \max_m |\Delta u_m| \right) \right), \\ \Delta J_1(D_{1 p_m}) &= \sum_{m=1}^{n+1} \left[ \left( \varphi_{1_m}(t, z), X_{1_m}(t, z) \right) + O\left( \max_m |\Delta U_{2_m}| \right) \right] = \quad (54) \\ &= \sum_{m=1}^{n+1} \left( \left( \varphi_{1_m}(t, z), \Delta D_{11_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_m} - \Delta D_{12_m}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m} \right) + O\left( \max_m |\Delta u_m| \right) \right), \end{aligned}$$

Продиференціювавши (54) по  $\Delta D_{22_m}$  а (55) по  $\Delta D_{11_m}$  та  $\Delta D_{12_m}$  і розкривши скалярний добуток, одержуємо аналітичні вирази для градієнтів функціоналу-нев'язки для компонент коефіцієнтів дифузії  $D$  :

$$\begin{aligned} \nabla J_{D_{22}} &= \int_0^T \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} \varphi_{2_m}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}(t, z) dz dt, \\ \nabla J_{D_{11}} &= \int_0^T \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} \varphi_{1_m}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_m}(t, z) dz dt, \quad (55) \\ \nabla J_{D_{12}} &= - \int_0^T \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} \varphi_{1_m}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_m}(t, z) dz dt. \end{aligned}$$

**3. Результати числового моделювання та ідентифікації.** Результати числового аналізу та ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії для двох компонент (**Fe** і **Dy**) з використанням параметричної моделі ідентифікації (на базі формул (55)) наведено на рис. 3—7 для різних часових дифузійних зрізів тривалістю 48, 36, 24, 16 і 12 год. Загальна товщина наномультиматеріалу складала 20 нм. Розглядалось чотири наночаси по 5 нм кожен. В якості даних експериментальних спостережень використовувались результати (рис. 3), отримані методами атомної спектроскопії для багатокомпонентних (Fe/Dy) наноплівки в Лабораторії фізики матеріалів Руанського університету (Франція) [2—4]. На рис. 4. (а—г) продемонстровані відновлені розподіли коефі-

ціентів дифузії при часових зрізах нанодифузії 48, 36, 24 і 12 год відповідно. Отриману кінетичну картину взаємної дифузії двох компонент (Fe-Dy) з урахуванням градієнтної взаємодії компонент проаналізуємо для однієї із інтерфейсних меж між сусідніми наночастинами, наприклад між першим і другим ( $z = l_1$ ). Для першого шару ( $0 \div 5\text{нм}$ ) ми отримуємо три розподіли значень коефіцієнтів дифузії для Fe при часових зрізах, що відповідають тривалостям нанодифузії дифузії 12, 24 і 48 год. Ці кінетичні розподіли (криві 1-3), що мають виражені загальні тенденції спадання від інтерфейсної межі  $l_1$  в напрямі до початку першого шару, характеризують інтенсивність дифузії компоненти Fe (що початково зосереджена в сусідньому 2-му шарі і складає основу,) в першому шарі. Крива 1 (часовий зріз 12 год) відповідає стану дифузії Fe в першому шарі, що містить компоненту Dy з найбільшою інтенсивністю. Крива 3 (часовий зріз 12 год) відповідає відповідному стану дифузії Fe з найнижчою інтенсивністю. Подібну картину спостерігаємо в зворотному напрямку: для міграції компоненти Dy в першому шарі і частковому переходу у другий. Аналогічна ситуація має місце для інших розглядуваних інтерфейсних меж між шарми ( $l_2, l_3$ ).

На рис. 5. (а—г) показані відтворені профілі концентрацій для двох дифундованих компонент Fe і Dy, побудованих з використанням відновлених розподілів коефіцієнтів дифузії, згідно рис. 4, які водночас відображають еволюцію структури для кожного із шарів (Fe-Dy) наномультікомпозиту. Як видно з представлених графіків, отримані розподіли в деякій мірі відображають картини розподілів коефіцієнтів дифузії і навпаки. Так, зокрема для першого і третього шарів ми спостерігаємо процес формування їх структури (для трьох аналогічних часових зрізів нанодифузії 12, 24, 48 год), основу яких визначають концентраційні профілі Fe. Ці кінетичні розподіли (криві 1-3), що мають виражені загальні тенденції спадання від інтерфейсної межі  $l_1$  в напрямі до початку першого шару, характеризують інтенсивність дифузії компоненти Fe (що початково зосереджена в сусідньому 2-му шарі і складає основу,) в першому шарі. Крива 1 (часовий зріз 12 год) відповідає стану дифузії Fe в першому шарі, що містить компоненту Dy з найбільшою інтенсивністю. Крива 3 (часовий зріз 12 год) відповідає відповідному стану дифузії Fe з найнижчою інтенсивністю. Подібну картину спостерігаємо в зворотному напрямку: для міграції компоненти Dy в першому шарі і частковому переходу у другий. Аналогічна ситуація має місце для інших розглядуваних інтерфейсних меж між шарми ( $l_2, l_3$ ).

