

6. Fleming W. H. Deterministic and Stochastic Optimal Control / W. H. Fleming, R. W. Rishel. — New York : Springer Verlag, 1975.
7. Betts J. T. Practical Methods for Optimal Control Using Nonlinear Programming / J. T. Betts // SIAM Society for Applied and Industrial Mathematics. — Philadelphia, 2001.

The purpose of this paper is to construct and justify the method of control bifurcation in electrophysiological models of Hodgkin- Huxley based on the maximum principle. Stabilization control bifurcation in the Hodgkin-Huxley model may have important clinical applications for patients suffering from Alzheimer's disease, epilepsy, or arrhythmia.

Key words: *Hodgkin-Huxley model, optimal control, maximum principle.*

Отримано: 16.10.2013

УДК 519.6

М. Р. Петрик, канд. техн. наук,
П. М. Василюк, канд. техн. наук,
Н. В. Бабій, здобувач,
О. Ю. Петрик, здобувач

Тернопільський національний технічний університет
імені Івана Пулюя, м. Тернопіль

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ В БАГАТОШАРОВИХ ОКСИДНИХ НАНОПОКРИТТЯХ

Побудована математична моделі дифузійного масопереносу в неоднорідних мультикомпонентних середовищах, що описує процес формування мультишарів тонких оксидних наноплівки, що використовуються як теромо- і агресивно захисні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працюють у високо агресивних середовищах. Отримані просторово-розподілені концентраційні розподіли розподіли структурних складових компонентів наноплівки для різних технологічних зрізів оксидної наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки.

Ключові слова: *масоперенос, математична модель, нанопокриття, мультишари, інтегральні перетворення.*

Вступ. Розвиток сучасних ресурсозберігаючих технологій спричинив велику кількість досліджень кінетики процесів дифузії в багатошарових нанопокриттях і плівках, що вимагає розробки нових методів моделювання і математичних моделей для опису явищ з урахуванням наявності переходів між суміжними шарами [1–6]. Ця робота стосується дослідження процесу формування мультишарів тонких

оксидних нанопокриттів, які використовуються як теромо- і антикорозійні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працюють у високоагресивних середовищах.

Фізична задача і математична модель процесу дифузії в багат шарових плівках. Розглядається багат шарове — складається з n шарів середовище. Схематизація такого середовища представлена на рис. 1. Припустивши, що процес дифузії атомів складових компонентів оксидних плівок (алюміній, молібден, кремній) головна причина змішування системи, то концентраційні профілі для такої багат шарової системи можна одержати з рівнянь Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх шарів і умовами контакту між послідовними шарами.

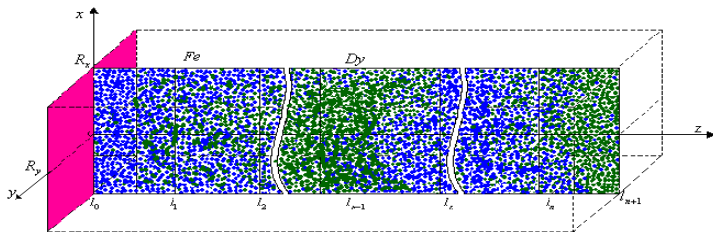


Рис. 1. Схематичний вигляд плоского багат шарового середовища

Запропонована математична модель процесу масопереносу шляхом дифузії в плоскому багат шаровому середовищі (рис. 1). Значення місцевої миттєвої концентрації $C_k(t, x, z)$ визначається як розв'язок системи диференціальних рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial t} C_k(t, x, z) = D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \quad (1)$$

в області

$$I_n = \left\{ t > 0, x \in (0, R), z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 \geq 0; l_{n+1} = l < \infty \right\}.$$

Відповідні початкові умови мають вигляд:

$$C_k(t, x, z)|_{z=0} = C_0(x, z) \equiv C_0(z), \quad k = \overline{1, n}. \quad (2)$$

Крайові умови та інтерфейсні умови між суміжними шарами вздовж осі z :

$$C_1(t, x, z)|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z}|_{z=l} = 0, \\ [C_k - C_{k+1}]_{z=l_k} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} \left[C_k - \frac{D_{k+1}}{D_k} C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n}. \quad (3)$$

Крайові умови по змінній x :

$$\frac{\partial C_k}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad C_k \Big|_{x=R} = C_{R_k}(t, z). \quad (4)$$

Тут використані позначення: $C_k, k = \overline{1, n+1}$ — концентрації в k^{my} шарі багат шарового середовища вздовж осі z ; $D_k, k = \overline{1, n+1}$ — коефіцієнт дифузії в напрямку осі z ; D_0 — коефіцієнт дифузії в напрямку осі x ; $\Delta l_k = l_k - l_{k-1}; k = \overline{1, n+1}$ — товщина k -го шару; $l = l_{n+1} - l_0$ — товщина середовища; R — півширина середовища.

