

2. Lozynskyy O. Multicriterion Intelligent Control System and Optimal Stabilization of Arc Steel-Melting Furnace Electrical Regimes Coordinates / O. Lozynskyy, Y. Paranchuk, R. Paranchuk // Computational Problems of Electrical Engineering. — 2011. — Vol. 1, № 1. — P. 35–44.

The structure of arc furnace arcs power control system with fuzzy controllers, optimized by the criterion of minimum electric mode coordinates dispersion is proposed. Research results are presented.

Key words: *arc steelmaking furnace, fuzzy regulator, arcs power controller, optimization, dynamics, electrode movement law, dispersion, speed, time of control.*

Отримано: 21.03.2014

УДК 519.6

М. Р. Петрик*, д-р фіз.-мат. наук,
Д. М. Михалик*, канд. техн. наук,
М. І. Шинкарик**, канд. фіз.-мат. наук,
О. Ю. Петрик*, старший викладач,
Н. В. Бабій***, канд. техн. наук

*Тернопільський національний технічний університет
імені І. Пулюя, м. Тернопіль,

**Тернопільський національний
економічний університет, м. Тернопіль,

***Кременецький обласний гуманітарно-педагогічний
інститут імені Т. Шевченка, м. Кременець

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ ОКСИДНИХ НАНОПЛІВКАХ

Запропоновано модель дифузійного переносу для процесу формування тонких наноплівки в обмеженому n -компонентному неоднорідному середовищі з нестационарних режимів масопереносу на масообмінних поверхнях. Для запропонованої моделі побудовано розв'язок та обґрунтовано вибір функціоналу нев'язки для проведення процедури ідентифікації коефіцієнтів дифузії. Отримано просторово-розподілені концентраційні розподіли хрому для різних технологічних зрізів оксидної наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару та проведено аналіз кінетики формування мультишару.

Ключові слова: *математичне моделювання, дифузійні процеси, багатощарові оксидні середовища.*

Вступ. Вивчення дифузії в багатощарових плівках різної природи, зокрема в тонких наноплівках, отриманих шляхом композиції матеріалів з різними властивостями, є важливим напрямом сучасної промисловості.

Дослідження в цьому напрямку дозволяють створювати на базі вже відомих матеріалів та середовищ нові матеріали та середовища зі спеціальними характеристиками та властивостями. Це дає змогу досягти в результаті нових ефектів магнітної та електричної провідності, дифузійно-адсорбційні властивості тощо. Виникнення подібних ефектів та властивостей пов'язане зі структурними змінами, що виникають в середовищах при агрегуванні наношарів з різними властивостями та наявністю змінних градієнтів концентрацій, що мають місце на інтерфейсних поверхнях розділу цих середовищ [1–3].

Тому є актуальним розвинення методів моделювання і математичних моделей, що зорієнтовані на врахування специфіки переносу в багатошарових середовищах з наявністю великої кількості інтерфейсів між суміжними шарами [1; 3]. Зокрема, важливими є дослідження магнітних багатошарових плівок, що утворені композитним способом по черговою агрегацією шарів з високопровідними і низькопровідними матеріалами та багатошарових оксидів, до складу яких входять такі компоненти, як Cr, Al, Si та інші.

Задачі вивчення дифузії в багатошарових плівках вимагають розроблення нових методів моделювання і математичних моделей для опису явищ, що враховують наявність переходів (інтерфейсів) між суміжними шарами. Ефективними методами, які найповніше враховують згадані вище особливості, є методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Конторовича-Лебедева, з використанням яких отримані розв'язки різних типів крайових задач математичної фізики однорідних структур, у тому числі задачі дифузії для різних середовищ та можливість їх математичного моделювання [4–6].

Ця робота присвячена питання побудови математичної моделі процесів дифузійного масо перенесення в багатошарових наноплівках та задачі ідентифікації кінетичних параметрів таких середовищ на прикладі ідентифікації коефіцієнтів дифузії за результатами експериментальних досліджень систем залізо-хром, що використовують як конструкційний матеріал в атомній енергетиці, при виробництві супертонких волокон.

