

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Амурский государственный университет»

*На правах рукописи*



**Мороз Любовь Игоревна**

**ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ ПОДХОД  
К ЧИСЛЕННОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ  
ДИНАМИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ  
КАК ФРАКТАЛЬНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

09.06.01 – Информатика и вычислительная техника  
Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Научный доклад об основных результатах подготовленной научно-  
квалификационной работы (диссертации)

Работа выполнена на кафедре «Информационные и управляющие системы» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Амурский государственный университет».

Научный руководитель: Масловская Анна Геннадьевна, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры «Математический анализ и моделирование», ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», г. Благовещенск

Рецензент: Бризицкий Роман Викторович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института прикладной математики ДВО РАН, г. Владивосток

Рецензент: Ковтанюк Андрей Егорович, доктор физико-математических наук, профессор департамента математического и компьютерного моделирования ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет», г. Владивосток

К защите допускаю:

Научный \_\_\_\_\_ Масловская А.Г.  
Руководитель

Заведующий выпускающей \_\_\_\_\_ Бушманов А.В.  
кафедрой

Заведующий отделом \_\_\_\_\_ Сизова Е.В.  
докторантуры и аспирантуры

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Актуальность и степень разработанности темы. В современных исследованиях для описания состояния сложных физических систем, обладающих свойствами самоподобия, сложным скейлингом и эрдитарностью, применяют концепции теории фракталов. Математический инструментарий представлен методами фрактального и мультифрактального анализа изображений и временных рядов, позволяющих проводить спецификацию нерегулярных объектов и динамических характеристик процессов. Одним из аналитических направлений фрактального формализма (и альтернативно – самостоятельной научной теорией) является дробно-дифференциальное исчисление, фундаментальные основы которого представлены в обзорах многих авторов (S.G. Samko, A.A. Kilbas, K.S. Miller, B. Ross, Y. Zhou, B.J. West, B.B. Учайкина, А.М. Нахушева и др.).

В современной практике аппарат дробно-дифференциальных уравнений используется для математического моделирования динамических откликов сложно-структурированных физических сред. Такие процессы также относят к неклассическим, или аномальным. При построении дробно-дифференциальных моделей для формализации эффектов памяти используют дробную производную по времени, а для описания течения процессов в объектах со сложной структурой и многофазным составом – производную дробного порядка по координате. Примерами таких систем являются твердотельные среды, проявляющие свойства самоподобия в геометрии строения и топографии поверхности, а также обнаруживающие фрактальные закономерности динамических характеристик. В частности, особый класс востребованных в практическом плане полярных диэлектриков – сегнетоэлектрики являются примером фрактальных физических систем.

Наиболее значимые приложения сегнетоэлектриков в науке и технике связаны с общими механизмами переключения поляризации и динамикой доменной структуры, индуцированными внешними воздействиями. Сегнетоэлектрики демонстрируют сложный скейлинг доменных конфигураций, самоподобие процессов зародышеобразования доменов и эффекты памяти в процессе переключения поляризации. Фрактальные свойства и закономерности формирования доменных структур, диэлектрических откликов и характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков диагностированы рядом независимых исследователей (Т. Ozaki, J.F. Scott, В.Я. Шыр, Y-R. Jeng, D.B. Li, К. Uchino, В. Tadic, М.К. Roy, Н.М. Галиярова, А.Г. Масловская и др.).

Несмотря на то, что в последние десятилетия свойства самоподобия геометрии доменных конфигураций и эффекты памяти сегнетоэлектриков интенсивно исследуются с применением методов фрактального анализа, приложения аппарата дробно-дифференциального исчисления, позволяющего прогнозировать динамические характеристики состояния системы, не является столь развитым. Отдельные подходы были предложены ранее на основе аналитического вычисления производной дробного порядка – в работах Р.П. Мейланова, С.А. Садыкова (модификация модели Колмогорова – Аврами для расчета поляризационного тока) и Н.М. Галияровой (фрактальные аналоги релаксационных уравнений, дробно-дифференциальная модификация уравнения колебаний); конечно-разностного представления производной дробного порядка – в исследованиях G.W. Bohannan (уравнение Коула – Коула для описания диэлектрической релаксации) и D. Guyomar, В. Ducharne, В. Zhang (квазистатическая модель диэлектрического гистерезиса); численного решения обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка – Т.К. Барабаш и А.Г. Масловской (модель тока переключения поляризации в режиме инъекции).

Классический дифференциальный аппарат, в том числе уравнения с частными производными, широко используется для математического моделирования нестационарных откликов сегнетоэлектриков на внешние воздействия. Поскольку сегнетоэлектрики – пример фрактальных физических систем с памятью, они представляют интересный объект для приложения теории дробно-дифференциальных уравнений.

Построение аналитических решений для дифференциальных уравнений, содержащих дробные производные, в условиях конкретных прикладных задач часто встречает серьезные затруднения. Поэтому во многих практических ситуациях оправданным является применение приближенных методов, основанных на аппроксимациях производных дробного порядка, в частности вычислительных схем на основе конечно-разностного подхода. Численные методы решения дифференциальных уравнений с нецелой производной активно развиваются и представлены в работах плеяды современных ученых (W. Chen, I. Podlubny, K. Diethelm, M.M. Meerschaert, C. Tadjeran, W. Deng, Д.Л. Ревизников, N.H. Sweilam, E. Sousa, J. Cao, B.R. Sontakke, U. Ali, R. Garappa, I. Petras и др.).

Развитие вычислительных методов и алгоритмов реализации математических моделей фрактальных физических систем с памятью на основе дробно-дифференциального подхода в приложении к задачам исследования и прогнозирования нестационарных откликов сегнетоэлектриков определяет проблематику диссертации и формирует круг вопросов, которые требуют отдельного рассмотрения. В связи с чем объектом исследования являются динамические отклики фрактальных физических систем, предметом исследования – численные методы и алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей динамических откликов сегнетоэлектриков.

**Цель** диссертационной работы – разработка математического, алгоритмического и программного обеспечения для численной реализации дробно-дифференциальных моделей формирования нестационарных откликов фрактальных физических систем с памятью в приложении к задачам прогнозирования характеристик переключения поляризации типичных сегнетоэлектриков.

Для достижения цели был сформулирован и решен ряд научных задач.

1. Математическая формализация нелинейных дробно-дифференциальных моделей, ассоциированных с процессами формирования поляризационных откликов сегнетоэлектриков: в режиме инжекции, в условиях интенсивного нагрева и при переключении поляризации во внешнем поле.

2. Разработка вычислительных схем, предназначенных для реализации дробно-дифференциальной модели динамики границы (в постановке начальной задачи для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения), моделей эрдитарного процесса теплопроводности и аномальной реакционно-диффузионной системы (в виде начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными).

3. Описание алгоритмов и разработка программных решений сформулированных дробно-дифференциальных задач. Проверка практической сходимости вычислительных схем и адекватности работы прикладных программ.

4. Синтез алгоритмов решения дробно-дифференциальных задач и алгоритмов моделирования откликов сегнетоэлектрических материалов, разработка интегрированного комплекса программ.

5. Проведение с помощью разработанной системы компьютерного моделирования вычислительных экспериментов по исследованию закономерностей, характеризующих динамические отклики типичных сегнетоэлектриков в условиях электронного облучения, нагрева и переключения поляризации.

**Новизна научного исследования** заключается в развитии новых, дробно-дифференциальных подходов к исследованию динамических откликов сегнетоэлектриков, включающих разработку математических моделей, вычислительных схем, алгоритмов и прикладных программ для проведения вычислительных экспериментов:

1. Гибридный дробно-дифференциально-стохастический подход к математическому моделированию электронно-индуцированного переключения поляризации сегнетоэлектриков на основе синтеза метода Монте-Карло и конечно-разностной схемы в концепции дробной производной Капуто.

2. Эредитарная модификация модели пироотклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева и вычислительная схема для ее программной реализации.

3. Дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающая динамику процесса перестройки доменов сегнетоэлектрика в процессе переключения и гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля.

4. Вычислительный алгоритм для численной реализации модели аномальной «реакции-диффузии» на основе комбинации итерационного подхода и неявной конечно-разностной схемы для решения полулинейного дробно-дифференциального уравнения с частными производными Капуто.

5. Прикладные программы в ППП Matlab, интегрированные в комплекс, ориентированный на расчет и визуализацию нестационарных характеристик поляризационных откликов сегнетоэлектриков.

