

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
*Амурский государственный университет*

**Мороз Любовь Игоревна**

**СИСТЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ДИНАМИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ:  
ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ КОНЦЕПЦИЯ**

**Препринт автореферата**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

Благовещенск  
2024

УДК 519.6:51.73  
ББК 22.379  
М 80

**Л.И. Мороз**

М Системы моделирования динамических откликов функциональных диэлектриков:  
80 дробно-дифференциальная концепция : препринт / Л. И. Мороз ; Амур. гос. ун-т,  
2024. – 30 с.

В препринте автореферата изложены структура, цели и задачи диссертации, приведены математические модели, описывающие динамические отклики сегнетоэлектриков, построены вычислительные схемы для дробно-дифференциальных уравнений, а также показаны результаты вычислительных экспериментов.

ББК 22.379

ISBN 978-5-93493-421-8

© Мороз Л.И. 2024

© Амурский государственный университет, 2024

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** В настоящее время активно разрабатываются математические теории, которые направлены на поиск новых способов исследования реальных процессов различной природы. В первую очередь это связано с полнотой и завершенностью существующих математических моделей, а также с появлением новых задач, требующих более сложного математического аппарата. В последние десятилетия аппарат интегро-дифференциального исчисления находит все более широкое применение в науке и технике благодаря своей способности описывать процессы с памятью и аномальной динамикой. Фундаментальные основы дробно-дифференциального исчисления представлены в обзорах многих авторов (S.G. Samko, A.A. Kilbas, K.S. Miller, B. Ross, Y. Zhou, B.J. West, В.В. Учайкина, А.М. Нахушева и др.).

В современной практике аппарат дробно-дифференциальных уравнений используется для математического моделирования динамических откликов сложно-структурированных физических сред, возникающих в неравновесных внешних условиях. Такие процессы относят к неклассическим, или аномальным. Дробные производные по времени используются для моделирования систем с памятью, где текущие состояния зависят от предыдущих. Это особенно актуально в материалах с аномальными динамическими откликами. При построении дробно-дифференциальных математических моделей для описания течения процессов в объектах со сложной структурой и многофазным составом применяют дробную производную по координате. Примерами таких систем являются твердотельные среды, проявляющие свойства самоподобия в геометрии объемного строения и топографии поверхности, а также обнаруживающие фрактальные закономерности динамических характеристик. В частности, перспективный класс полярных диэлектриков – сегнетоэлектрики являются примером фрактальных физических систем. Сегнетоэлектрики находят разнообразные применения в структуре различных устройств: оперативной памяти, сенсорах, модуляторах и т.д. Наиболее значимые приложения сегнетоэлектриков связаны с общими механизмами переключения поляризации и динамикой доменной структуры, индуцированными внешними воздействиями.

Несмотря на существующие исследования в области сегнетоэлектриков, применение дробных производных для описания их откликов остается недостаточно изученным. В литературе представлены отдельные работы, касающиеся теоретических основ дробного исчисления, однако систематизированный подход к моделированию процессов в сегнетоэлектриках с использованием дробных производных требует дальнейшего изучения.

В частности, дробный аналог модели Колмогорова – Аврамы для моделирования тока переключения поляризации в сегнетоэлектриках и аналитические методы его реализации были предложены в работах Р. П. Мейланова и С. А. Садыкова. Дробно-дифференциальная модификация уравнения колебаний были применены для моделирования диэлектрического отклика полидоменного сегнетоэлектрика в трудах Н. М. Галияровой. Конечно-разностные аппроксимации производных нецелого порядка использованы для реализации квазистатической модели диэлектрического гистерезиса (D. Guyomar, V. Ducharme, B. Zhang). Более того, дробная модель предложена R. Meng для исследования нелинейного механического и электрического поведения сегнетоэлектрических полимерных композитов. Анализ влияния дробных параметров на динамические характеристики солитонных волн в нелинейном дробно-временном уравнении тонкопленочных сегнетоэлектрических материалов описан X. Wang. Точные дробные солитонные решения для уравнения с использованием аналитических подходов представлены W. Faridi

для тонкопленочного сегнетоэлектрического материала. Численное решение обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка описано в трудах А.Г. Масловской с соавторами (модель тока переключения поляризации в режиме инжекции). Построение аналитических решений для дробно-дифференциальных уравнений может быть сложной задачей, стремление достичь практических результатов в приложениях требует разработки эффективных приближенных методов, в частности метода конечных разностей.