Постановка задачі. Для формулювання фізичної задачі і математичної моделі процесу дифузійного масопереносу в багатошарових плівках розглянемо багатошарове середовище, що складається з n подвійних шарів двох середовищ з різними властивостями. Схематичний вигляд багатошарового середовища наведено на рисунку 1.

Згідно такої схематизації, для кожного j -го інтерфейсу у сформованому мультикомполіті відбувається взаємодифузія компонент між двома сусідніми шарами середовища. Механізми такого взаємопереносу визначаються наявністю змінних градієнтів та швидкостей зміни концентрацій на інтерфейсних межах між шарами. Моделюва-

ти механізми такого додаткового взаємопереносу поряд із основними рівняннями переносу можна шляхом врахування в крайових та інтерфейсних умовах зміни в часі концентрацій та їх градієнтів.

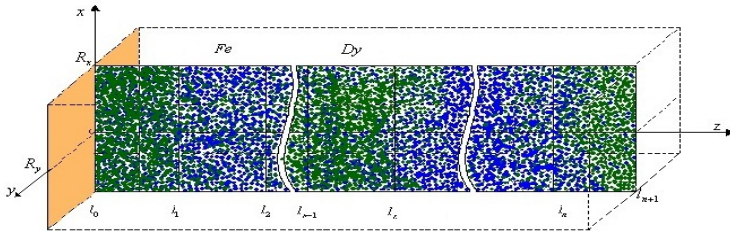


Рис. 1. Схематизація мультикомпонентного багатопшарового середовища

Таким чином нам необхідно побудувати обмежений розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний перенос (молекулярний транспорт) в обмеженому $(n + 1)$ -шаровому неоднорідному середовищі з нестационарними режимами масообміну на масообмінних поверхнях:

$$\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} + D_m \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial z^2} + f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (1)$$

за початкових умов

$$u_m(t, x, z)|_{t=0} = g_m(x, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1}, \quad (2)$$

крайових умов по змінній z

$$\left[\alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = g_{l_0}(t, x); \quad (3)$$

$$\left[\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} \right] u_{n+1}(t, x, z) \Big|_{z=l_n} = g_{l_n}(t, x),$$

інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) - \left[\alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = 0; \quad (4)$$

$$j = \overline{1, 2}; \quad m = \overline{1, n}$$

та крайових умов по змінній x

$$u_m(t, x, z) \Big|_{x=0} = u_{0m}(t, z), \quad u_m(t, x, z) \Big|_{x=R} = u_{Rm}(t, z), \quad (5)$$

$$x \in (0, R), m = \overline{1, n+1}.$$

Тут D_R — коефіцієнт дифузії по координаті x , D_m — коефіцієнти дифузії по координаті z для кожного з n шарів середовища. Умови (3)–(4) подані в загальному вигляді і через вибір необхідних коефіцієнтів α_{js}^m , β_{js}^m , $j, s = \overline{1, 2}$ уточнюються для кожної конкретної постановки моделі. Також є можливість враховувати і вплив просторово розподілених джерел маси $f_m(t, z)$.

Побудова розв'язку. Для побудови розв'язку запропонованої моделі, послідовно застосуємо до задачі (1)–(5) інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення \sin -Фур'є на сегменті $(0, R)$ по змінній x , визначене [4]:

- інтегральним оператором прямої дії

$$F_i [u_m(t, x, z)] = \int_0^h u_m(t, x, z) \sin\left(\frac{i\pi}{h}x\right) dx \equiv u_{mi}(t, z), \quad (6)$$

- інтегральним оператором зворотної дії

$$F_i^{-1} [u_{mi}(t, z)] = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} u_{mi}(t, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right) \equiv u_m(t, x, z); \quad (7)$$

- основною тотожністю інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_i \left[\frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} \right] = -\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 u_{mi}(t, z) + \frac{i\pi}{R} [u_{0m}(t, z) - (-1)^i u_{Rm}(t, z)]; \quad (8)$$

б) по змінній z скінченне інтегральне перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного $n + 1$ — складового середовища з урахуванням змінних градієнтів в крайових та інтерфейсних умовах має вигляд [7]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_n [[u_m(t, z)]] = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} u_m(z) V_m(z, \beta_k) \sigma_m dz \equiv u_k(t), \quad (9)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_n^{-1} [u_k(t)] = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) \frac{V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \equiv u_m(t, z), \quad (10)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення

$$\begin{aligned} & F_n [L_n [u_m(t, z)]] = \\ & = -\beta_k^2 u_k + D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot g_l - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) \cdot g_{l_0}, \end{aligned} \quad (11)$$