6. Установленные с использованием вычислительного эксперимента закономерности изменений полярного состояния сегнетоэлектриков в неравновесных внешних условиях: инъекции электронного пучка, интенсивного нагрева и воздействия внешнего периодического поля.

**Теоретическая и практическая значимость.** Предлагаемый дробно-дифференциальный подход представляет собой генерализацию используемых классических дифференциальных моделей для описания динамики изменения полярного состояния сегнетоэлектрика, включая последние в качестве предельных частных случаев. Вариация порядков дробного дифференцирования предоставляет дополнительный гибкий и чувствительный инструмент математической «настройки» моделируемых характеристик. Разработанная неявная итерационная схема для решения полулинейного дробнодифференциального уравнения с частными производными типа «реакция-диффузия» может быть легко адаптирована для решения задач из других предметных областей, формализуемых с помощью аналогичного аппарата дробного дифференцирования. Математические модели и программные средства, разработанные в диссертации, используются в учебном процессе Амурского государственного университета, при выполнении научно-исследовательских работ, в курсовом проектировании, при написании выпускных квалификационных работ студентами, обучающимися по направлениям подготовки «Прикладная математика и информатика».

**Методы и средства решения научных задач.** Для решения поставленных задач использованы методы математического и средства компьютерного моделирования. Вычислительные схемы решения начальных задач для обыкновенных дробно-дифференциальных уравнений строились с применением конечно-разностных схем в концепции аппроксимации дробных производных Грюнвальда – Летникова и Капуто.

Численные методики для реализации дробно-дифференциальных моделей теплопроводности и аномальной диффузии базируются на схеме Кранка – Николсон, неявной ко-

нечно-разностной схеме и итерационном подходе. Алгоритм симуляции процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика построен с помощью метода Монте-Карло. Для создания комплекса программ на основе разработанных вычислительных алгоритмов применена среда программирования Matlab.

#### **Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Дробно-дифференциальные модели, представляющие обобщение детерминированных аналогов, значительно расширяют функционал аппарата математического и компьютерного моделирования нестационарных откликов сегнетоэлектриков, демонстрирующих самоподобный характер строения доменов и эффекты памяти.

2. Сконструированные вычислительные схемы и алгоритмы решения дробно-дифференциальных задач служат основой для программной реализации модифицированных математических моделей и разработки системы компьютерного моделирования формирования динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических сред с памятью.

3. Разработанный комплекс программ и технология вычислительного эксперимента позволяют проводить анализ динамической фрактальной размерности и предоставляют «чувствительный инструмент» для прогнозирования нестационарных характеристик изменения полярного состояния сегнетоэлектрика в неравновесных внешних условиях за счет варьирования порядков дробного дифференцирования.

**Достоверность и обоснованность результатов.** Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждаются использованием фундаментальных принципов при построении физико-математических моделей, корректными постановками задач, прозрачной аргументацией принятых ограничений, применением современных численных методов и средств компьютерного моделирования. Верификация работы вычислительных алгоритмов и прикладных программ проводилась на основе сравнения результатов с аналитическими решениями тестовых задач и целочисленными аналогами (в предельных случаях). Для проверки адекватности результатов моделирования осуществлялось также сравнение модельных расчетов с экспериментальными данными.

**Апробация работы.** Результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на следующих научных мероприятиях: VI, IX Международных научных конференциях «Математическое и компьютерное моделирование (Омск, 2018, 2020); Международной научной конференции «Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (Воронеж, 2019); XVII региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» (Благовещенск, 2019); V Международной научно-практической конференции «Информационные технологии и высокопроизводительные вычисления» (Хабаровск, 2019); XVIII Всероссийской научной школы-конференции «Лобачевские чтения» (Казань, 2019); Международной научной конференции «Современные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (Эльбрус, 2020); IX Международной конференции по математическому моделированию (Якутск, 2020); «The Workshop on mathematical modeling and scientific computing: focus on complex processes and systems» (Munich, 2020). Результаты работы неоднократно докладывались и обсуждались на научно-методических семинарах кафедры «Математический анализ и моделирование» Амурского государственного университета.

**Связь работы с научными темами и программами.** Основные результаты были получены автором при проведении исследований, выполнявшихся в 2018-2021 гг. в рамках научных тем: госбюджетная НИР ФГБОУ ВО «АмГУ» «Разработка систем компьютерного моделирования процессов неравновесного воздействия концентрированных по-

токов энергии на функциональные материалы» (№ гос. рег. НИР АААА-А16-116033010062-3) в 2018-2020 гг.; проект 20-31-90075 «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов фрактальных физических систем» (грант РФФИ на выполнение научного проекта молодым ученым, обучающимся в аспирантуре, в 2020-2022 гг.).

**Публикации и личный вклад автора.** По материалам диссертации опубликованы 20 работ, в том числе три статьи в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ (переводные версии двух статей – в изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus); 6 публикаций – в изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus (5 материалов конференций и одна статья в журнале, входящем в квартиль Q1); две статьи – региональных изданиях; 9 докладов в сборниках материалов докладов международных, всероссийских и региональных конференций.

Получены три свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Все результаты, изложенные в диссертации, получены автором лично или в соавторстве, при его непосредственном участии. Выбор направлений исследований, постановка задач математического моделирования, анализ результатов осуществлены совместно с научным руководителем. Разработка вычислительных схем и алгоритмов, программная реализация компьютерных моделей, вычислительные эксперименты проведены автором самостоятельно. В публикации [12] автору принадлежат алгоритм и прикладная программа решения дробно-дифференциальной задачи, адаптированные к реализации математической модели финансовой системы. В совместной работе [6] авторский вклад заключается в численной реализации термодинамической модели процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков. Все остальные работы опубликованы в авторстве или соавторстве с научным руководителем, при определяющем вкладе соискателя в представленные результаты [1-5, 7-11, 13-20].

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографического списка. Рукопись диссертации содержит 204 страницы основного текста, 33 рисунка, перечень литературных источников, включающий 297 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** приведены: обоснование актуальности темы диссертации и степень ее разработанности, цель и задачи, методы исследования, основные положения, выносимые на защиту, научная новизна и практическая значимость работы. Указано, что логика структуры работы и функциональных связей между главами соответствует этапам полного цикла вычислительного эксперимента.

**Первая глава** («Дробно-дифференциальные модели динамических систем: основные теоретические концепции, методы численной реализации и приложения к исследованию физических процессов и явлений») представляет аналитический обзор литературных данных по фундаментальным основам дробно-дифференциального исчисления и прикладным аспектам предметной области – использованию дробно-дифференциального подхода для математического моделирования характеристик фрактальных физических систем, в частности сегнетоэлектрических материалов.

В разделе 1.1 описаны базовые положения теории дробно-дифференциального исчисления, проведен обзор основных определений, способов аппроксимации производных нецелого порядка. В настоящем исследовании использованы определения производной дробного порядка Капуто и Грюнвальда – Летникова. Представлен анализ работ, посвященных численным методам решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка и начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными. Особое внимание уделено вопросам моделирования процессов аномальной диффузии.

В разделе 1.2 показаны концептуальное различие и идейная связь между фрактальным и дробно-дифференциальным подходами к исследованию физических систем со сложной структурой и динамикой. Приведены примеры приложений теории дробного дифференцирования для моделирования фрактальных физических систем. Рассмотрен фрактально-синергетический подход в задачах исследования структуры и свойств сегнетоэлектриков. Отмечено, что сегнетоэлектрические материалы по ряду характеристик ведут себя как эрдитарные среды с фрактальной структурой. Приведены модели, описывающие диэлектрические отклики и переключение поляризации на основе применения аппарата дробного дифференцирования.

Показано, что известные дробно-дифференциальные модели, описывающие отклики сегнетоэлектриков, базируются преимущественно на построении аппроксимирующих функций для управляющих параметров физической системы с использованием аналитического или численного вычисления производных дробного порядка. Вместе с тем многие теоретические концепции в математическом представлении включают аппарат дифференциальных уравнений и дают возможность прогнозировать характеристики состояния сегнетоэлектриков. Однако в современной литературе модели в постановке дробно-дифференциальных уравнений практически не представлены (применительно к описанию свойств сегнетоэлектриков).

