

**ИДЕНТИФИКАЦИЯ  
КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ  
НЕОДНОРОДНЫХ ЗАДАЧ  
ДИФФУЗИИ В  
НАНОМУЛЬТИКОМПОЗИТАХ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ  
ГРАДИЕНТНЫХ МЕТОДОВ**

*Предложена методика идентификации параметров диффузии в неоднородных наномультиматериалах с использованием методологии оптимального управления состоянием сложных многокомпонентных систем и интегральных преобразований. Произведено восстановление функциональных зависимостей от времени компонентов коэффициентов диффузии для Fe/Dy-наномультиматериала для различных поверхностей наблюдения.*

**Введение.** Исследование диффузионной кинетики многослойных нанокмполитов и тонких нанопленок дает возможность создания на базе материалов с известными свойствами материалов и сред с новыми свойствами (новые явления электрической и магнитной проводимости, адсорбционные эффекты). Подобные эффекты связаны со структурными изменениями сред при агрегации нанослоев с разными свойствами и наличием переменных градиентов концентраций на поверхностях раздела пластов [1–4]. Это требует создания новых методов и моделей идентификации параметров переноса в таких наноструктурах с учетом интерфейсных взаимодействий между нанослоями [5–8]. Актуальными являются также исследования сгущенных (Fe/Dy, Fe/Te) магнитных многослойных пленок с поочередной агрегацией нанослоев с высоко- и низкопроводными материалами (магнетики и редкоземельные элементы (тербий, диспрозиум и т. п.). Одни из первых таких нанобразцов и концентрационные профили их составляющих получены методами атомной томографии в Университете г. Руан (Франция) [1, 2]. Отдельные

расчеты диффузных характеристик этих сред выполнялись при участии авторов.

**Математическая модель с учетом двусторонних градиентных взаимодействий.** Рассматривается мультикомпозиционная наносреда, состоящая с  $n$  двойных нанослоев двух материалов с разными свойствами. Диффузия атомов компонентов 1 и 2 между сопредельными слоями, вызвана наличием переменных во времени градиентов концентраций на интерфейсных границах, что приводит к химическому смешиванию границ раздела (рис. 1).

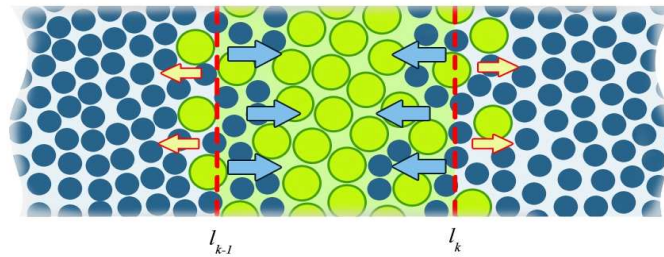


РИС. 1. Схематизация элемента градиентного взаимодействия компонентов между смежными нанослоями среды

Концентрационные профили для такой многокомпонентной системы получаются из системы уравнений переноса на основании закона Фика в комбинации с краевыми условиями внешних нанослоев и системой интерфейсных условий между последовательными слоями. Математическая модель такого переноса описывается в виде следующей смешанной краевой задачи. На областях  $\Omega_{k_T} = (0, T) \times \Omega_k$  ( $\Omega_k = (l_{k-1}, l_k)$ ,  $k = 1, n+1$ ,  $l_0 = 0 < l_1 < \dots < l_{n+1} = l < \infty$ ) концентрации  $U_{1_k}(t, z)$ ,  $U_{2_k}(t, z)$ , с учетом [3, 4] удовлетворяют системе уравнений в частных производных

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

Начальные условия:

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

Граничные и интерфейсные условия между тонкими слоями по  $z$

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

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

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

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

С позиции практических применений важные случаи есть, когда  $D_{12k} = 0$  или  $D_{21k} = 0$ , отвечающие кинетике взаимодействия двух элементов с противоположными показателями кинетических параметров: «активной» (высокий показатель) и «пассивной» компоненты (низкий) и как подтверждают эксперименты приводит к получению новых физических эффектов [1, 2]. Процесс диффузии атомов в такой системе с наличием элементарных взаимодействий «активный элемент» ( $Fe$  – ферромагнетик) – «пассивный элемент» ( $Dy$  – редкоземельный элемент) лимитируется ограниченной проницаемостью «пассивного» элемента в сопредельный пласт, заполненный «активным» и будет сопровождаться значительной проницаемостью «активного» элемента в зону «пассивного».