де компоненти V_j спектральної вектор-функції $V(z, \beta_k)$ визначені таким чином:

$$V_m(z, \beta_k) = \left(\prod_{i=m}^n c_{21, i} q_{i+1, k} \right) \left(\omega_{m-1, 2}(\beta_k) \cos q_{mk} z - \omega_{m-1, 1}(\beta_k) \sin q_{mk} z \right),$$

$$m = \overline{1, n};$$

$$V_{n+1}(z, \beta_k) = \omega_{n2}(\beta_k) \cos q_{n+1, k} z - \omega_{n1}(\beta_k) \sin q_{n+1, k} z;$$

$$c_{21, i} = \alpha_{22}^i \beta_{12}^i - \alpha_{12}^i \beta_{22}^i,$$

$$\omega_{01}(\beta_k) = v_{11}^{01}(b_1 l_0); \quad \omega_{02}(\beta_k) = v_{11}^{02}(b_1 l_0);$$

$$\omega_{mi}(\beta_k) = \omega_{m-1, 2}(\beta_k) \psi_{1i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) - \omega_{m-1, 1}(\beta_k) \psi_{2i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m);$$

$$\psi_{ji}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) = v_{11}^{mj}(q_m l_m) v_{22}^{mi}(q_{m+1} l_m) - v_{21}^{mj}(q_m l_m) v_{12}^{mi}(q_{m+1} l_m);$$

$$v_{ij}^{m1}(q_s l_m) \equiv \left(\alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_m} = -\alpha_{ij}^m q_s \sin q_s l_m + \beta_{ij}^m \cos q_s l_m,$$

$$v_{ij}^{m2}(q_s l_m) \equiv \left(\alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_m} =$$

$$= -\alpha_{ij}^m q_s \cos q_s l_m + \beta_{ij}^m \sin q_s l_m; i, j = \overline{1, 2}, \quad s \in \{m, m+1\},$$

$$q_{mk} = \frac{\beta_k}{\sqrt{D_m}}, \quad \gamma_m^2 \geq 0, \quad m = \overline{1, n+1},$$

тут $\beta_k, k = \overline{0, \infty}$ — власні числа, що є коренями трансцендентного рівняння:

$$\delta_n(\beta) \equiv \omega_{n2}(\beta) v_{22}^{n+1, 1}(q_{n+1} l) - \omega_{n1}(\beta) v_{22}^{n+1, 2}(q_{n+1} l) = 0,$$

$$\|V(z, \beta_k)\|^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} [V_m(z, \beta_k) \sigma_m]^2 dz \quad \text{— квадрат норми,}$$

$$\sigma_m = \frac{1}{D_m} \prod_{i=m}^n \frac{c_{11, i}}{c_{21, i}}, \quad m = \overline{1, n}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}} \quad \text{—}$$

компоненти спектральної густини.

У результаті застосування інтегральних операторів (6), (9) до задачі (1)–(5) одержимо задачу Коші,

$$\frac{d}{dt} u_{ki}(t) = - \left(D_R \left(\frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta_k^2 \right) u_{ki}(t) + \mathcal{F}_{ki}(\tau), \quad (12)$$

$$u_{ki}(t) \Big|_{t=0} = g_{ki} \quad (13)$$

розв'язком якої є функція [7]

$$u_{ki}(t) = e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} g_{ki} + \int_0^t e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)(t-\tau)} \mathcal{F}_{ki}(\tau) d\tau, \quad (14)$$