В заключительном разделе первой главы на основе анализа информации перечисляются вопросы, подлежащие изучению; указываются объект и предмет исследования, общая концепция и основная гипотеза диссертационного исследования.

**Во второй главе** («Дробно-дифференциальные модели формирования нестационарных поляризационных откликов сегнетоэлектриков») приведен ряд концептуальных постановок задач моделирования динамических процессов, наблюдаемых в сегнетоэлектриках в условиях внешнего воздействия: инъекция электронов, нагрев, приложенное

поле.

В разделе 2.1 представлена гибридная (дробно-дифференциальная стохастическая) модель электронно-индуцированной кинетики переключения сегнетоэлектриков. Электронно-стимулированное переключение поляризации используется при диагностике сегнетоэлектриков методами растровой электронной микроскопии, подобные процессы играют определяющую роль в экспериментальных методиках микро- и нанодоменной инженерии – управляемом переключении доменных структур сегнетоэлектриков. При использовании повышенных ускоряющих напряжений пучок электронов проникает в образец на глубину  $l$ , что приводит к накоплению зарядов в облученном слое, на верхнем и нижнем электродах со значениями поверхностной плотности  $\sigma$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  соответственно (рис. 1 а). Это вызывает возникновение электрических полей  $\mathbf{E}_1$  в облученном слое и  $\mathbf{E}_2$  – в основном объеме материала. Поле  $\mathbf{E}_2$  способно инициировать переключение поляризации доменов, ориентированных противоположно, и в то же время стабилизировать домены с сонаправленной ориентацией вектора спонтанной поляризации  $\mathbf{P}_s$  [1].

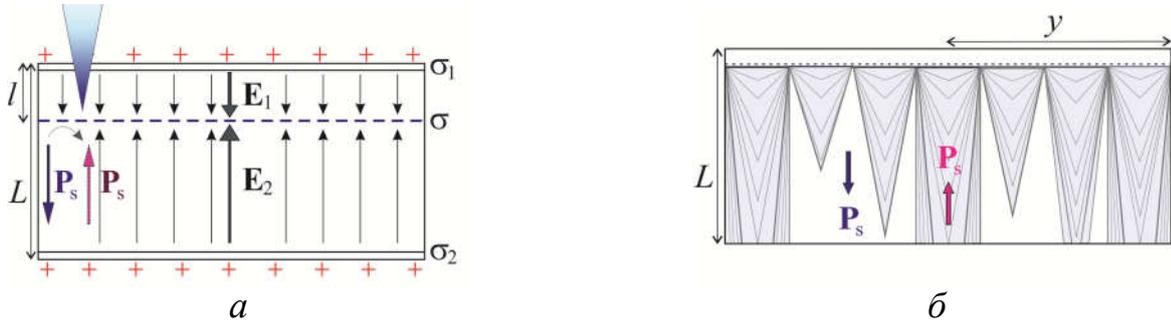


Рис. 1. Схема взаимодействия источника с образцом – а, схема прорастания доменов в процессе переключения поляризации – б.

В модель включен механизм сквозного роста доменов – расширение переключенной области осуществляется за счет прорастания клиньев с фиксированной шириной основания  $2y$  и меняющимся углом наклона доменной границы  $\varphi$ . Основу модели составляет начальная задача для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка, определяющая динамику доменной границы:

$$\frac{d^\alpha s}{dw^\alpha} = \exp \left( - \frac{\tau_2}{\tau_1 w + \frac{\tau_3}{2l} (1 + \cos^2 \varphi) \frac{Ls}{2}} \right), \quad s(w_0) = 0, \quad (1)$$

где  $x$  – положение доменной границы, м;  $s = x/L$  – безразмерная координата;  $w = t/\tau_1$  – безразмерное время,  $w \in [t_0/\tau_1, \theta/\tau_1]$ ;  $0 \leq s(w) \leq 2(1 - l/L)$ ;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\cos^2 \varphi = y^2/(x^2 + y^2)$ ;  $\tau_1 = L/v_\infty$  – характерное время пробега толщины кристалла доменной стенкой со скоростью  $v_\infty$ ;  $\tau_2 = (\delta \varepsilon \varepsilon_0 L)/(jl)$  – характерный параметр – «время» накопления заряда, создающего поле  $E_2 = \delta$  при данной плотности тока  $j$ ;  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость образца;  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная;  $\tau_3 = 2P_s/j$  – характерный параметр – «время», в течение которого ток с плотностью  $j$  инициирует появление зарядов с поверхностной плотностью  $\sigma = 2P_s$ .

В модели Колмогорова – Авраами поляризационный ток  $I(t)$  определяется отношением переключенного объема к полному объему образца. Введен механизм переключения поляризации остаточных клиньев: основание области непереключенного объема разбивается на  $M$  дискретных интервалов, каждый из которых «добавляет» в процесс переключе-

ния поляризации очередную область:

$$I(w) = \begin{cases} I^1(s(w)) = 4 \frac{P_s y d}{\tau_1} \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 0 \leq s \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ I^2(s(w)) = 4 \frac{P_s y d}{s^2 \tau_1} L^2 \left[ 1 - \frac{k}{M} \right] \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 1 - \frac{l}{L} < s \leq 2 \left( 1 - \frac{l}{L} \right), k = \overline{1, M-1}, \end{cases} \quad (2)$$

где  $k = \overline{0, M}$  – номер узла при разбиении основания неполяризованного объема.

Предложен подход к симуляции динамики доменной структуры с учетом неодновременного стохастического характера прорастания доменов клинообразной формы в процессе переключения. В модель введены следующие механизмы. В стартовый момент переключения начинается в объеме, составляющем до  $\eta$  частей от объема кристалла. Далее перестройка доменной структуры реализуется за счет роста доменов с одинаковой скоростью и с одинаковой шириной основания (рис. 1 б). «Включение» этих областей происходит последовательно, в некоторые случайные моменты времени, определяемые в соответствии со схемой метода Монте-Карло из допустимого диапазона. Для каждой области с номером  $v$  проводится моделирование динамики движения доменной границы согласно (1), (2). Ток переключения поляризации вычисляется как суперпозиция вкладов от отдельных областей с учетом весовых коэффициентов:

$$I_\Sigma(w) = \begin{cases} \eta I^1(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{V-1} \sum_{v=2}^V I^1(s_v(w)), & 0 \leq s_v(w) \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ \eta I^2(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{V-1} \sum_{v=2}^V I^2(s_v(w)), & 1 - \frac{l}{L} < s_v(w) \leq 2 \left( 1 - \frac{l}{L} \right). \end{cases} \quad (3)$$

В разделе 2.2 предложены эредитарные модели тепловых процессов, возникающих при исследовании пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика. Сделан акцент на связи и различии в идеологии построения математических моделей эредитарных систем, обладающих памятью и характеризующимся явлением запаздывания.

Сформулирована дробно-дифференциальная модель теплопроводности применительно к задаче исследования пироотклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева. Уровень нагрева сегнетоэлектриков можно оценивать по отношению к температуре Кюри (температуре фазового перехода). Процесс теплопроводности, протекающий в эредитарных режимах, описывается начально-граничной задачей:

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial \tau^\alpha} = \frac{k_T t^*}{\rho c(T)} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (4)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial T(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x=0} = -\frac{Q}{k_T}, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad T(x, \tau) \Big|_{x=L} = T_0, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (6)$$

где  $T(x, \tau)$  – температурное распределение в объекте, К;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\tau = t/t^*$  – безразмерное время;  $t^*$  – характерное время процесса, с;  $k_T$  – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);  $c$  – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К);  $\rho$  – плотность материала, кг/м<sup>3</sup>;  $L$  – толщина образца в тепловой задаче, м;  $T_0$  – температура окружающей среды, К;  $Q$  – удельная поверхностная мощность, Вт/м<sup>2</sup>;  $S$  – площадь нагреваемой грани образца, м<sup>2</sup>.

Пироток определяется изменением температуры с течением времени:

$$I(t) = \frac{S}{d} \int_0^d \gamma(T) \frac{\partial T(x, T)}{\partial t} dx, \quad (7)$$

где  $\gamma(T)$  – температурная зависимость пироккоэффициента; Кл/ (м<sup>2</sup>·К);  $d$  – толщина кристалла, м.

Раздел 2.3 посвящен разработке дробно-дифференциальных моделей: гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля и кинетики доменной границы сегнетоэлектрика. Представлены эредитарные модификации нестационарных моделей Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающие полярное состояние сегнетоэлектриков на основе термодинамического подхода.