В работе [4] нами установлены условия разрешения задачи и построено методом функций влияния Коши и преобразования Лапласа общее аналитическое решение задачи. С помощью обобщенного нами в [5] интегрального преобразования Фурье получаем единственное решение краевой задачи (1)–(4):

$$U_{2_k}(t, z) = \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathbf{H}_{k,k_1}(t - \tau, z, \xi) U_{0_{2_{k_1}}}(\xi) \sigma_k d\xi,$$

$$U_k(t, z) = \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathbf{H}_{k,k_1}(t - \tau, z, \xi) \left[ D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(\tau, \xi) - U_{0_{1_{k_1}}}(\xi) \delta_+(\tau) \right] \sigma_{k_1} d\xi d\tau, \quad k = \overline{1, n+1}. \quad (5)$$

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

(МВК),  $V_k(z, \beta_m), \beta_m; m = \overline{1, \infty}$  – компоненты собственных функций и значений [5].

**Постановка прямой задачи идентификации.** Следуя [4, 7, 8], рассмотрим прямую краевую задачу идентификации коэффициентов диффузии в параметрической и функциональной постановках.

**Задача идентификации.** На областях  $\Omega_{k_T}$  концентрации  $U_{1_k}(t, z), U_{2_k}(t, z)$  с учетом [4, 7] удовлетворяют системе уравнений в частных производных (1) с начальными (2), граничными и интерфейсными условиями между тонкими слоями по  $z$  (3) и

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( D_k \begin{bmatrix} U_{1_k}(t, z) \\ U_{2_k}(t, z) \end{bmatrix} - D_{k+1} \begin{bmatrix} U_{1_{k+1}}(t, z) \\ U_{2_{k+1}}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n}, \quad t \in (0, T). \quad (6)$$

Для получения решения задачи в форме реализации процедуры функциональной идентификации при условии, что известны следы решения для каждого тонкого  $k$ -го сегмента,  $k = \overline{1, n+1}$ , задача (1)–(3), (6) трансформируется в систему однородных краевых задач для последовательных тонких нанослоев (1), (2) и краевыми условиями первого рода

$$U_{s_k}(t, z) \Big|_{z=l_{k-1}} = U_{sl_{k-1}}; \quad U_{s_k}(t, z) \Big|_{z=l_k} = U_{sl_k}, \quad s = \overline{1, 2}. \quad (7)$$

**Выбор функционала-невязки.** Считаем, что коэффициенты диффузии  $D_{sp}$ ,  $s, p = \overline{1, 2}$ , задачи (1)–(3), (6) неизвестны. Однако на поверхностях областей  $\gamma_k \subset \Omega_k$ ,  $k = \overline{1, n+1}$ , неоднородной среды известны следы решений

$$U_{s_k}(t, z) \Big|_{\gamma_k} = f_{s_k}(t, z) \Big|_{\gamma_k}. \quad (8)$$

Тем самым полученная задача (1)–(3), (6), (8), которая состоит в нахождении функций  $D_{sp} \in D$ , где  $D = \{v(t, z): v|_{\Omega_{k_T}} \in C(\Omega_{k_T}), v > 0, k = \overline{1, n+1}\}$ .