де

$$\mathcal{F}_{ki}(t) = g_{ki} + \Phi_{1_{ki}}(t) + \Phi_{2_{ki}}(t) + f_{ki}(t),$$

$$\Phi_{1_{ki}}(t) = \frac{\pi i}{R} \left[u_{0_k}(t) - (-1)u_{R_k}(t) \right],$$

$$\Phi_{2_{ki}}(t) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) g_{l_i}(t) - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) g_{l_{0i}}(t),$$

$$g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{m_{ki}}, \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{m_{ki}}(t), \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{m_{ki}}(t), \quad g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{m_{ki}}(z).$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (7), (10), отримаємо розв'язок задачі (1) [7]

$$\begin{aligned} u_m(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R \left[\mathcal{W}_{l_{0,m}}(t-\tau; x, \zeta; z, l_0) g_{l_0}(\tau, \zeta) + \right. \\ & \left. + \mathcal{W}_{l_m}(t-\tau; x, \zeta; z, l) g_l(\tau, \zeta) \right] d\zeta d\tau + \\ & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \left[\mathcal{W}_{m,m_1}(t-\tau; x, 0; z, \xi) u_{o_{m_1}}(\tau, \xi) + \right. \\ & \left. + \mathcal{W}_{R,m,m_1}(t-\tau; x, R, z, \xi) u_{R_{m_1}}(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau + \\ & \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \mathcal{H}_{m,m_1}(t; x, \zeta; z, \xi) g_{m_1}(\zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta + \\ & + \int_0^t \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \mathcal{H}_{m,m_1}(t-\tau; x, \zeta; z, \xi) f_{m_1}(\tau, \zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1}. \end{aligned} \quad (15)$$

У цій формулі визначені функції впливу, які описуються наступними виразами:

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній z :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{l_{0,m}}(t; x, \zeta; z, l_0) = & -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \times \\ & \times \frac{V_1(l_0, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mathcal{W}_m(t; x, \zeta; z, l) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_k \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \times \frac{V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right); \quad (17)$$

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній x :

$$\mathcal{W}_{0, m, m_1}(t; x, 0; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} e^{-\left(D_k \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_1(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (18)$$

$$\mathcal{W}_{R, m, m_1}(t; x, R; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_k \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \times \frac{V_{m_1}(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right); \quad (19)$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:

$$\mathcal{H}_{m, m_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{m_1=1}^{\infty} e^{-\left(D_k \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \times \frac{V_m(z, \beta_k) V_{m_1}(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|^2} \sin\left(\frac{\pi i}{R} \zeta\right) \sin\left(\frac{\pi i}{R} x\right), m, m_1 = \overline{1, n+1}. \quad (20)$$

Вибір функціоналу-нев'язки. Вважаємо, що коефіцієнти дифузії D_k , крайової задачі (1)–(5) є невідомими функціями від часу. При відомих концентраціях $U_{k_1}(t, z)$ як слідах розв'язків на поверхнях областей $\gamma_{k_1} \subset \Omega_k$, $k_1 = \overline{1, N+1}$, неоднорідного середовища

$$U_{s_{k_1}}(t, z) \Big|_{\gamma_{k_1}} = f_{s_{k_1}}(t, z) \Big|_{\gamma_{k_1}}, \quad (21)$$

початково-крайова задача (1)–(5) може бути розглянута для кожної точки z для кожного тонкого k_1 -го сегмента і полягатиме в знаходженні функцій $D_{sp_{k_1}} \in D$, де

$$D = \left\{ \nu(t, z): \nu \Big|_{\Omega_{k_1 T}} \in C(\Omega_{k_1 T}), \nu > 0, k_1 = \overline{1, N+1} \right\}.$$

Функціонал-нев'язка відхилення розв'язку від його слідів на $\gamma_{k_1} \in \Omega_{k_1}$, відповідно до [8] запишеться у вигляді

$$J_{k_1}(D_{k_1}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left\| U_{k_1}(t, z, D_{k_1}) - f_{1k_1} \right\|_{\gamma_{k_1}}^2 dt. \quad (22)$$

Регуляризаційний вираз для $n+1$ -го кроку визначення ідентифікуючої функціональної залежності. Слідуючи [8], з використанням методу мінімальних похибок для визначення залежності ідентифікаційної компоненти коефіцієнта дифузії $D_{k_1}^{n+1}$ від часу для кожного m -го шару $m = \overline{1, N+1}$, отримаємо

$$D_{k_1}^{n+1}(t) = D_{k_1}^n(t) - \frac{\nabla J_{D_{k_1}^n}^n(t) \left\| U_{k_1}(t, \gamma_{k_1}, D_{k_1}^n) - f_{1k_1} \right\|_{\gamma_{k_1}}^2}{\left\| \nabla J_{D_{k_1}^n}^n(t) \right\|_{\gamma_{k_1}}^2}, \quad t \in (0, T); k_1 = \overline{1, N_1}. \quad (23)$$