Точний аналітичний розв'язок задачі, описаної рівняннями (1)–(4), безпосередньо виписується шляхом застосування інтегральних перетворень Фур'є [5; 7]:

$$\begin{aligned} C_k(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R \mathcal{W}_{0,k}(t-\tau; x, \zeta; z) C_{l_0}(\tau, \zeta) d\zeta d\tau + \\ & + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^R \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t; x, \zeta; z, \xi) C_{0_k}(\zeta, \xi) \sigma_{k_1} d\zeta d\xi + \\ & + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \mathcal{W}_{R,k_1}(t-\tau; x, R; z, \xi) \cdot C_{R_{k_1}}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau. \end{aligned} \quad (5)$$

Тут:

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні $z = l_0$):

$$\mathcal{W}_{0,k}(t, x, z, l_0) = -\frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-D_0 \eta_m^2 t} \frac{V_k(z, \beta_j) V_1(l_0, \beta_j) \cos \eta_m x \cdot \cos \eta_m \xi}{\|V(z, \beta_j)\|^2 \eta_m},$$

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні $x = R$):

$$\mathcal{W}_{R,k_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-D_0 \eta_m^2 t} D_0 \eta_m^2 (-1)^{m+1} \frac{V_k(z, \beta_j) V_{k_1}(\xi, \beta_j) \cos \eta_m x}{\|V(z, \beta_j)\|^2 \eta_m},$$

- функція впливу Коші неоднорідностей системи:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{k,k_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = & \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-D_0 \eta_m^2 (t-\tau)} \frac{V_k(z, \beta_j) V_{k_1}(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|^2} \cos \eta_m \xi \cdot \cos \eta_m x, \\ & \eta_i = \frac{(2i+1)\pi}{R}. \end{aligned}$$

Результати числового моделювання: аналіз модельних і експериментальних концентраційних профілів. Результати числового моделювання та аналізу подані на рис. 2–7, що включають використані

сліди експериментальних спостережень (томографічного аналізу) зрізів по товщині (глибині) оксидної наноплівки по вмісту основних складових алюмінію, молібдену, кремнію (рис. 2, 4, 6 (а)), що визначають технологічні плівки як ефективного термо- та корозійнозахисного покриття робочих органів технологічного устаткування для виготовлення скловолокон [3; 4]. З метою одержання повноти картини аналізу вибору позицій (точок), у яких здійснювались експериментальні зрізи (заміри) щодо кількісного складу означених вище компонентів. Точки для зрізів вибирались з урахуванням ступеню контакту з агресивним робочим середовищем (розплав скла) робочої поверхні, покритою наноплівкою даної оксидної структури. Точки Т.1-Т.3 є точками безпосереднього контакту з агресивним середовищем, ранжовані в порядку зменшення ступеню контакту з агресивним середовищем. Точки Т.4-Т.6 не мають безпосереднього контакту з агресивним середовищем, однак розміщені в безпосередній близькості до нього і внаслідок цього піддаються значним термічним навантаженням. Аналогічно, точки Т.4-Т.6 також ранжовані в порядку зменшення ступеню термічного навантаження.

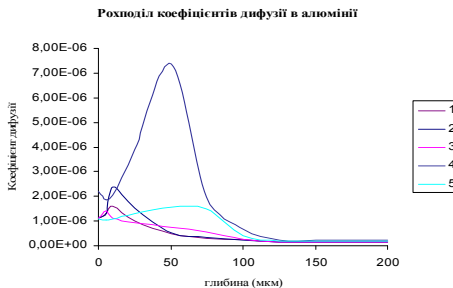
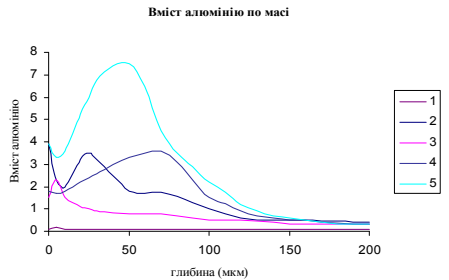