Функционал-невязку, определяющего отклонение искомого решения от следов решения, полученного эмпирическим путем на поверхностях  $\gamma_k$ , для задачи параметрической идентификации запишется в виде [7, 8]:

$$J_s(D_{sp}(t)) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left( \|U_{s_k}(\tau, z, D_{sp_k}) - f_{s_k}\|_{L_2(\gamma_k)}^2 \right) \sigma_k dz, \quad (9)$$

где  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_m)}^2 = \int_{\gamma_m} \varphi^2 d\gamma_m$  – квадрат нормы. Здесь  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_m)} = |\varphi(t, z)|_{z=\gamma_m}$ .

При известных концентрациях  $U_{s_m}(t, z)$  краевая задача (1)–(3), (6), (8) может быть рассмотренная для каждой точки  $z$ , для каждого  $m$ -го сегмента. Функционал-

невязка отклонения искомого решения от его следов на поверхностях наблюдения  $\gamma \in \Omega_m$  запишется в виде (для функциональной идентификации):

$$J_s(D_{sp}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left( \|U_{s_k}(t, l_k, D_{spk}) - f_{s_k}\|_{L_2(\gamma_k)}^2 \right) dt. \quad (10)$$

Построение решений прямых задач идентификации (1)–(3), (6) и (1), (2), (7) выполнено в [4] с установлением условий их разрешимости.

**Постановки неоднородных сопряженных задач идентификации.** В соответствии с исходной краевой задачей и краевой задачей для приращений [4], следуя [6–8], для каждого приближения  $D_{inter m}^n, D_{intra m}^n$ , решения  $D_{inter m}, D_{intra m}$  вводим к рассмотрению неоднородную сопряженную краевую задачу параметрической идентификации

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

Условия при  $t = T$

$$\phi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0. \quad (12)$$

Граничные и интерфейсные условия по переменной  $z$

$$\frac{\partial}{\partial z} \phi_{s_1}(t, z) \Big|_{z=0} = 0; \quad \frac{\partial}{\partial z} \phi_{s_{N+1}}(t, z) \Big|_{z=l} = 0, \quad t \in (0, T); \quad (13)$$

и интерфейсные условия между тонкими слоями по  $z$

$$\begin{aligned} [\phi_{s_m}(t, z) - \phi_{s_{m+1}}(t, z)] \Big|_{z=l_m} &= 0, \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{11_{s_1}} \phi_{1_{s_1}} + D_{21_{s_1}} \phi_{2_{s_1}}) - \frac{\partial}{\partial z} (D_{11_{s_2}} \phi_{1_{s_2}} + D_{21_{s_2}} \phi_{1_{s_2}}) \right) \Big|_{z=l_k} &= 0, \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} (D_{22_k} \phi_{2_k}) - \frac{\partial}{\partial z} (D_{22_{k+1}} \phi_{2_{k+1}}) \right) \Big|_{z=l_k} &= 0, \quad k = \overline{1, n}, \quad t \in (0, T). \end{aligned} \quad (14)$$

С учетом того, что решение прямой задачи необходимо иметь в форме, удобной для реализации процедуры функциональной идентификации и при условии, что известные следы решения для каждого довольно тонкого  $k$ -го сегмента,  $k = \overline{1, N+1}$ , можно переформатировать сопряженную краевую задачу

(11)–(14) в систему однородных краевых задач для последовательных тонких диффузионных нанослоев (11), (12) и краевыми условиями первого рода:

$$\phi_{s_k}(t, z) \Big|_{z=l_{k-1}} = 0; \quad \phi_{s_k}(t, z) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad s = \overline{1, 2}. \quad (15)$$

**Аналитическое решение сопряженной неоднородной краевой задачи.**

Для построения аналитического решения сопряженной неоднородной краевой задачи параметрической идентификации (11)–(14) применялся подход, описанный выше для прямой задачи с использованием предложенного интегрального преобразования [4, 5]. В результате получаем

$$\phi_{1_k}(t, z) = \int_t^T \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \bar{H}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi) \left( \left( U_{1_{k_1}}^n - f_{1_{k_1}} \right) \Big|_{z=\gamma_{k_1}} \right) (\tau) \sigma_{k_1} d\xi, \quad (16)$$