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, А.Н. Боголюбов, 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 этим **объектом** исследования являются динамические отклики сложных физических систем, а **предметом** исследования – численные методы и алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей динамических откликов сегнетоэлектриков.

**Целью** диссертации является развитие математического, алгоритмического и программного обеспечения для численной реализации моделей, описывающих динамические отклики сегнетоэлектриков в различных режимах.

Для достижения этой цели поставлены следующие **задачи**:

1. Математическая формализация нелинейных динамических систем в контексте дробно-дифференциального исчисления, ассоциированных с процессами формирования поляризационных откликов сегнетоэлектриков: в режиме инжекции, в условиях интенсивного нагрева и при переключении поляризации во внешнем поле, в условиях электронного облучения.

2. Разработка и реализация вычислительных схем, предназначенных для численной 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 субдиффузионном и супердиффузионном режимах (в постановке начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными); модели нестационарного процесса электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков (формализованной в виде диффузионно-дрейфового уравнения с производной дробного порядка по времени).

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 соответствующих программ.

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

**Методы и средства решения научных задач.** В работе применена общая методология математического и компьютерного моделирования: методы дробного исчисления, численные методы решения дифференциальных уравнений, а также методы статистического анализа для обработки экспериментальных данных.

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 конечно-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.

### **Новизна научного исследования.**

1. Разработан и реализован гибридный дробно-дифференциально-стохастический подход к математическому моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков на основе синтеза конечно-разностной схемы типа «предиктор-корректор» в концепции определения дробной производной Капуто и метода Монте-Карло для имитации процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика.

2. Предложена эрeditарная модификация модели формирования пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева. Сконструирована и программно реализована вычислительная схема, которая строится на базе аналога схемы Кранка – Николсон при аппроксимации производной дробного порядка Грюнвальда – Летникова для решения нелинейного дробно-дифференциального уравнения теплопроводности.

3. Предложена дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающая динамику перестройки доменов сегнетоэлектрика в процессе переключения и гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля. Построена вычислительная схема для численного решения диффузионно-волнового уравнения, лежащая в основе математической модели. Вычислительная методика построена на основе комбинации итерационного подхода и неявной конечно-разностной схемы для решения полулинейного дробно-дифференциального уравнения с частными производными Капуто.

4. Предложенные вычислительные алгоритмы реализованы в виде прикладных программ в ППП Matlab, интегрированных в комплекс. Интерфейс системы компьютерного моделирования ориентирован на расчет и визуализацию нестационарных характеристик поляризационных откликов сегнетоэлектриков в различных режимах.

5. С использованием технологии вычислительного эксперимента проведены исследования закономерностей изменения полярного состояния типичных сегнетоэлектриков в неравновесных внешних условиях: инъекции электронного пучка, интенсивного нагрева, воздействия внешнего периодического поля и внешнем облучении.

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

1. Дробно-дифференциальные модели, представляющие обобщение детерминированных аналогов, 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.

#### **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 дает исследователю дополнительный гибкий и чувствительный инструмент математической «настройки» моделируемых характеристик в соответствии с закономерностями, наблюдаемыми в практике физического эксперимента. Разработанная неявная итерационная схема повышенного порядка точности для решения полулинейного дробно-дифференциального уравнения с частными производными типа «реакция-диффузия» может быть легко адаптирована для задач из других предметных областей, формализуемых с помощью аналогичного аппарата дробного дифференцирования.

Математические модели и программные средства, разработанные в диссертации, используются в учебном процессе ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», при выполнении научно-исследовательских работ, в курсовом проектировании, при написании выпускных квалификационных работ студентами, обучающимися по направлениям подготовки «Прикладная математика и информатика» (уровни бакалавриата и магистратуры). Результаты исследования могут быть использованы для разработки новых технологий и устройств на основе сегнетоэлектриков, а также для улучшения существующих методов анализа и моделирования в данной области.

**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. Верификация отдельных результатов моделирования проведена на платформе COMSOL Multiphysics.