Рис. 2. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини (а) та відновлені за їх значеннями розподіли коефіцієнтів дифузії (б) для алюмінію [6; 8; 9] для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

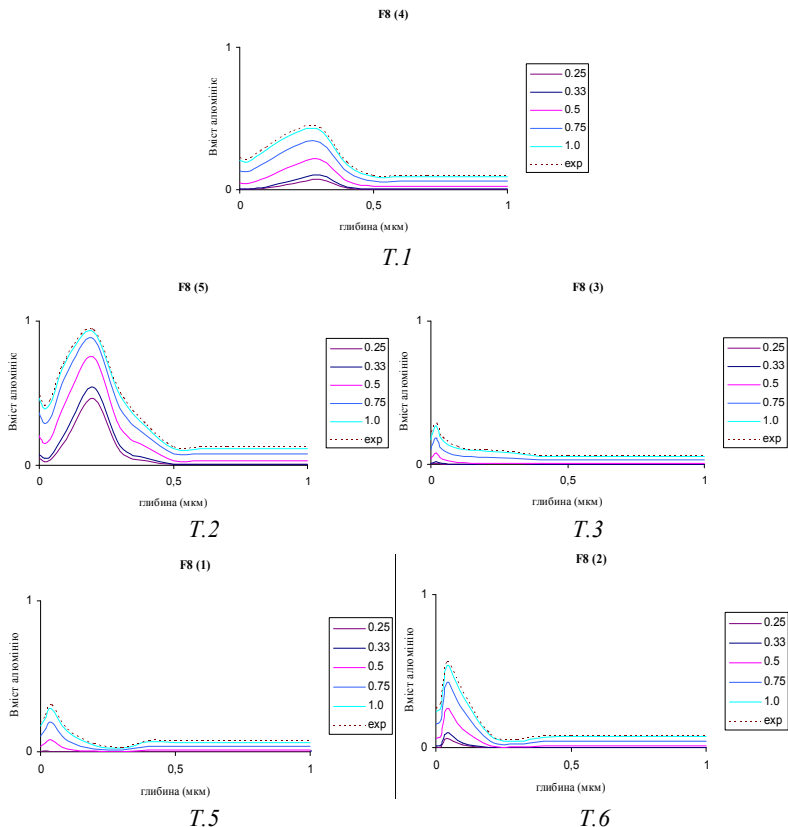


Рис. 3. Модельні концентраційні розподіли, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для алюмінію для 5-ти зрізів оксидної наноплівки (точки T.1-T.3, T.5, T.6)

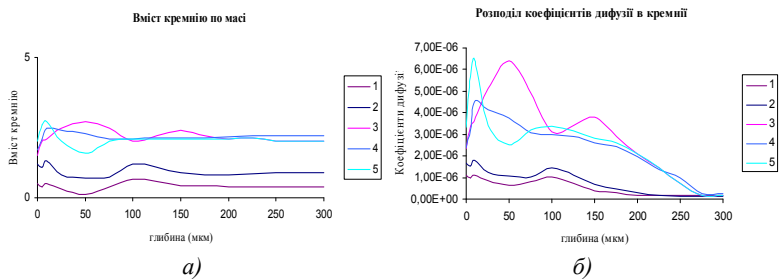


Рис. 4. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини (а) та відновлені за їх значеннями розподіли коефіцієнтів дифузії (б) для молібдену [6; 8; 9] для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