Таким чином, слідуючи [8] отримуємо для задачі функціональної ідентифікації аналітичні вирази для компонентів градієнтів функціонала-нев'язки

$$\nabla J_{D_{k_1}}(t) = \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \varphi_{k_1}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{k_1}(t, z) dz. \quad (24)$$

Моделювання та ідентифікація параметрів. Для чисельного моделювання кінетики процесів дифузійного перенесення в багатошарових плівках застосовано підходи, що викладені та апробовані в попередніх працях авторів [9, 10, 11], і які базуються на застосуванні теорії оптимального керування станом розподілених систем [8].

На рис.2 приведені результати експериментальних досліджень розподілів хрому (Cr) в живильнику при експлуатації протягом 20 діб при виробництві супертонкого волокна (СТВ) та базальтового супертонкого волокна (БСТВ) взяті для двох точок 1 та 2 дослідного зразка.

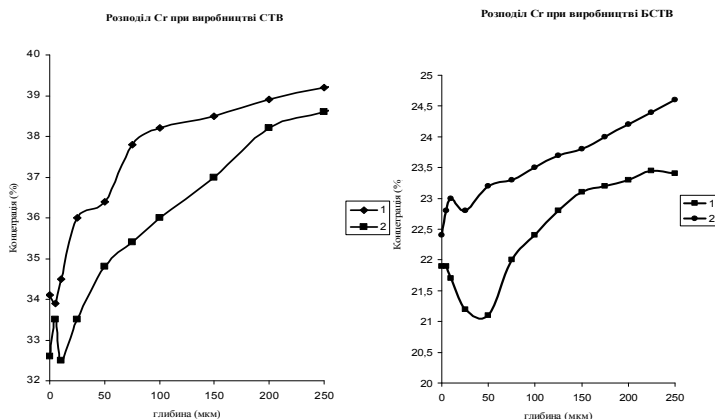


Рис. 2. Експериментальний розподіл хрому (Cr) в матеріалі

Результати ідентифікації кінетичних параметрів процесу дифузійного перенесення у вигляді розподілу коефіцієнтів дифузії хрому уздовж шару середовища отриманого за даними для виробництва СТВ приведено на рис. 3 та на за даними для виробництва БСТВ на рис. 4 відповідно.

Отримані розподіли характеризуються відносною рівномірністю значень уздовж досліджуваної глибини зразка і лежать в межах від $4 \cdot 10^{-6}$ до $8 \cdot 10^{-6}$ $\text{мкм}^2/\text{с}$ як для СТВ так і БСТВ зразка.

Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому (СТВ)

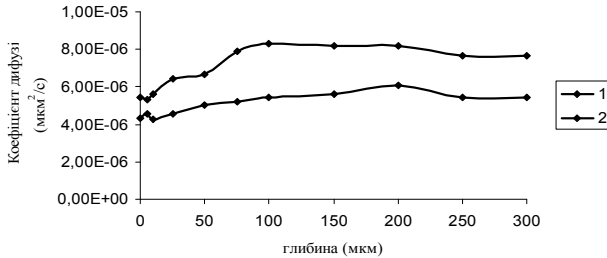


Рис. 3. Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому для СТВ

Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому (БСТВ)