Модифицированная модель Ландау – Халатникова в постановке задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка имеет вид:

$$\frac{1}{t^*} \frac{d^\alpha P}{d\tau^\alpha} = aP + bP^3 - cP^5 + \tilde{E}(\tau), \quad P(0) = P_0, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (8)$$

где  $P(\tau)$  – изменение поляризации с течением времени, Кл/м<sup>2</sup>;  $a = -A/\delta$ ,  $b = -B/\delta$ ,  $c = C/\delta$  – положительные параметры (для сегнетоэлектриков с фазовыми переходами I рода);  $A$ , м/Ф;  $B$ , м<sup>5</sup>/(Кл<sup>2</sup>·Ф);  $C$ , м<sup>9</sup>/(Кл<sup>4</sup>·Ф) – термодинамические параметры;  $\delta$  – кинетический коэффициент, м·с/Ф;  $\tau = t/t^*$  – безразмерное время;  $t^*$  – характерное время процесса, с;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\tilde{E}(t) = (E_0 v/\delta) \sin(\omega \tau^*)$ ,  $E_0$  – амплитуда поля, В/м;  $v$  – безразмерный коэффициент;  $\omega = 2\pi f$  – радиальная частота, рад/с;  $f$  – частота колебаний электрического поля, Гц.

Сформулирован эредитарный аналог обобщенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова в постановке начально-граничной задачи для полулинейного уравнения с частными производными с дробной производной по времени:

$$\frac{\partial^\alpha P}{\partial \tau^\alpha} = \bar{D} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \bar{a}P + \bar{b}P^3 - \bar{c}P^5 + \bar{E}(\tau), \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (9)$$

$$P|_{\tau=0} = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = -\frac{P}{\lambda}, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (10)$$

где  $\bar{D} = t^* D$ ,  $\bar{a} = t^* a$ ,  $\bar{b} = t^* b$ ,  $\bar{c} = t^* c$ ;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\tau = t/t^*$  – безразмерное время;  $t^*$  – характерное время, с;  $\theta$  – время наблюдения, с;  $\bar{E}(t) = (E_0 t^* v/\delta) \sin(\omega \tau^*)$ ;  $D$  – параметр, имеющий смысл и размерность коэффициента диффузии, м<sup>2</sup>/с;  $\lambda$  – характерный параметр, м.

Математические модели (8) и (9) – (10) позволяют описать гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля. Также представлена дробно-дифференциальная модель, описывающая динамику доменной границы в процессе переключения (схема переключения – на рис. 2).

В этом случае уравнение (9) дополняется начальными и граничными условиями:

$$P|_{\tau=0} = P_0 \tanh(x/\xi), \quad 0 \leq x \leq L, \quad P|_{x=0} = -P_0, \quad P|_{x=L} = P_0, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (11)$$

где  $\xi$  – параметр, характеризующий толщину доменной стенки, м.

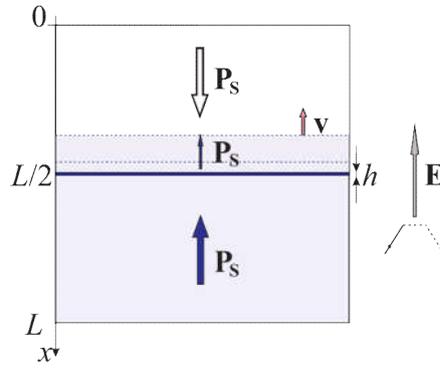


Рис. 2. Схема движения доменной стенки в процессе переключения.

Обобщенная постановка начально-граничной задачи для модели формирования динамических откликов в концепции и нотации полулинейной модели аномальной диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = d \frac{\partial^\beta u}{\partial x^\beta} + \varphi(u) + f(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (12)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (13)$$

$$-\frac{du}{dx}\Big|_{x=0} + qu|_{x=0} - g = 0, \quad \frac{du}{dx}\Big|_{x=L} + qu|_{x=L} - g = 0, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (14)$$

где  $u(x, t)$  – функция, подлежащая определению;  $d$  – коэффициент диффузии;  $\varphi(u)$  – реакционное слагаемое;  $f(x, t)$  – функция источника;  $0 < \alpha < 1$  и  $1 < \beta < 2$  – порядки дробного дифференцирования по времени и пространственной координате соответственно;  $q$  и  $g$  – параметры модели.

В каждом случае отмечено, что построение вычислительных схем и алгоритмов реализации предложенных математических моделей в силу их специфики требует привлечения численных методов.

**В третьей главе** («Вычислительные схемы и алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей эволюционных процессов в сегнетоэлектриках») предложен набор вычислительных схем, предназначенных для реализации математических моделей формирования динамических откликов сегнетоэлектриков.

В разделе 3.1 разработана вычислительная схема, основанная на гибридном дробно-дифференциальном стохастическом подходе к математическому моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков. Алгоритм реализуется в два этапа: модельное описание динамики доменной границы на основе численного решения обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка и стохастическое моделирование роста доменов с использованием метода Монте-Карло. Математическая модель динамической системы (1) включает начальную задачу для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка в следующей общей постановке:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = f(t, u(t)), \quad u(t_0) = u_0, \quad t_0 < t < \theta, \quad (15)$$

где  $f(t, u(t))$  – некоторая заданная функция;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ .

Сконструирована модификация схемы на основе формулы Грюнвальда – Летникова и идеологии методов типа «предиктор-корректор». На сетке  $\Omega_{\Delta t} = \{t_i = t_0 + i\Delta t, i = \overline{0, N}\}$  при  $i = \overline{0, N-1}$  запишем:

$$u_{GL}^p(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_i, u_{GL}^c(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (16)$$

$$u_{GL}^c(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_{i+1}, u_{GL}^p(t_{i+1})) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (17)$$

где  $C_j^\alpha = \frac{\Gamma(j-\alpha)}{\Gamma(-\alpha) \cdot \Gamma(j+1)}$  для всех  $i = \overline{0, N-1}$ .

На основе определения Капуто также введена схема прогноза и коррекции (на основе базового подхода [2]):

$$u_C^p(t_{i+1}) = u_0 + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^i b_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)), \quad i = \overline{0, N-1}, \quad (18)$$

$$u_C^c(t_{i+1}) = u_0 + \frac{(\Delta t)^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \left( f(t_{i+1}, u_C^p(t_{i+1})) + \sum_{j=0}^i a_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)) \right) \quad (19)$$

где  $b_{j,i+1} = \frac{(\Delta t)^\alpha}{\alpha} \left( (i+1-j)^\alpha - (i-j)^\alpha \right)$ ,

$$a_{j,i+1} = \begin{cases} i^{\alpha+1} - (i-\alpha)(i+1)^\alpha, & j=0, \\ (i+2-j)^{\alpha+1} - (i-j)^{\alpha+1} - 2(i+1-j)^{\alpha+1}, & 1 \leq j \leq i. \end{cases}$$

Схемы (16) – (18) имеет порядок аппроксимации  $O(\Delta t)$ , схема (18) – (19) –  $O((\Delta t)^{1+\alpha})$ . Второй этап реализации данной модели предполагает вычисление тока переключения поляризации на основе соотношений (2) и (3) с использованием метода Монте-Карло.

В разделе 3.2 формулирован вычислительный алгоритм для решения прикладной задачи оценки пирозлектрического отклика сегнетоэлектрического кристалла при интенсивном тепловом нагреве.

В условиях начально-граничной задачи (4) – (6) для дробно-дифференциального уравнения теплопроводности введем в рассмотрение пространственно-временную сетку:  $\Omega_{\Delta x}^{\Delta \tau} = \{x_i = i\Delta x, i = \overline{0, M}, \tau^j = \tau^0 + j\Delta \tau, j = \overline{0, N}\}$ , где  $\Delta x$  – шаг по координате  $x$ ;  $\Delta \tau$  – шаг по времени  $\tau$ . Аппроксимация уравнения (4) может быть записана в форме аналога схемы Кранка – Николсон с использованием формулой Грюнвальда – Летникова:

$$\frac{(\Delta \tau)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} T_i^{j-k+1} = \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}) + \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j), \quad (20)$$

где  $i = \overline{1, M-1}$ ,  $j = \overline{0, N-1}$ ,  $b_i^j = \frac{k_T t^*}{\rho c (T_i^j)}$ ; температурная зависимость теплоемкости

определяется посредством аппроксимации экспериментальных данных.