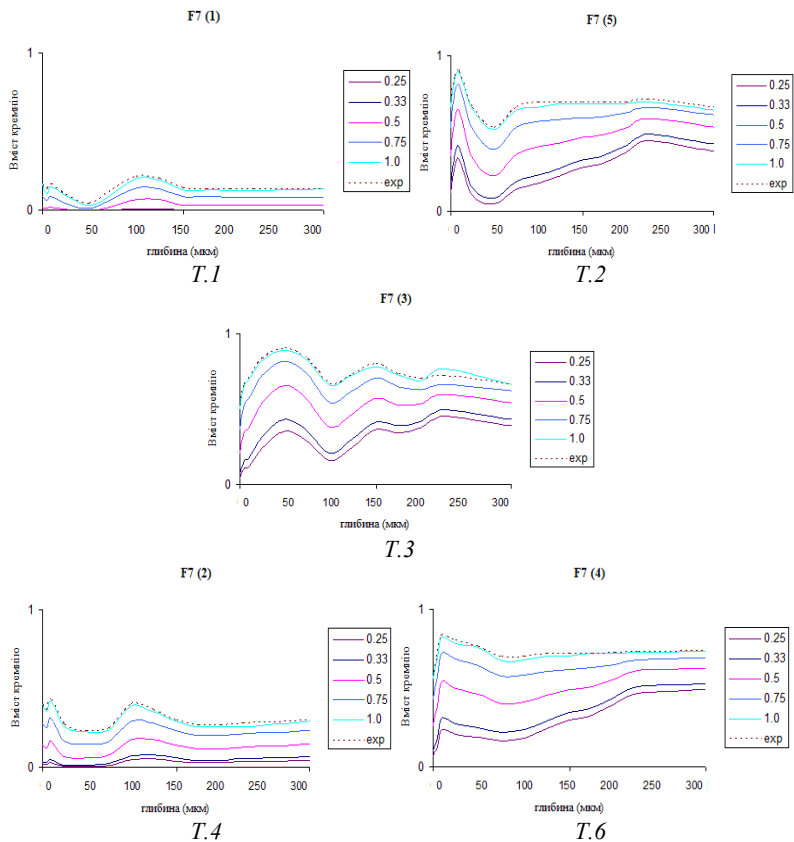


Рис. 5. Модельні концентраційні розподіли, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для молібдену для 5-ти зрізів оксидної наноплівки (точки T.1-T.3, T.4, T.6)

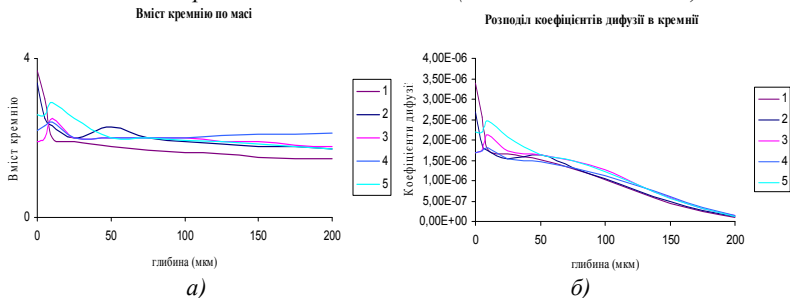


Рис. 6. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини (а) та відновлені за їх значеннями розподіли коефіцієнтів дифузії (б) для кремнію [6; 8; 9] для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

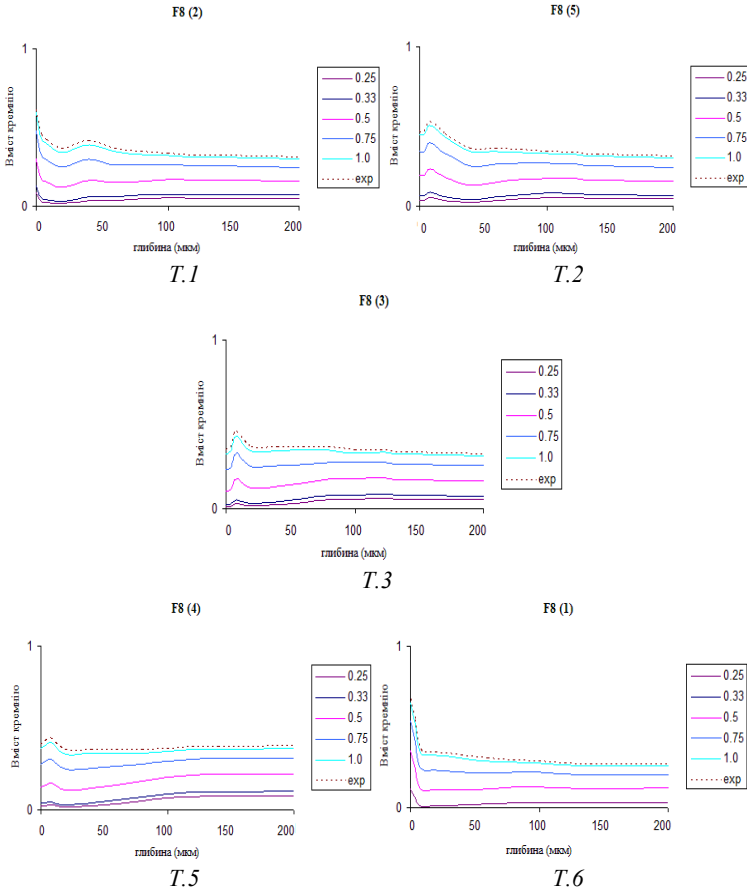


Рис. 7. Модельні концентраційні розподіли, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для кремнію для 5-ти зрізів оксидної наноплівки (точки T.1-T.3, T.5, T.6)