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

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

**Теорема** (о существовании и единственности решения сопряженной неоднородной краевой задачи (11)–(14)). Если выполняются условия

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d}{dt} - \beta_m^2 \right] \phi_{1_m}(t) &= \left[ U_{1_{k_1}}^n(\tau, \gamma_{k_1}) - f_{k_1}(\tau) \right]_m, \quad \phi_{1_m}(t) \Big|_{t=T} = 0, \\ \left[ \frac{d}{dt} - \beta_m^2 \right] \phi_{2_m}(t) &= \left[ \left( U_{2_{k_1}}^n(\tau, \gamma_{k_1}) - f_{2_{k_1}}(\tau) \right) + D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_{1_{k_1}}(\tau, z) \right]_m, \\ \phi_{2_m}(t) \Big|_{t=T} &= 0, \end{aligned} \quad (17)$$

то ограниченное решение сопряженной неоднородной краевой задачи (11)–(14) существует, единственно и определяется формулами (16).

Установление факта разрешимости неоднородной сопряженной краевой задачи непосредственно получается путем применения методики интегрального преобразования Фурье для многокомпонентной неоднородной среды [5].

Решение каждой  $k$ -ой задачи функциональной идентификации (11), (12), (15) с использования конечных интегральных преобразований Фурье имеет вид [4, 5]:

$$\begin{aligned} \phi_{1_{k_1}}(t, z) &= \frac{2}{\Delta l} \sum_{m=1}^{\infty} \left( \sin \beta_m (z - l_{k_1}) \int_t^T e^{D_{11_{k_1}}^{n_{\beta_m}}(t-\tau)} (U_{1_{k_1}}^n(\tau, \gamma_{k_1}) - f_{1_{k_1}}(\tau)) d\tau \right), \\ \phi_{2_{k_1}}(t, z) &= \frac{2}{\Delta l} \times \\ &\times \sum_{m=1}^{\infty} \left( \sin \beta_m (z - l_{k_1}) \int_t^T e^{D_{22_{k_1}}^{n_{\beta_m}}(t-\tau)} \left( U_{2_{k_1}}^n(\tau, \gamma_{k_1}) - f_{2_{k_1}}(\tau) + \right. \right. \\ &\left. \left. + D_{12_{k_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_{1_{k_1}}(\tau, z) \right) d\tau \right), \\ \beta_m &= \frac{m \pi}{\Delta l}, \Delta l = l_k - l_{k-1}; \quad k_1 = \overline{1, N_1 + 1}. \end{aligned} \quad (18)$$

**Аналитические выражения для компонентов градиентов** функционала-невязки получаются, следуя [6–8], для компонентов коэффициентов диффузии  $D$  с учетом вида функционала-невязки (10):

$$\begin{aligned} \nabla J_{D_{22_{k_1}}}(t) &= \phi_{2_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}), \quad \nabla J_{D_{11_{k_1}}}(t) = \phi_{1_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{1_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}), \\ \nabla J_{D_{12_{k_1}}}(t) &= -\phi_{1_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{2_{k_1}}(t, \lambda_{k_1}), \quad k_1 = \overline{1, N_1 + 1}. \end{aligned} \quad (19)$$

**Регуляризационное выражение для  $n + 1$ -го шага** для определения функциональной зависимости идентификации компоненты коэффициента диффузии  $D_{sp_{k_1}}^{n+1}$  от времени, следуя [6–8], с использованием метода минимальных погрешностей, для каждого  $m$ -го слоя  $m = \overline{1, N + 1}$ :

$$D_{sp_{k_1}}^{n+1}(t) = D_{sp_{k_1}}^n(t) - \nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^n(t) \frac{\left\| U_{s_{k_1}}(t, \gamma_{k_1}, D_{sp_{k_1}}) - f_{s_{k_1}} \right\|^2}{\left\| \nabla J_{D_{sp_{k_1}}}^n(t) \right\|_{\gamma_{k_1}}^2}, \quad t \in (0, T), s, p = \overline{1, 2}; k_1 = \overline{1, N_1}. \quad (20)$$