Чтобы указать, что память системы ограничена  $q$  предшествующими состояниями (“short memory effect”), суммирование проводят для  $k = \overline{0, q}$ . Система конечно-разностных уравнений, заданная для всех внутренних узлов сетки, дополняется начальным и граничными условиями. Порядок аппроксимации схемы соответствует  $O(\Delta \tau + (\Delta x)^2)$ . Итоговая система линейных алгебраических уравнений решается методом прогонки для каждого временного слоя. Вторая часть алгоритма включает расчет электрического тока, индуцированного температурным воздействием на кристалл, по формуле (7), с использованием операций численного дифференцирования и интегрирования.

В разделе 3.3 предложены вычислительные алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов на внешнее воздействие электрического поля – гистерезисной зависимости поляризации от поля и динамики движения доменной границы.

Конечно-разностная схема для реализации аналога модели Ландау – Халатникова в постановке задачи Коши для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения также соответствует форме (15) и строится с использованием определения Капуто согласно (18) и (19).

Алгоритмы реализации дробно-дифференциальной модификации обобщенной модели Ландау – Халатникова (в постановке начально-граничных задач для уравнения с частными производными дробного порядка) соответствуют вычислительным схемам, используемым для решения полулинейного уравнения аномальной диффузии. На пространственно-временной сетке  $\Omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \{x_i = i\Delta x, i = \overline{0, M}, t^j = j\Delta t, j = \overline{0, N}\}$  построены две альтернативные схемы – на основе определения Грюнвальда – Летникова (с использованием подхода [3])

$$\frac{(\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u_i^{j-k+1} = d \frac{(\Delta x)^{-\beta}}{\Gamma(-\beta)} \sum_{l=0}^{i+1} \frac{\Gamma(l-\beta)}{\Gamma(l+1)} u_{i-l+1}^{j+1} + \varphi(u_i^{j+1}) + f(x_i, t^{j+1}) \quad (21)$$

и на основе определения Капуто (как комбинация схем, предложенных в [4] и [5])

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^j \left[ w_{1,j-k+1} (u_i^{k+1} - u_i^{k-1}) + w_{2,j-k+1} (u_i^{k+1} - 2u_i^k + u_i^{k-1}) \right] = \\ & = d \frac{\Delta x^{-\beta}}{\Gamma(4-\beta)} \left\{ v_{i,0} \delta_0^2 u_0^{j+1} + \sum_{l=1}^i v_{i,l} (u_{l+1}^{j+1} - 2u_l^{j+1} + u_{l-1}^{j+1}) \right\} + \varphi(u_i^{j+1}) + f(x_i, t^{j+1}), \end{aligned} \quad (22)$$

при  $i = \overline{1, M-1}, j = \overline{0, N-1}, \delta_0^2 u_0^{j+1} = (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, t^{j+1})$ .

Весовые функции имеют вид:

$$\begin{aligned} w_{1,j-k+1} &= \frac{2-\alpha}{2} \left[ (k-j+1)^{1-\alpha} - (k-j)^{1-\alpha} \right], \\ w_{2,k-j+1} &= (k-j+1)^{2-\alpha} - (k-j)^{2-\alpha} - (2-\alpha)(k-j)^{1-\alpha}, \text{ при } j = \overline{0, N-1}, k = \overline{0, j}; \\ v_{i,k} &= (i-l+1)^{3-\beta} - 2(i-l)^{3-\beta} + (i-l-1)^{3-\beta}, \quad 1 \leq l \leq i-1, \\ v_{i,l} &= (i-1)^{3-\beta} - i^{2-\beta}(i-3+\beta), \quad l=0, \quad v_{i,l} = 1, \quad l=i. \end{aligned}$$

Особенностью введенных схем является комбинация метода конечных разностей и итерационных процедур, позволяющих строить вычислительные алгоритмы для решения полулинейных дробно-дифференциальных задач. Формируется последовательность приближений  $u_i^{(s)}$ , сходящаяся к  $u_i^{j+1}$  для каждого момента времени  $\tau^{j+1}, j = \overline{0, N-1}$ . Так, для нелинейной части обобщенного уравнения Ландау – Халатникова имеем:  $(u_i^{(s)})^3 \approx (u_i^{(s-1)})^2 u_i^{(s)}, (u_i^{(s)})^5 \approx (u_i^{(s-1)})^4 u_i^{(s)}$ , где номер итерации  $s=1,2,\dots$ , начиная с  $(u_i^{(0)}) = u_i^j$ . В модели поляризационного гистерезиса (9), (10) и динамики доменной границы (9), (11) выражения (21) и (22) модифицируем с учетом аппроксимации диффузионного слагаемого (оператор, включающий производные целого порядка) по неявной схеме. При реализации модели гистерезиса дополним конечно-разностную аппроксима-

цию уравнения начальным условием и несимметричными конечно-разностными аппроксимациями для первых производных из граничных условий Робина. При реализации модели динамики доменной границы схема (21) или (22) будет дополнена начальным условием и заданием соответствующих граничных условий Дирихле. Схема (21) имеет порядок аппроксимации  $O(\Delta\tau + \Delta x)$ , схема (22) –  $O((\Delta\tau)^{3-\alpha} + (\Delta x)^2)$ . Полученная система алгебраических уравнений решается методом Гаусса на каждом временном шаге. Заключительная часть алгоритма предполагает визуализацию параметрической зависимости поляризации от приложенного поля  $P(E)$  и визуализацию изменения координаты и скорости движения доменной границы (в модели динамики доменной структуры).

**В четвертой главе** («Комплекс программ моделирования динамических откликов сегнетоэлектрических материалов и вычислительные эксперименты») представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования, проведены проверка адекватности результатов моделирования, интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов.

В разделе 4.1 содержится описание программного обеспечения решаемых научных задач (согласно стандартной спецификации требований), структуры и режимов работы комплекса программ. Отмечено, что комплекс разработан на основе программной реализации в ППП Matlab сконструированных алгоритмов и имеет модульную структуру. Для управления режимами работы разработан пользовательский интерфейс с возможностью настройки параметров вычислительных экспериментов и графического представления полученных данных. Прикладные программы могут быть использованы для решения задач из других предметных областей в рамках сформулированных математических постановок. Система моделирования обладает преимуществом авторского программного обеспечения, поскольку позволяет решать задачи интеграции отдельных модулей и гибкого управления вычислительным процессом.

В разделе 4.2 представлены результаты верификации работы вычислительных алгоритмов на основе сравнения данных программных и аналитических решений, полученных для тестовых задач.

Сравнение трех вычислительных схем, построенных с помощью определений Грюнвальда – Летникова и Капуто для решения обыкновенного дробно-дифференциального уравнения, показало, что модифицированная схема прогноза и коррекции (на основе формулы Грюнвальда – Летникова) дает лучший результат, чем явная схема, и более проста в алгоритмическом плане, чем схема «предиктор-корректор» на основе определения Капуто.

Проведено численное исследование сконструированной вычислительной схемы (22). Практический анализ погрешностей свидетельствует в пользу теоретических оценок и позволяет заключить, что неявная схема, сконструированная с использованием определения Капуто, дает возможность проводить численное моделирование более эффективно, чем явная схема, полученная на основе определения Грюнвальда – Летникова.

Проведен анализ практической сходимости схемы с использованием правила Рунге. Вычислены скорость сходимости вычислительного процесса и проведена оценка времени вычислений. Результат свидетельствует, что скорость сходимости в процессе дробления шага изменяется. В начальном периоде, при переходе от больших значений шагов по времени и координате к более мелким, сходимость «ускоряется», затем отмечается некоторое замедление и на достаточно подробной сетке наблюдается тенденция к установлению скорости к единичному уровню (при делении шага пополам, погрешность уменьшается вдвое). Контроль времени расчета свидетельствует, что моделирование процесса

аномальной диффузии (при полной «памяти процесса») является довольно ресурсоемкой процедурой с точки зрения вычислительных затрат. При использовании математических моделей с частичной «памятью» нагрузка на вычислительную систему значительно снижается. Адекватность результатов моделирования при решении нелинейных задач проверена также сравнением результатов моделирования с данными целочисленных аналогов в предельных режимах ( $\alpha=0.99$ ).