На рис. 6. (а, б) відображені еволюційні картини, що показують наближення модельних концентраційних розподілів до відповідних експериментальних слідів для кожної із досліджуваних компонент. Такий підхід дає можливість отримати уточнену візію про внутрішню кінетику процесу для різних часових і просторових зрізів

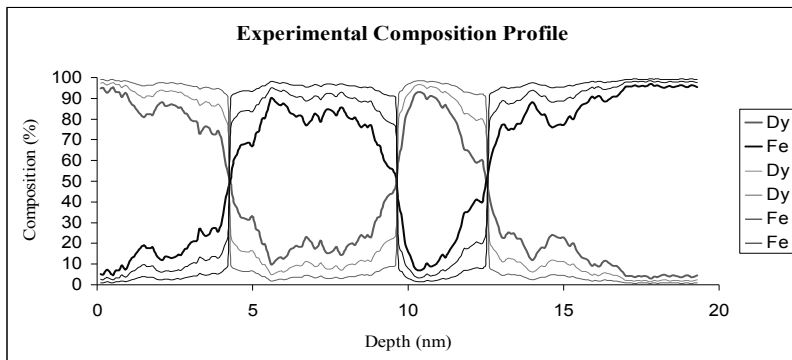
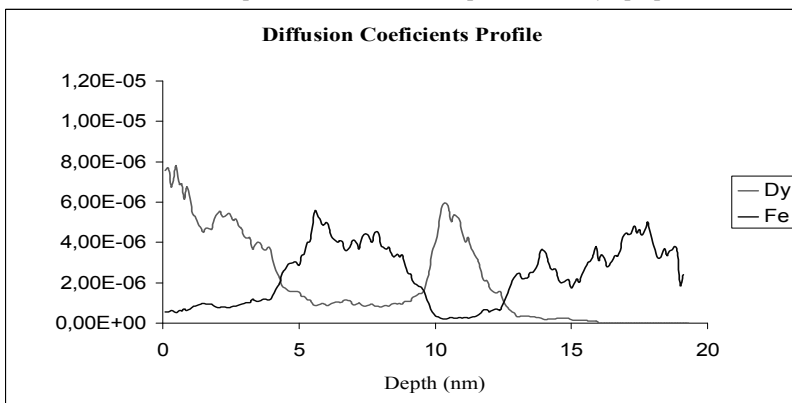
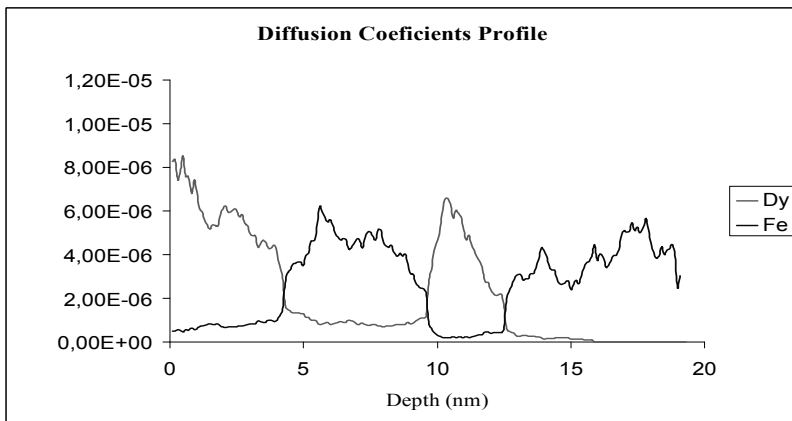


