

УДК 519.6

М. Петрик, Д. Михалик

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДЛЯ БАГАТОШАРОВИХ МУЛЬТИКОМПОЗИТІВ

Для багатошарового середовища, що складається з n подвійних шарів двох середовищ з різними властивостями Fe/Dy, в якому процес дифузії атомів компоненти 1 (Fe) і компоненти 2 (Dy) між суміжними шарами, спричинений наявністю градієнтів концентрацій, змінних в часі на інтерфейсних межах приводять до хімічного змішування границь розділу, виконано ідентифікацію кінетичних коефіцієнтів для речовин Fe і Dy.

Вважаючи, що коефіцієнти дифузії D_{sp} є невідомими, але відомі значення концентрацій речовин в середовища (отримані експериментально):

$$U_{s_k} \left. t, z \right|_{\gamma_k} = f_{s_k} \left. t, z \right|_{\gamma_k}, \quad (1)$$

з використанням методу мінімальних похибок, для визначення функціональної залежності ідентифікації компоненти коефіцієнта дифузії від часу для кожного m -го шару отримуємо регуляризаційний вираз для наступного $n+1$ -го кроку ідентифікації:

$$D_{sp_m}^{n+1} \left. t \right| = D_{sp_m}^n \left. t \right| - \frac{\nabla J_{D_{sp_m}^n} \left. t \right| \left| U_{s_m} \left. t, l_m, D_{sp_m} - f_{s_m} \right|^2 \right|}{\left\| \nabla J_{D_{sp_m}^n} \left. t \right| \right\|_{z=l_m}^2}, \quad t \in [0, T], s, p = \overline{1, 2}. \quad (2)$$

де $U_{s_k} \left. t, z \right|$ - концентрація компоненти в середовища ($s=1, 2$), $\nabla J_{D_{sp_m}^n}$ - градієнт функціоналу нев'язки.

Проведено ідентифікацію розподілів коефіцієнтів дифузії для двох компонент (Fe і Dy) для різних часових дифузійних зрізів тривалістю 48, 36, 24, 16 і 12 год. Загальна товщина досліджуваного мультикомполітиту складала 20 нм. Розглядалось чотири шари по 5 нм кожен. В якості експериментальних значень використовувались результати, отримані в Лабораторії Фізики матеріалів Руанського університету (Франція).

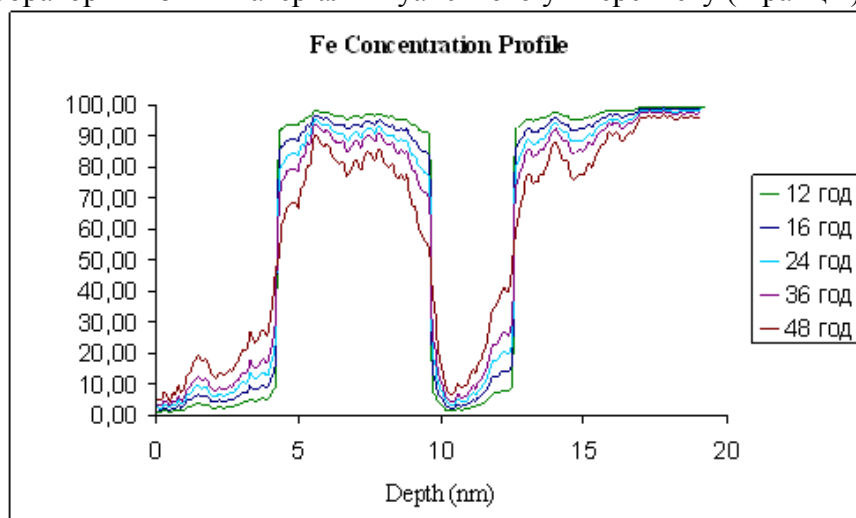


Рис. 1. Еволюція концентраційного профілю для Fe