**Результаты численного анализа и идентификации распределений** коэффициентов диффузии для двух компонент ( $Fe$  и  $Dy$ ) с использованием предложенной модели функциональной идентификации показаны на рис. 2–6 для разных поверхностей наблюдений  $\gamma_{k_1}$  с общей продолжительностью наблюдения 48 ч. Исследуемая толщина нанокompозита составляла 20 нм. В качестве данных наблюдений использовались результаты (рис. 2) для многокомпонентных ( $Fe/Dy$ ) нанопленок [1].

Нанокompозитная среда разбивалась на 200 диффундирующих нанослоев по 0.1 нм, включающих соответствующие поверхности наблюдений, что обеспечило эффективную послойную реализацию методики идентификации. На рис. 3 (диаграмма слева) для поверхности наблюдения, соответствующей значению координаты толщины среды  $z = 7$  нм, показана эволюция функциональной



зависимости во времени коэффициента диффузии  $D_{11_{k_1}}^n$ , восстановленной по регуляризационной процедуры идентификации (20). Здесь представлены группы итераций, существенно влияющие на сходимость решения  $U_{1_{k_1}}$  к его экспериментальному следу  $f_{1_{k_1}}(t, \gamma_{k_1})$ , визуализация которого показана на рис. 4. В качестве начального приближения для идентификации функциональной зависимости компоненты коэффициента диффузии взято  $D_{11_m}^0(t) = 1.48 \times 10^{-7} \text{ м/с}^2$ . По мере прохождения итераций функциональная зависимость  $D_{11_{k_1}}^n(t)$  меняется по всему временному диапазону. Для последней группы итераций (рис. 4) достигается достаточно устойчивая картина профиля зависимости  $D_{11_{k_1}}^n(t)$ , которая обеспечивает максимальное приближение модельного решения  $U_{11_{k_1}}^n(t, \gamma_{k_1})$  к экспериментальному следу  $f_{k_1}(t)$ .

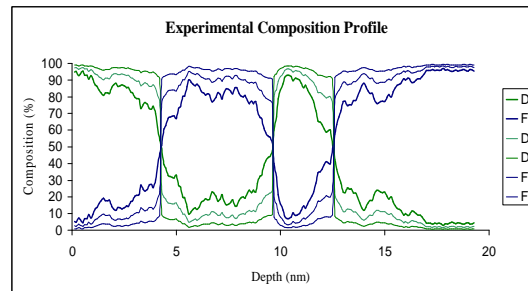


РИС. 2. Экспериментальные  $Fe/Dy$  профили

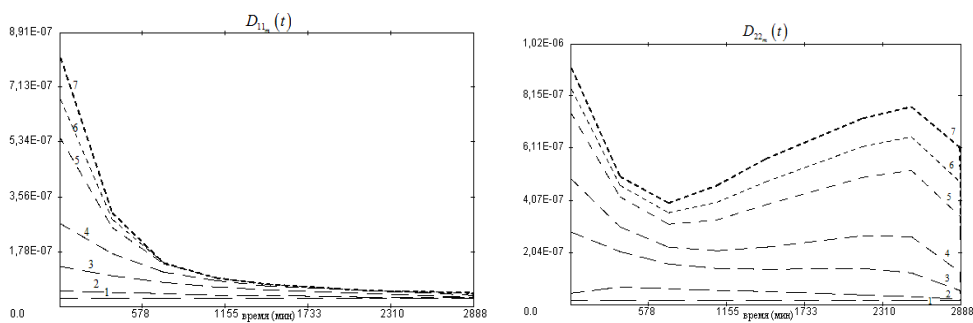


РИС. 3. Восстановление функциональной зависимости компонентов  $D_{11_m}$   $D_{22_m}$  коэффициентов диффузии от времени на каждой итерации ( $z = 7 \text{ nm}$ ): 1) начальное приближение, итерации: 2) 100-и; 3) 500-и; 4) 1000-и; 5) 2500-и; 6) 3500-и; 7) 4500-и; 8) эксперимент