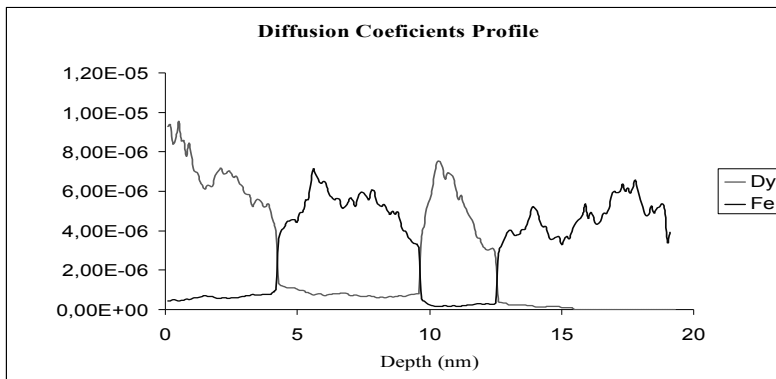
Рис. 3. Експериментальні концентраційні Fe/Dy профілі



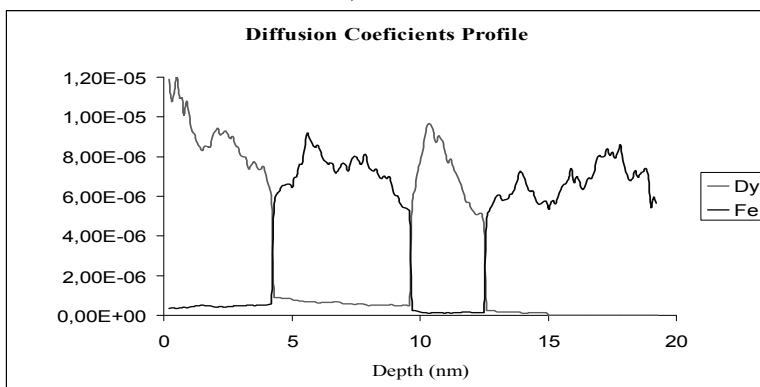
а) 48 год



б) 36 год

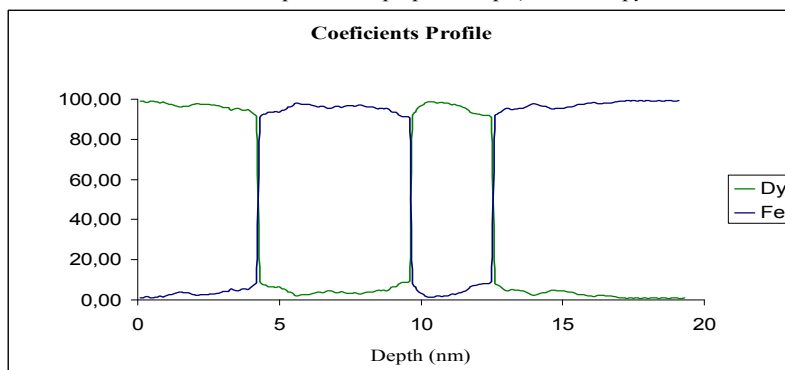


в) 24 год

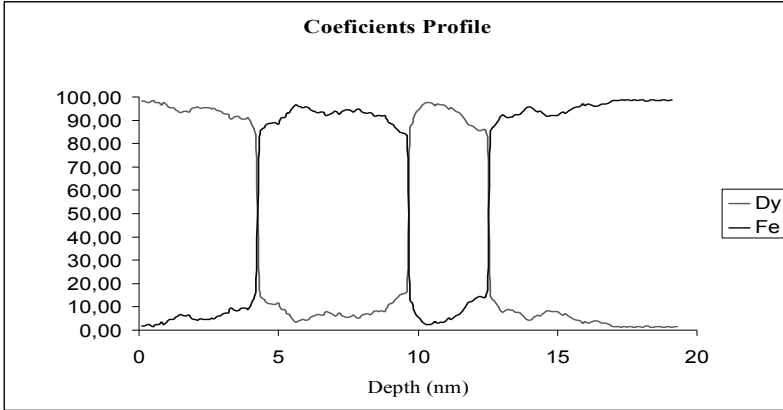


г) 12 год

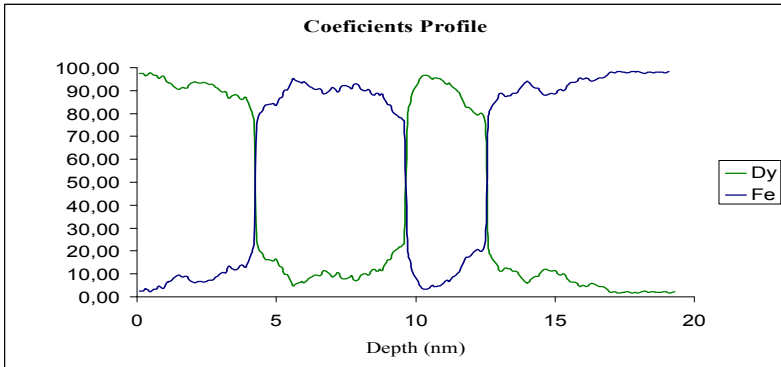
**Рис. 4.** Ідентифіковані профілі коефіцієнтів дифузії



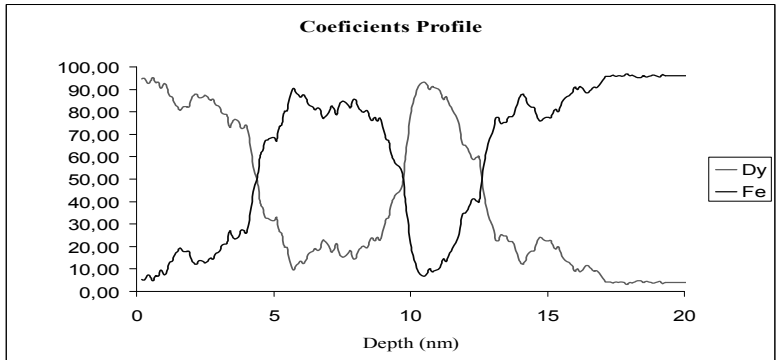
а) час 12 год



б) час 24 год



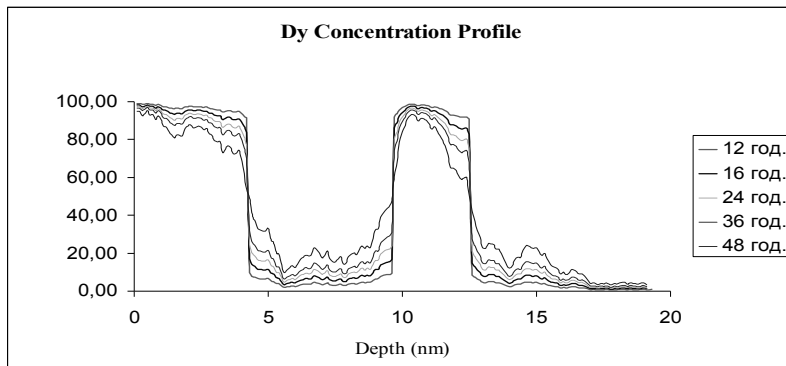
в) час 36 год



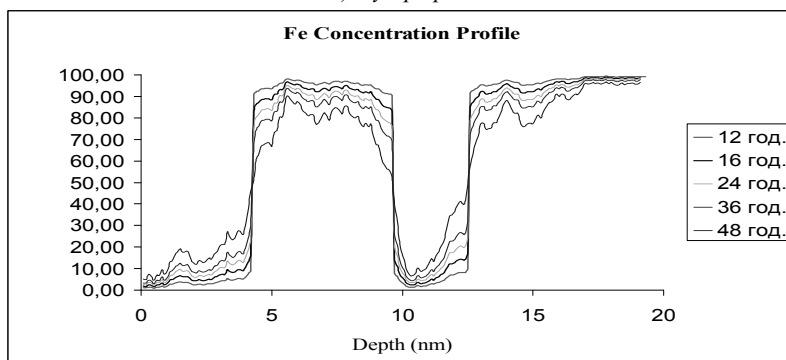
г) час 48 год

**Рис. 5.** Відтворені концентраційні Fe/Dy профілі





а) Dy-профілі



б) Fe-профілі

**Рис. 6.** Еволюція концентраційних Fe/Dy профілів

**Висновки.** Для моделей дифузійного масопереносу в неоднорідних мультикомпонентних середовищах, в тому числі, що містять «активну» і «пасивну» компоненти обґрунтовано постановки прямих і спряжених крайових задач функціональної ідентифікації. Реалізована методика параметричної ідентифікації коефіцієнтів дифузії для кожної із дифундованих компонент багатoshарового мультикомпоненту з використанням методології оптимального керування станом складними багатоконпонентними розподіленими системами, методів теорії крайових задач, зокрема, операційного числення Гевісайда та методу скінченних інтегральних перетворень. Проведена ідентифікація коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового масопереносу. За результатами ідентифікації виконана перевірка моделей на адекватність з результатами експериментальних спостережень.