На рис. 2, 4, 6 (б) подані відтворені з використання методології оптимального керування станом багатокомпонентними системами переносу, аналітичного розв'язку моделі та даних експериментальних спостережень (рис. 2, 4, 6 (а)) відновлені розподіли коефіцієнтів дифузії для розглядуваних складових компонентів наноплівок (алюмінію, молібдену, кремнію). Ідентифіковані у такий спосіб розподіли коефіцієнтів дифузії, що відповідають реальним даним експериментів, використані нами як вхідні параметри отриманого математичного розв'язку моделі (5) для моделювання та аналізу концентраційних розподілів основних складових компонентів наноплівок (алюмінію,

молібдену, кремнію), що визначають задані технологічні характеристики використовуваних типів оксидних наноплівки як термо- і антикорозійного покриття робочих органів обладнання, що працює в дуже агресивних середовищах.

На рис. 3, 5, 7 подані часово-просторово розподілені модельні концентраційні розподіли структурних складових компонентів наноплівки (алюмінію, молібдену, кремнію), побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для 5-ти зрізів оксидної наноплівки та 5-ти часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки з урахуванням специфіки технологічних умов експлуатації нанопокриття (характерні точки Т.1-Т.6, що належним чином враховують різні ступені агресивно-корозійних (деструктивних) та термовпливів середовища).

Тривалості формування технологічного мультишару наноплівки за рахунок молекулярної дифузії вказаних компонентів розбиті на 5 періодів, що включають початковий період формування захисного мультишару ($0.25T$) до кінцевого завершення формування захисного мультишару ($1T$) і відповідно заданої компонентної структури наноплівки, попередньо апробованої експериментами.

Як видно з рис. 3, 5, 7, профілі одержані шляхом моделювання є добре узгоджені з відповідним експериментальним профілем при наближенні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного мультишару наноплівки. Максимальне відхилення не перевищує 2-3%, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі та можливості практичного використання отриманих результатів.

Висновки. Побудована математична моделі дифузійного масопереносу в неоднорідних мультикомпонентних середовищах, що описує процес формування мультишарів тонких оксидних наноплівки, які використовуються як термо- і агресивнозахисні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працюють у високо агресивних середовищах. Отримані просторово-розподілені концентраційні розподіли структурних складових компонентів наноплівки (алюмінію, молібдену, кремнію), для різних технологічних зрізів оксидної наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки. Результати можуть бути використані для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних мультикомпонентах та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

Список використаних джерел:

1. Mehrer H. Diffusion in Solids / H. Mehrer. — Springer, 2007. — 650 p.
2. Kärger J. Diffusion fundamentals / J. Kärger, F. Grinberg, P. Heitjans. — Leipzig : Leipziger Unviersite, 2005. — 615 p.

3. Mathematical modeling and research for diffusion processes in multilayer and nanoporous media, Fluid Transport in Nanoporous Materials / M. Petryk, O. Shabliy, M. Leniuk, P. Vasyluk // NATO Science Series, Series II: Mathematics, Physics and Chemistry. — Springer Publishers, 2006. — Vol. 219. — P. 639-655.
4. Василюк П. Високотемпературне руйнування залізохромових сплавів / П. Василюк // Вісник ТНТУ. Механіка та матеріалознавство — 2011. — Ч. 2. — С. 173–177.
5. Дифузійні процеси в оксидних шарах залізохромових сплавів / О. Шаблій, М. Петрик, П. Василюк, І. Катеринюк // Вісник Тернопільського державного технічного університету. — 2000. — Т. 5, № 3. — С. 5–11.
6. Дейнека В. С. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультikomпозитах с использованием градиентных методов / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик // Компьютерная математика. — 2012. — № 1. — С. 41–51.
7. 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. : Наук. думка, 2000. — 372 с.
8. 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.
9. Сергиенко И. В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека. — К. : Наук. думка, 2009. — 638 с.

The mathematical models of diffusion mass transfer in heterogeneous environments that describes the process of multi layers of thin oxide nano films used as terrorist and aggressively protective coatings business of processing equipment operating in highly corrosive environments. These spatially distributed concentration distributions distributions of structural components nano films for various technological sections oxide nano films and time durations formation process multysharu nano film.

Key words: *mass transfer, mathematical model, multyshary, integral transformation.*

Отримано: 28.10.2013