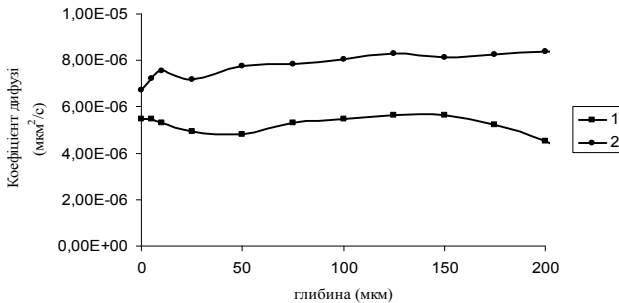


Рис. 4. Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому для БСТВ

На основі отриманих розподілів коефіцієнтів дифузії проведено числове комп'ютерне моделювання кінетики дифузійних процесів у вигляді просторових розподілів вмісту хрому уздовж матеріалу (рис. 5–6). На рисунках наведено результати числового моделювання розподілу хрому та використані сліди експериментальних спостережень (exp), що відображають вміст хрому. Ці концентраційні розподіли побудовані для різних часових моментів формування технологічного мультишару наноплівки: приведений час, що дорівнює (1Т), відповідає експериментальному часу в 20 діб. Для зручності аналізу кінетики процесу дифузійного переносу, розподіли приведено для п'яти моментів часу, що умовно відповідають етапам формування захисного шару від початкового (0.25Т) до кінцевого (1Т).

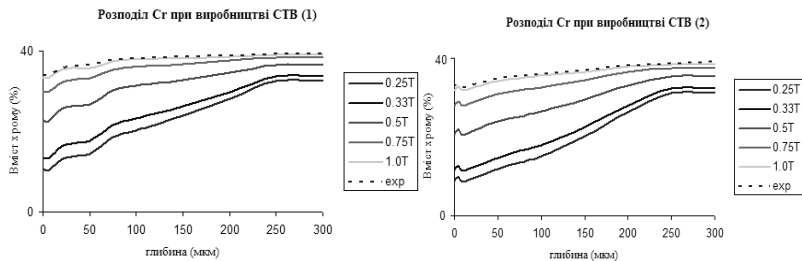


Рис. 5. Модельний розподіл хрому (Cr) для СТВ

На рис. 5 наведено результати числового моделювання розподілу хрому для СВВ. Як бачимо криві розподілу можна розділити на два характерні сегменти, перший від 0 до 220 мкм, характеризується лінійністю зростання вмісту хрому, а починаючи з глибини в 220 мкм спостерігається вже його рівномірність. Величина градієнту для першого і другого шарів складають майже 18%, для третього — 16%, для четвертого — 8% та для п'ятого — 6%. Найбільший приріст вмісту хрому спостерігається при приведеному часі від 0,33Т до 0,75Т. Максимальне відхилення концентрації хрому для періоду завершення формування мультишару наноплівки (1Т) від експериментального профілю (exp) не перевищує 3%.

Аналізуючи розподіл хрому в БСТВ, бачимо для першого часового відтинку (0.25Т), вміст хрому має практично рівномірний розподіл до глибини 100 мкм, після чого починає лінійно зростати і стабілізується в районі 220 мкм. Чітко видно, що з кожним наступним етапом формування захисного шару розподіл набуває все більш рівномірного характеру. Величина градієнту для першого шару складає більше 14%, для другого — 12,5%, для третього — 7,5%, для четвертого — 2,5% та для п'ятого — 1,5%. Найбільший приріст вмісту хрому спостерігається при приведеному часі від 0,33Т до 0,75Т. Максимальне відхилення концентрації хрому для періоду завершення формування мультишару наноплівки (1Т) від експериментального профілю (exp) не перевищує 2%.

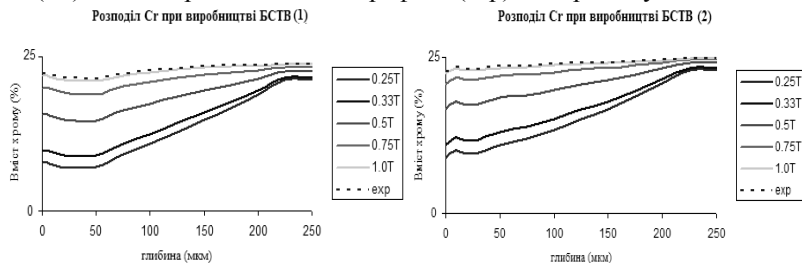


Рис. 6. Модельний розподіл хрому (Cr) для БСТВ

Порівнюючи отримані модельні розподіли вмісту хрому з результатами натурних експериментів неможна не зауважити хороше накладання

модельного розподілу (1.0T) з експериментальним (exp). Максимальні розбіжності між концентраціями для періоду завершення формування мультишару наноплівки від експериментального профілю не перевищує 3%, що вказує на достовірність запропонованої моделі.