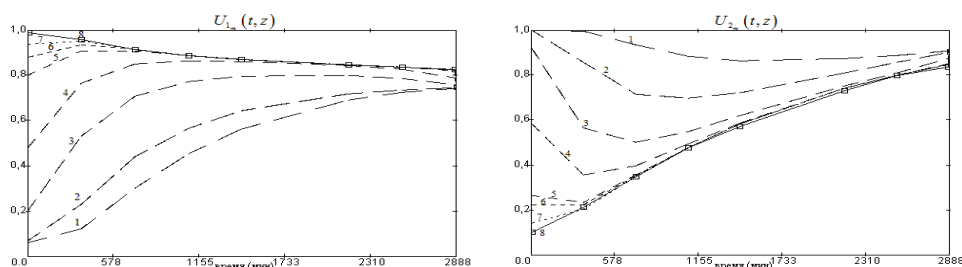


РИС. 4. Итерационное приближение концентрационных профилей  $U_{1_m}$  и  $U_{1_m}$  к экспериментальным следам решений ( $z = 7 \text{ nm}$ )

На рис. 5 показано эволюцию уменьшения значения функционала-невязки между значениями решений  $U_{1_{k_1}}^n(t, \gamma_{k_1})$  и следов на каждой группе итераций. Диаграммы справа (рис. 3, 4) демонстрируют аналогичные результаты идентификации, полученные для второй диффундированной компоненты для этой же поверхности наблюдения ( $z = 7 \text{ nm}$ ). В отличие от  $U_{2_{k_1}}$ ,  $U_{1_{k_1}}$  показывает приближение модельных концентраций сверху к экспериментальному следу. Аналогичные результаты получены для других поверхностей.

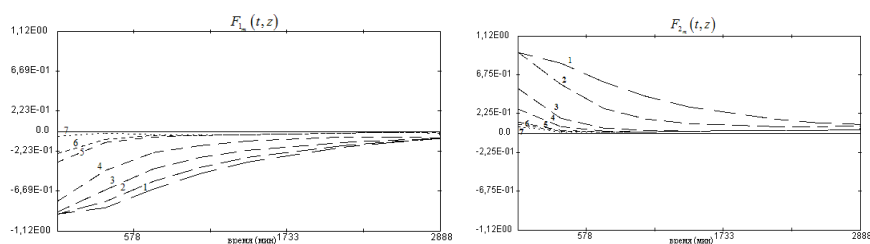


РИС. 5. Эволюция уменьшения невязок на каждой итерации

На рис. 6 показано сравнительный анализ построенных концентрационных профилей ( $Fe$ ) вдоль координаты толщины для фрагмента мультикомпозита в диапазоне  $0 < z < 4,3 \text{ nm}$ , с учетом восстановленных коэффициентов диффузии  $D_{1_m}$  и  $D_{2_m}$  (1 – сплошная кривая) и профиля, построенного по константным начальным значениям соответствующих коэффициентов диффузии (2 – пунктирная кривая), что используются в традиционных приближенных расчетах. Как видно из рис. 6, кривая 1 существенно отличается (больше 20 %) от кривой 2 (усредненные значения  $D_{1_m}$  и  $D_{2_m}$ ). Идентифицированные функциональные зависимости коэффициентов диффузии  $D_{1_m}$  и  $D_{2_m}$  отображают их значение для конкретных моментов времени диффузии, поэтому кривая 1 качественнее кривой 2 описывает кинетику.

