

СЕКЦІЯ 4. ПРОГРАМНА ІНЖЕНЕРІЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ РОЗПОДІЛЕНИХ СИСТЕМ

УДК 519.6

Д. Михалик, М. Петрик

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

ІДЕНТИФІКАЦІЯ КОЕФІЦІЄНТІВ ДИФУЗІЇ В БАГАТОШАРОВИХ ПЛІВКАХ

У роботі представлено результати числового аналізу та ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії для двох компонентних (Fe і Dy) плівок для різних дифузійних зрізів, що представляють поверхні із загальною тривалістю спостереження 48 год. Досліджувана товщина мультикомпозиту складала до 20 нм. Розглядалось чотири шари по 5 нм кожен. В якості даних експериментальних спостережень використовувались результати, отримані методами атомної спектроскопії для багатокомпонентних (Fe/Dy) наноплівки в лабораторії фізики матеріалів університету м. Руан (Франція).

На рис.1 для поверхні спостереження, що відповідає просторовому зрізу по товщині мультикомпозиту для координаті товщини $z=7$ нм, показаний процес еволюції функціональної залежності в часі коефіцієнтів дифузії, відновлені згідно регуляризаційних процедур ідентифікації. Наведені групи ітерацій, що найбільш суттєвим чином впливають на процес збіжності модельних розв'язку U_{1k_1} та U_{2k_1} до їх експериментальних слідів $f_{1k_1}(t, \gamma_{k_1})$ та $f_{2k_1}(t, \gamma_{k_1})$, візуалізація чого показана на рис. 2.

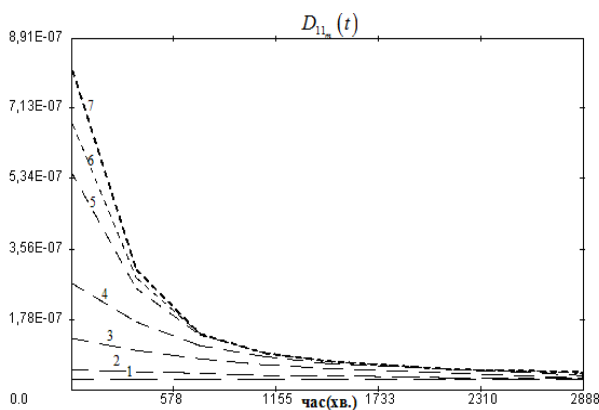


Рисунок 1 – Відновлення функціональної залежності компоненти коефіцієнтів дифузії

$$D_{11_m} \text{ та } D_{22_m}$$

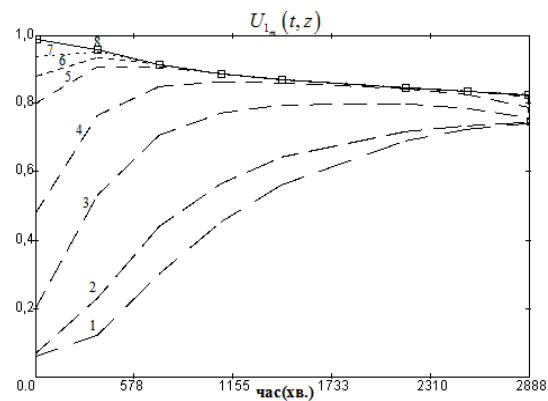


Рисунок 2 – Ітеративне наближення модельних концентраційних профілів U_{1_m} та U_{2_m} до експериментальних

В якості початкового наближення для ідентифікації функціональної залежності компоненти коефіцієнту дифузії взято 1.48×10^{-7} м/с². Далі, по мірі проходження ітерацій функціональна залежність коефіцієнтів дифузії змінюється по всьому часовому діапазону. Для повноти картини тестування алгоритму виконано понад 2500 ітерацій, умовно розбитих на групи. Для останньої групи ітерацій, як видно з поданих діаграм, уже досягається достатньо стійка картина профілів залежності коефіцієнтів, що забезпечує максимальне наближення модельного профілю концентрацій до його експериментального сліду.