В разделе 4.3 представлены серия вычислительных экспериментов и анализ результатов расчета (на основе дробно-дифференциального подхода) нестационарных характеристик полярного состояния сегнетоэлектриков.

В п. 4.3.1 приведены данные компьютерного моделирования тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в режиме инжекции пучка электронов. В качестве объекта моделирования выбран кристалл триглицинсульфата (ТГС). Параметры и константы модели:  $L=10^{-3}$  м;  $d=2y=0.5 \cdot 10^{-3}$  м;  $l=3 \cdot 10^{-6}$  м;  $\tau_1=13.2$  с,  $\tau_2=40$  с,  $\tau_3=10$  с;  $[10^{-4} \ 40.5]$  с – временной диапазон;  $\varepsilon=50$ ;  $\varepsilon_0=8.85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м;  $P_S=2 \cdot 10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup>. На рис. 3 а показаны результаты моделирования зависимости координаты от времени в процессе динамики доменной границы в рамках реализации дробно-дифференциальной стохастической модели и ее целочисленного аналога, на рис. 3 б – результаты моделирования электронно-индуцированного импульса тока переключения поляризации ТГС в сравнении с данными эксперимента, а также при реализации модели с целой производной и дробной производной (без использования схемы Монте-Карло). Наилучшее приближение соответствует порядку дробной производной  $\alpha=0.73$ . Модельная зависимость воспроизводит основные особенности экспериментальных импульсов токов переключения в инжекционном режиме. Стохастический процесс «включения» областей имитирует появление скачков Баркгаузена на кривой тока. Использование концепций дробно-дифференциального исчисления позволяет численно оценить «степень эрдитарности» процесса переключения сегнетоэлектриков в инжекционном режиме и проводить моделирование основной интегральной характеристики этого процесса – тока переключения поляризации.

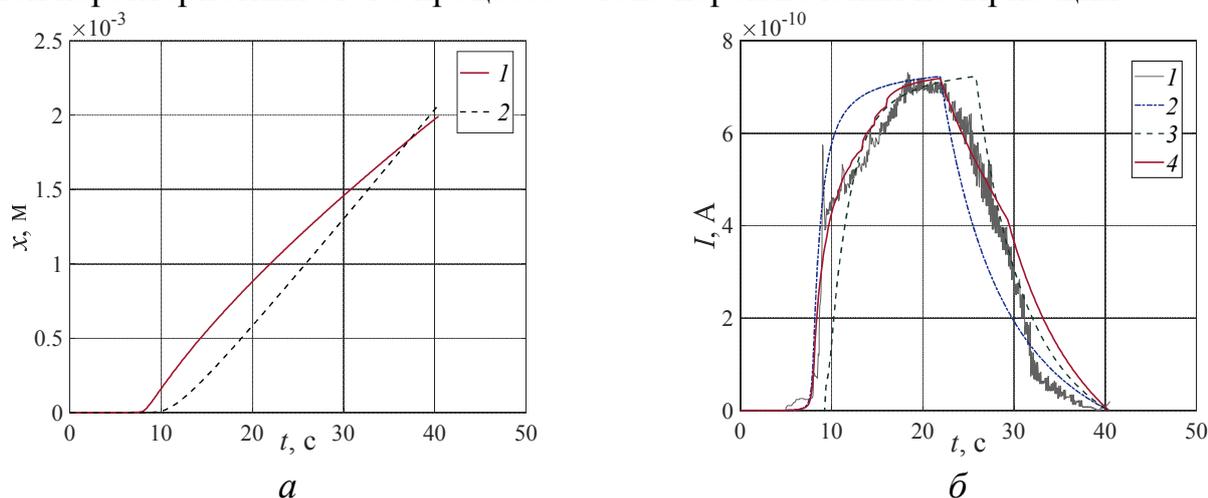


Рис. 3. Зависимость координаты от времени при движении доменной стенки: дробно-дифференциальной стохастической модели – 1, модели с целочисленной производной – 2 – а; результаты моделирования импульса тока переключения поляризации кристалла ТГС в сравнении с данными эксперимента [1] – 1: дробно-дифференциальная модель – 2, модель с целочисленной производной – 3, дробно-дифференциальная стохастическая модель – 4 – б.

В п. 4.3.2 представлены результаты моделирования пироотклика кристалла ТГС в окрестности температуры фазового перехода. Параметры модели установлены в соответ-

вии с данными экспериментальной оценки пиротоков в режиме нагрева световым потоком большой мощности:  $k_T=0.8$  Вт/(К·м),  $\rho=1.6 \cdot 10^3$  кг/м,  $Q=2.3 \cdot 10^4$  Вт/м<sup>2</sup>,  $L=25$  мм,  $d=3$  мм,  $t^*=1$  с,  $\theta=5$  с, для задания температурных зависимостей пироккоэффициента и теплоемкости использованы аппроксимации экспериментальных зависимостей. Рис. 4 а дает информацию о поведении температурной динамики при реализации дробно-дифференциальной модели с различными значениями порядка дифференцирования.

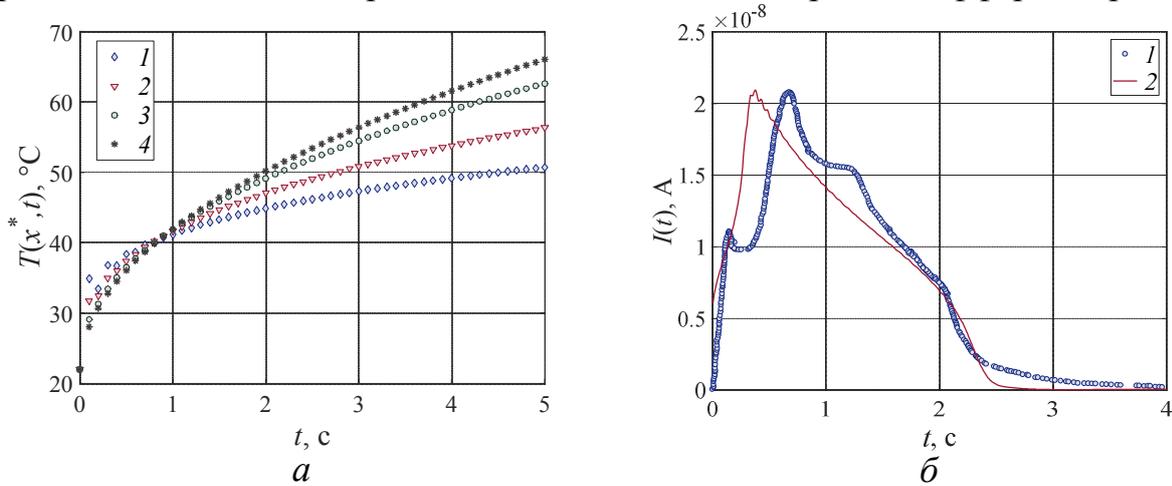


Рис. 4. Результаты моделирования: температурная динамика  $T(x^*, t)$  в точке действия источника  $x^*=0$  ( $1 - \gamma_1=0.5$ ,  $2 - \gamma_2=0.7$ ,  $3 - \gamma_3=0.9$ ,  $4 - \gamma_4=1$ ) – а; пиротклик кристалла ТГС – 2 в сравнении с данными эксперимента – 1 – б.

Сравнение значения уровня перегрева по расчетным данным с данными экспериментов возможно на основе анализа «времени Кюри», при котором исчезала петля гистерезиса в эксперименте и кристалл прогревался до температуры Кюри ( $T_C \sim 48.5^\circ\text{C}$ ). Время составляло 3 с. Наиболее адекватной, отвечающей этому значению, является модель процесса теплопроводности с порядком дробного дифференцирования  $\alpha \approx 0.7$ . Данный факт свидетельствует о необходимости использования модифицированных моделей при анализе полевых эффектов, возникающих в эрдитарных средах. Результаты моделирования формы пиротока при  $\alpha \approx 0.7$  качественно согласуются с данными эксперимента (рис. 4 б), описанными в цикле работ [6].

В разделе 4.3.3 представлены результаты компьютерного моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории. Проведено численное исследование базовых моделей (модель Ландау – Халатникова, обобщенная модель Ландау – Халатникова и квазистационарный аналог) на примере расчета гистерезисной зависимости поляризации от поля для титаната бария (объемный кристалл и тонкая пленка). Проведено сравнение результатов моделирования с данными физических экспериментов (на примере титаната бария  $\text{BaTiO}_3$ ). Показано, что обобщенная и классическая модели приводят к одинаковым результатам для объемных кристаллов. Присутствие диффузионного слагаемого в обобщенной модели Ландау – Халатникова оказывается принципиально важным для адекватного описания процесса переключения поляризации низкоразмерных сегнетоэлектрических структур. И для объемных материалов, и для тонких пленок важен учет динамики процесса – квазидинамическая модель уступает в качестве аппроксимации нестационарным моделям.