Висновок. Для запропонованої математичної моделі дифузійного переносу, що описує процес формування мультишарів тонких оксидних наноплівок в обмеженому $(n + 1)$ -складовому неоднорідному середовищі з нестационарними режимами масообміну на масообмінних поверхнях, побудовано її розв'язок та здійснено вибір функціоналу нев'язки для проведення процедури ідентифікації коефіцієнтів дифузії на основі теорії оптимального керування станом розподіленої системи. За результатами експериментальних досліджень розподілів хрому при виробництві CPB та БСТВ проведено математичне моделювання кінетики процесу дифузії при формуванні наноплівок. Отримані просторово-розподілені концентраційні розподіли хрому для різних технологічних зрізів оксидної наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару, дозволяють провести аналіз кінетики формування мультишару, а запропонована методика бути застосованою до підвищення ефективності технологічних операцій та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

Список використаних джерел:

1. Kärger J. Diffusion in Nanoporous Materials / J. Kärger, D. Ruthven, D. Theodorou — Hoboken : John Wiley & Sons, 2012. — 660 p.
2. Mehrer H. Diffusion in Solids / H. Mehrer. — Springer, 2007. — 650 p.
3. 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. — Issue 21. — P. 2650–2659.
4. 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 // Springer Publishers. — 2006. — Vol. 219. — P. 639–655.
5. Петрик М. Р. Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. — 2009. — № 4. — С. 73–82.
6. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багат шарових наноплівках оксидної структури (дослідження зразка за технологією виробництва базальтового супертонкого волокна) / В. Дейнека, М. Петрик, П. Василюк, Н. Бабій // Вісник ТНТУ. — 2013. — Т. 70, № 2. — С. 219–231.
7. Ленюк М. П. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n -інтерфейсних неоднорідних і нанопористих напівобмежених середовищ / М. П. Ленюк, М. Р. Петрик // Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика. — 2003. — Вип. 1. — С. 69–95.
8. Дейнека В. С. Оптимальное управление неоднородными распределенными системами / В. С. Дейнека, И. В. Сергиенко. — К. : Наук. думка, 2003. — 506 с.

9. Дейнека В. С. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультиматериалах с использованием градиентных методов / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик // Компьютерная математика. — 2012. — № 1. — С. 41–51.
10. Дейнека В. С. Идентификация кинетических параметров массопереноса в многокомпонентных системах конкурентивной диффузии в неоднородных нанопористых средах / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Ж. Фрессард // Кибернетика и системный анализ. — 2011. — №5. — С. 46–64.
11. Дейнека В. С. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. — 2011. — №2. — С. 12–25.

A model of diffusion transfer for process of forming a thin nanofilms in a limited n-composite inhomogeneous medium with non-stationary modes of mass transfer on mass transfer surfaces has been proposed. Solution of one has been constructed and residual-functional for diffusion coefficient identification has been built. Spatially distributed chromium concentration for various technological sections of oxide nanofilms and time durations of multicomposite formation process has been obtained.

Key words: *mathematical modeling, diffusion process, identification, multicomposite oxide nanofilms.*

Отримано: 17.02.2014

УДК 004.942

С. А. Положаєнко*, д-р техн. наук, професор,
Ю. В. Григоренко**

*Одеський національний політехнічний університет, м. Одеса,

** ВАТ «Лукойл-Сервіз Україна», м. Одеса

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРВИННОЇ ПЕРЕРОБКИ СИРИХ ВУГЛЕВОДНІВ

Розроблено математичні моделі процесів і апаратів первинної переробки сирих вуглеводнів, а також виконано узагальнення цих моделей з метою типізації та уніфікації математичного опису. Такого роду типізація дозволяє здійснити формалізацію та уніфікацію методів та засобів математичного моделювання, а також здійснити машинну реалізацію вказаних методів на єдиній уніфікованій основі.

Ключові слова: *первинна переробка сирих вуглеводнів, математичні моделі, методи та засоби математичного моделювання.*

Вступ. Розв'язок задачі математичного моделювання, насамперед і в значній мірі, визначається обраною математичною моделлю (ММ) об'єкту (або процесу). *Адекватно* обрана ММ забезпечує *достовірність* результатів математичного моделювання. Крім того, на результати ма-