Отримані результати дозволяють проводити ефективне моделювання кінетики процесу дифузії й можуть бути використані: для під-

вищення ефективності експериментальних досліджень кінетики переносу в багатокомпонентних нанопористих системах, дослідженні властивостей нових наноматеріалів у медицині, електроніці, хімічній та інших галузях.

### Список використаних джерел:

1. Cadel E. Atom probe tomography investigation of the microstructure of superalloys / E. Cadel, D. Lemarchand, S. Chambreland, D. Blavette // *Acta materialia*. — 2002. — Vol. 50, №18. — P. 957-966.
2. Tamion A. Three-dimensional atom probe investigation of Fe/Dy multilayer / A. Tamion, E. Cadel, C. Bordel, D. Blavette // *Scripta Materialia*. — 2006. — Vol. 54. — P. 671—675
3. Tamion A. 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. — P. 2650—2659.
4. Tamion A. Investigation of (Fe/Dy) multilayers by  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectrometry / A. Tamion, J. Jurshek, C. Bordel // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2007. — Vol. 313. — P. 306-311.
5. Tamion A. Influence of the interface local chemistry on the magnetic anisotropy of (Fe/Dy) multilayers / A. Tamion, E. Cadel, C. Bordel, D. Blavette // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2005. — Vol. 290—291. — Part 1. — P. 238—241.
6. Mehrer H. *Diffusion in Solids* / H. Mehrer. — Springer, 2007. — 650 p.
7. Kärgner J. *Diffusion fundamentals* / J. Kärgner, F. Grinberg, P. Heitjans. — Leipzig : Leipziger Unviersite, 2005. — 615 p.
8. Petryk M. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure / M. Petryk, S. Leclerc, D. Canet, J. Fraissard // *Diffusion Fundamentals*. — 2007. — P. 111—123.
9. Petryk M. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure : application to the diffusion of benzene in ZSM5 / M. Petryk, J. Fraissard, S. Leclerc, D. Canet // *Catalysis Today*, Elsevier. — 2008. — № 139 (3). — P. 234—240.
10. Петрик М. Р. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопористых частиц / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард // *Пробл. управления и информатики*. — 2008. — № 5.
11. Ленюк М. П. Интегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах / М. П. Ленюк, М. Р. Петрик. — К. : Наук. думка, 2000. — 372 с.
12. Петрик М. Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой п-интерфейсных взаимодействий / М. Р. Петрик // *Кибернетика и систем. анализ*. — 2007. — № 1. — С. 114—134.
13. Дейнека В. С. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических

- средах / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Пробл. управления и информатики. — 2011. — № 2. — С. 12—25.
14. Дейнека В. С. Оптимальное управление неоднородными распределенными системами / В. С. Дейнека, И. В. Сергиенко. — К. : Наук. думка, 2003. — 506 с.
  15. 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.
  16. Сергиенко И. В. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии двухкомпонентного вещества в нанопористых средах / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека // Доп. НАН України. — 2010. — № 12. — С. 42—49.
  17. Сергиенко И. В. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека // Пробл. управления и информатики. — 2010. — № 6. — С. 5—18.
  18. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена / О. М. Алифанов. — М. : Машиностроение, 1988. — 280 с.
  19. Сергиенко И. В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека. — К. : Наук. думка, 2009. — 638 с.

The direct and conjugate boundary problems for the identification of diffusion mass transfer models in heterogeneous nano composed medias is justified. Parametric identification of the diffusion coefficients and verification of models for adequacy using the optimal control methodology of state of complex multicomposed distributed systems, Heaviside operational method and Fourier finite integral transformation is performed.

**Key words:** *mathematical model of mass transport, parametric identification, direct and conjugate initial-boundary problems, nano multicomposite, Heaviside operational method, Fourier integral transformation, gradient of the functional of discrepancy.*

Отримано: 16.03.2011