В разделе 4.3.4 приведены результаты реализации дробно-дифференциальной модификации обобщенной модели Ландау – Халатникова для описания сегнетоэлектрического гистерезиса. С целью установить общие закономерности влияния порядка дробного дифференцирования на основные характеристики системы первый вычислительный экс-

перимент проведен для модельной задачи при следующих параметрах:  $\bar{a} = 0.05$ ,  $\bar{b} = 2.5$ ,  $\bar{c} = 30$ ,  $\bar{D} = 1$ ,  $\bar{E} = 20 \sin 5t$ ,  $\lambda = 0.01$ ,  $0 \leq t \leq 1.5$ ,  $0 \leq x \leq 1$ .

На рис. 5 показан результат моделирования зависимости поляризации от поля для титаната бария  $\text{BaTiO}_3$  (переключение  $c$ -доменов) при варьировании порядков дробного дифференцирования. Термодинамические параметры:  $A = -0.029 \cdot 10^9$  м/Ф,  $B = -0.76 \cdot 10^9$  м<sup>5</sup>/(Кл<sup>2</sup>·Ф),  $C = 12.31 \cdot 10^9$  м<sup>9</sup>/(Кл<sup>4</sup>·Ф),  $E_0 = 2.5 \cdot 10^5$  В/м,  $L = 1$  мкм,  $\lambda = 0.88$  нм,  $f = 50$  Гц,  $\delta = 2 \cdot 10^5$  м·с/Ф,  $\psi = 0.5 \cdot 10^{-7}$  м<sup>3</sup>/Ф. Можно заключить, что уменьшение значения порядка дробной производной по времени соответствует сужению петли гистерезиса при сохранении ее формы. Приемлемое согласование с экспериментальными данными соответствует порядку дробного дифференцирования  $\alpha = 0.85$ .

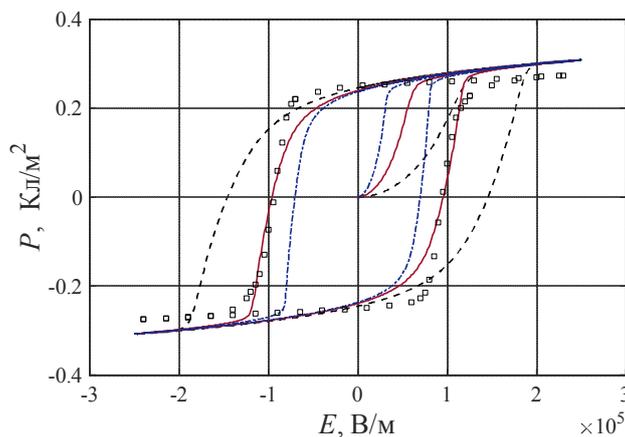


Рис. 5. Петля сегнетоэлектрического гистерезиса  $P(E)$  для  $\text{BaTiO}_3$  при  $\alpha = 0.99$  – 1 (пунктирная кривая);  $\alpha = 0.85$  – 2 (сплошная кривая);  $\alpha = 0.75$  – 3 (штрих-пунктирная кривая) в сравнении с данными эксперимента (точечный массив) [7].

В этом же разделе представлены результаты исследования практической сходимости решения задачи с использованием схемы двойного пересчета по координате и времени, установлены оптимальные соотношения шагов пространственно-временной сетки.

В разделе 4.3.5 представлены результаты моделирования движения доменной границы в процессе переключения поляризации на основе дробно-дифференциального аналога обобщенной модели Ландау – Халатникова. Выполнено анимированное представление и приведены двумерные визуализации последовательных стадий движения доменной границы в линейно нарастающем поле. На рис. 6 а показана динамика доменной границы при переключении поляризации, на рис. 6 б – зависимость скорости движения границы при варьировании значения порядка дробной производной.

Отмечается зависимость характера движения доменной границы от порядка дробной производной по времени: уменьшение параметра  $\alpha$  и учет долговременной памяти в динамической системе ведет к замедлению движения стенки на начальных этапах переключения и ее ускорению в заключительной стадии переполяризации (в терминах модели аномальной диффузии – соответствующих «замедленному блужданию»). Варьирование значений порядка дробного дифференцирования  $\alpha$ , отвечающего за эффект памяти при реализации процесса переключения, позволяет управлять характером динамики доменной границы в модельном представлении.

Таким образом, параметр  $\alpha$ , как численная характеристика эффекта памяти, является дополнительным управляющим параметром динамической модели, который может быть «настроен» для обеспечения лучшего согласования с данными эксперимента.

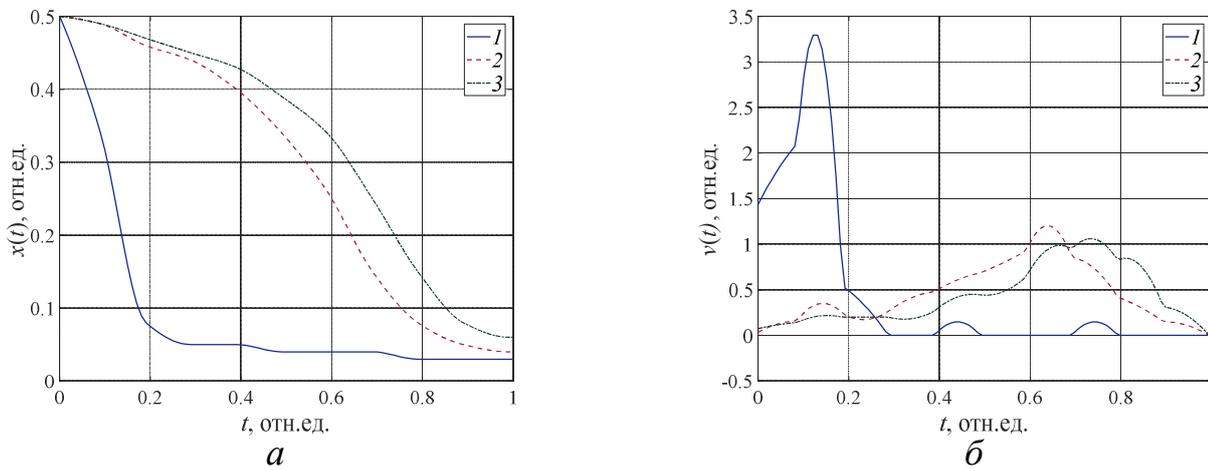


Рис. 6. Характеристики динамики доменной границы: координаты – *a* и скорости – *b* при варьировании порядка дробной производной 1 –  $\alpha=0.99$ , 2 –  $\alpha=0.85$ , 3 –  $\alpha=0.7$ .

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы. В ходе исследований решена актуальная научная задача разработки математического, алгоритмического и программного обеспечения для моделирования и исследования динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем с памятью: в режиме инжекции, в условиях интенсивного нагрева, при переключении поляризации во внешнем поле. Изложенные в диссертации результаты исследований представляют собой законченный цикл схемы вычислительного эксперимента: формализованы постановки задач моделирования, разработаны вычислительные схемы решения на основе эффективных численных методов, разработан комплекс программ, проведены расчеты, анализ и интерпретация результатов моделирования.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Приведен ряд постановок задач моделирования нестационарных процессов, протекающих во фрактальных физических средах. В качестве объекта моделирования выбраны динамические процессы, наблюдаемые в сегнетоэлектрических материалах в условиях внешнего воздействия: инжекции электронов, нагрева, приложенного поля. Модификации динамических моделей физических процессов введены на основе использования аппарата дробно-дифференциальных уравнений.

2. Предложена гибридная дробно-дифференциальная стохастическая модель электронно-индуцированной кинетики переключения сегнетоэлектриков с учетом эффекта памяти процесса и неодновременного стохастического характера прорастания доменов клинообразной формы в процессе переключения.

3. Предложена математическая модель формирования пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева, в основе которой лежит эрдитарная модель теплопроводности.

4. Предложена дробно-дифференциальная модификация уравнения Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова для модельного описания гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля и движения доменной границы.