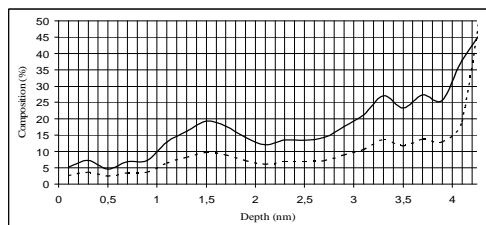


РИС. 6. Концентрационные  $Fe$  профили вдоль координаты толщины: сплошная кривая (1) – восстановленные коэффициенты диффузии  $D_{11_m}(t)$ ,  $D_{22_m}(t)$ , пунктирная (2) – константные значения коэффициентов

**Выводы.** Обоснованы постановки прямых и обратных задач функциональной идентификации массопереноса в неоднородных мультимногослойных средах. Реализованная с использованием методологии оптимального управления сложными многокомпонентными системами и интегральных преобразований методика функциональной идентификации коэффициентов диффузии и выполнено их восстановление как зависимостей от времени для  $Fe/Dy$ -наномультимногослойного композита.

*V.S. Deineka, M.R. Petryk*

#### ИДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ НЕОДНОРІДНИХ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ В НАНОМУЛЬТИКОМПОЗИТАХ З ВИКОРИСТАННЯМ ГРАДІЄНТНИХ МЕТОДІВ

Запропонована методика ідентифікації параметрів дифузії в неоднорідних наномультимногослойних композитах з використанням методології оптимального керування багатоконпонентними системами та інтегральних перетворень. Виконано відновлення функціональних залежностей від часу коефіцієнтів дифузії для  $Fe/Dy$ -наноструктур.

*V.S. Deineka, M.R. Petryk*

#### IDENTIFICATION OF KINETIC PARAMETERS OF HETEROGENOUS DIFFUSION PROBLEMS IN NANO-MULTILAYER COMPOSITES USING GRADIENT METHODS

The method of functional identification of parameters of diffusion in heterogeneous nano-multilayer composites using the methodology of distributed system optimal control and of integral transformations is proposed. Time dependencies for diffusion coefficients of  $Fe/Dy$ -nano-multilayers are restored.

1. Tamion A., Ott F., Berche P.-E., Talbot E., Bordel C., Blavette D. Magnetization depth profile of ( $Fe/Dy$ ) multilayers // J. of Magnetism and Magnetic Materials. – 2008. – Vol. 320, Issue 21. – P. 2650–2659.
2. Mehrer H. Diffusion in Solids. – Springer, 2007. – 650 p.
3. Kärger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals. – Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. – 615 p.

4. *Дейнека В.С., Петрик М.Р.* Параметрична ідентифікація кінетичних параметрів дифузії в багатопшарових неоднорідних *Fe/Dy*-наномультиматеріалах // Математичне та комп'ютерне моделювання. – 2011. – Вип. 5. – С. 85–111.
5. *Ленюк М.П., Петрик М.Р.* Інтегральні перетворення Фурє, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах. – К.: Наук. думка, 2000. – 372 с.
6. *Deineka V.S., Petryk M.R., Fraissard J.* Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system // Cybernetics and System Analysis. – Springer New York, 2011. – Vol. 47, N 5. – P. 705–723.
7. *Sergienko I.V., Deineka V.S.* Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions. – New York: Kluwer Academic Publishers, 2005. – 400 p.
8. *Сергиенко И.В., Дейнека В.С.* Системный анализ многокомпонентных распределенных систем – Киев: Наук. думка, 2009. – 640 с.

Получено 01.02.2012

**Об авторах:**

*Дейнека Василий Степанович,*

доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН Украины,  
заведующий отделом Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,  
e-mail: [Vdeineka@ukr.net](mailto:Vdeineka@ukr.net)

*Петрик Михаил Романович,*

кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедры программной инженерии  
Тернопольского национального технического университета им. Ивана Пулюя.  
e-mail: [Mykhaylo.Petryk@tu.edu.te.ua](mailto:Mykhaylo.Petryk@tu.edu.te.ua)