5. Сконструированы вычислительные схемы для реализации модели инжекционного отклика и модели Ландау – Халатникова в постановке начальной задачи для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения на основе определения Грюнвальда – Летникова, Капуто и концепции предиктор-корректорных схем.

6. Сформулирован вычислительный алгоритм для решения прикладной задачи об

оценке пироотклика сегнетоэлектрика при интенсивном тепловом нагреве. В основе алгоритма лежит процедура численного решения уравнения теплопроводности с дробной производной по времени с использованием формулы Грюнвальда – Летникова и концепции схемы Кранка – Николсон.

7. Предложены вычислительные алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов на внешнее воздействие электрического поля: гистерезисной зависимости поляризации от поля и динамики движения доменной границы. В основе алгоритмов – комбинация конечно-разностных схем, построенных с использованием определения Капуто, и итерационных процедур при решении начально-граничной задачи для дифференциального уравнения с частными производными, включающего дробную производную по времени.

8. Для решения полулинейного уравнения аномальной диффузии построены две альтернативные вычислительные схемы: на основе определений Грюнвальда – Летникова и Капуто. Особенностью введенных схем является также комбинация метода конечных разностей и итерационных процедур.

9. Разработан модульный программный комплекс в ППП Matlab, предназначенный для моделирования нестационарных откликов фрактальных физических систем с памятью в приложении к задачам прогнозирования характеристик переключения поляризации типичных сегнетоэлектриков.

10. Проведена проверка адекватности результатов моделирования на основе сравнения отдельных результатов с аналитическими решениями для тест-задач. Верификация результатов моделирования при решении нелинейных задач проведена также на основе сравнения результатов моделирования с данными целочисленных аналогов в предельных режимах ( $\alpha=0.99$ ).

11. Представлена серия вычислительных экспериментов по исследованию закономерностей, характеризующих динамические отклики типичных сегнетоэлектриков в условиях электронного облучения, нагрева и переключения поляризации. Установлено, что во многих случаях возможность варьирования порядка дробного дифференцирования обеспечивает результат реализации дифференциальной модели, лучше воспроизводящий экспериментально наблюдаемые закономерности по сравнению с целочисленными аналогами. Параметр  $\alpha$  – порядок дробной производной, как численная характеристика эффекта памяти, является дополнительным управляющим параметром динамической модели, который может быть «настроен» для обеспечения оптимального согласования с данными эксперимента.

Таким образом, дробно-дифференциальная генерализация моделей формирования динамических откликов сегнетоэлектриков существенно расширяет спектр функциональных возможностей методологии численного моделирования применительно к исследованию данного класса фрактальных физических систем с памятью.

## **СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

### **Статьи в журналах, рекомендованных ВАК**

1. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Дробно-дифференциальная модель процесса теплопроводности сегнетоэлектрических материалов в условиях интенсивного нагрева // Математика и математическое моделирование. – 2019. – Т. 2. – С. 29 – 47.

2. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Гибридный фрактально-стохастический подход к моделированию кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции // Матема-

тическое моделирование. – 2019. – Т. 31. – № 9. – С. 131 – 144. / переводная версия Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Hybrid stochastic fractal-based approach to modeling the switching kinetics of ferroelectrics in the injection mode // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2020. – V. 12. – P. 348–356.

3. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Численное моделирование процесса аномальной диффузии на основе схемы повышенного порядка точности // *Математическое моделирование*. – 2020. – Т. 32. – № 10. – С. 62 – 76. / переводная версия Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Numerical simulation of an anomalous diffusion process based on the higher-order accurate scheme // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2021. – V. 13 (3). – P. 492 – 501.

#### **Статьи в зарубежных изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus**

4. Maslovskaya A.G., Moroz L.I. Mathematical modeling diffusion systems with delay applied to estimation of temperature distribution for heating materials under electron irradiation // *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*. – 2019. – V. 1203. – P. 012046 (11).

5. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Simulation of nonlinear pyroelectric response of ferroelectrics near phase transition: fractional differential approach // *Materials Science Forum*. – 2020. – V. 992. – P. 843 – 848.

6. Maslovskaya A.G., Moroz L.I., Chebotarev A.Yu., Kovtanyuk A.E. Theoretical and numerical analysis of the Landau–Khalatnikov model of ferroelectric hysteresis // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2021. – V. 93. – P. 105524 (13).

7. Moroz, L.I., Maslovskaya, A.G. Computer Simulation of hysteresis phenomena for ferroelectric switching devices // *Proc. of the International multi-conference on industrial engineering and modern technologies (IEEE Xplore Publ.)*. – Vladivostok, 2020. – P. 1 – 6.

8. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Computational techniques for modeling time-fractional dynamics of polarization switching in ferroelectrics // *Proceedings of the Workshop on Mathematical Modeling and Scientific Computing: Focus on Complex Processes and Systems*. – Munich, 2020. – P. 180 – 191.

9. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Fractional differential model of domain boundary kinetics in ferroelectrics: a computational approach // *AIP Conference Proceedings*. – 2021. – V. 2328. – P. 020001 (5).

#### **Статьи в региональных изданиях и материалы конференций**

10. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Реализация дробно-дифференциальной модели динамики самоподобных физических систем на основе предикт-корректорной схемы // *Математическое моделирование процессов и систем: сб. трудов VIII Междунар. молодежной науч.-практ. конф.* – Ч. 3. – Уфа, 2018. – С. 56-61.

11. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Метод прогноза и коррекции в задаче численного моделирования фрактальной динамики доменных границ сегнетоэлектриков // *Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки»*. – Благовещенск: АмГУ. – 2018. – Вып.83. – С. 3-8.

12. Биссенова К.В., Мороз Л.И. Использование аппарата дробного дифференцирования для численного моделирования динамических систем // *Математическое и компьютерное моделирование: сб. материалов VI Междунар. науч. конф.* – Омск: Изд-во Омского гос. ун-та. – 2018. – С. 36-39.

13. Масловская А.Г., Мороз Л.И. Моделирование диффузионных систем с запаздыванием в приложении к задаче оценки температурного нагрева материалов при электронном облучении // *Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сб. трудов Междунар. науч. конф.* – Воронеж: Изд-во «Научно-исследовательские

публикации». – 2019. – С. 852-859.

14. Мороз Л.И. Численное решение одного класса начально-граничных задач для уравнения диффузии дробного порядка // Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ. – 2019. – Вып. 85. – С. 30-34.

15. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Приложение дробно-дифференциального исчисления к задачам моделирования процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических материалов // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: сб. материалов XVII рег. науч. конф. – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, Благовещенский гос. пед. ун-т. – 2019. – С. 53-56.

16. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Дробно-дифференциальная модель эрдитарных гистерезисных явлений в сегнетоэлектриках // Информационные технологии и высокопроизводительные вычисления: материалы V Междунар. науч.-практ. конф. – Хабаровск: Изд-во Тихоокеанского гос. ун-та. – 2019. – С. 160-165.

17. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Дробно-дифференциальная модель аномальной диффузии: приложение к описанию процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков // Лобачевские чтения: материалы XVIII Всеросс. молодежной науч. школы-конференции. – Казань: Изд-во Академии наук РТ. – 2019. – Т. 58. – С. 98-101.

18. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Численное моделирование эрдитарных процессов переключения в сегнетоэлектриках // Современные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сб. материалов Междунар. науч. конф. – Эльбрус. – 2020. – Т.1. – С. 49-51.

19. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Дробно-дифференциальная модель кинетики доменной границы сегнетоэлектрика: численный подход // IX Междунар. конф. по математическому моделированию: сб. тезисов докладов. – Якутск: Изд. дом СВФУ. – 2020. – С. 47.

20. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Численное моделирование эрдитарных процессов теплопроводности // Математическое и компьютерное моделирование: сб. материалов VIII Междунар. науч. конф. – Омск: Изд-во Омского гос. ун-та. – 2020. – С. 105-107.

### **Объекты интеллектуальной собственности**

1. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019616596 «Программа моделирования электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе фрактально-стохастического подхода», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 24.05.2019, г. Москва.

2. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019664312 «Программа численного моделирования процесса теплопроводности эрдитарных сред в нелинейных режимах», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 19.11.2019, г. Москва.

3. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021613089 «Программа моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса на основе дробно-дифференциального подхода», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 02.03.2021, г. Москва.