**Апробация работы.** Результаты диссертации 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 Между-

народной 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); Международной конференции актуальных проблем математики, информатики и механики, (Воронеж, 2022); «Workshop on mathematical modeling and scientific computing – 2022» (Munich, 2022); I Международном семинаре «Вычислительные технологии и прикладная математика» (Владивосток, 2022); X Международной научной конференции «Математическое и компьютерное моделирование» (Омск, 2023); X Международной научно-практической конференции «Информационные технологии в образовании и науке (ИТОН)» (Казань, 2023); International conference days on diffraction (Санкт-Петербург, 2023); II Международном семинаре «Вычислительные технологии и прикладная математика» (Благовещенск, 2023); XI Международной научной конференции «Математическое и компьютерное моделирование», посвященной памяти В.А. Романькова (Омск, 2024); III Научной конференции с международным участием «Вычислительные технологии и прикладная математика» (Комсомольск-на-Амуре, 2024); Всероссийской научной конференции «Моделирование и экспериментальные исследования динамики сложных систем» (Нижний Новгород, 2024).

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 диссертации были получены автором в ходе исследований, выполнявшихся в 2018-2024 гг. в рамках научных тем: госбюджетная НИР ФГБОУ ВО «АмГУ» «Разработка систем компьютерного моделирования процессов неравновесного воздействия концентрированных потоков 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.); проект «Математические модели, алгоритмы, программные средства в задачах контроля и диагностики сложных биологических и физических систем» (№ 122082400001-8) в 2022-2024 гг., в рамках программы «Приоритет 2030» (в качестве научного руководителя молодежной лаборатории).

**Публикации и личный вклад автора.** По материалам диссертации опубликованы 39 работ, в том числе 8 статей в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ или приравненных к ним (из них 2 статьи в журналах, входящих в квартиль Q1 WOS); 12 публикаций – в изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus; 4 статьи – в региональных изданиях, 1 монография. Получены 6 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Диссертация представляет итог самостоятельной работы автора, обобщающей полученные им результаты, а также работы в соавторстве. В последних научных вклады авторов приблизительно равноценны. Все сделанные в диссертации выводы принадлежат автору. Проведение конкретных расчётов, сравнение с экспериментальными данными, численное моделирование и анализ результатов выполнены автором самостоятельно. Экспериментальные данные, используемые для анализа и апробации моделей, взяты из откры-

тых источников.

**Соответствие паспорту специальности.** Научные результаты, полученные в диссертации, соответствуют трем пунктам паспорта специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: п. 4. – реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента; п. 5. – комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента; п. 8. – разработка систем компьютерного и имитационного моделирования.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** диссертации представлены основные аспекты работы: обоснование актуальности темы и степень ее разработанности, цель и задачи, методы исследования, основные положения, выносимые на защиту, научная новизна и практическая значимость работы. Структура диссертации и функциональные связи между главами соответствуют этапам полного цикла вычислительного эксперимента, начиная с теоретического обоснования, заканчивая практическими приложениями и выводами, что обеспечивает целостность и последовательность исследования.

**В первой главе** («Основные понятия и приложения теории дробного исчисления») описаны краткие теоретические сведения о теории интегро-дифференциального исчисления и его приложения к диэлектрическим материалам. Приведены существующие вычислительные схемы, построенные для некоторых видов решения дифференциальных уравнений, на основе метода конечных разностей.

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 дробно-дифференциальный подход в задачах исследования свойств сегнетоэлектриков. Отмечено, что сегнетоэлектрические материалы по ряду характеристик ведут себя как эрмитарные среды. 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 моделей в постановке дробно-дифференциальных уравнений практически нет (применительно к описанию свойств се-

гнетозлектриков).

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

**Во второй главе** приведен ряд концептуальных постановок задач моделирования динамических процессов, наблюдаемых в сегнетоэлектриках при внешнем воздействии, сводящиеся к задачам Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с дробной производной.

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  $E_1$  в облученном слое и  $E_2$  – в основном объеме материала. Поле  $E_2$  способно инициировать переключение поляризации доменов, ориентированных противоположно, и в то же время стабилизировать домены с сонаправленной ориентацией вектора спонтанной поляризации  $P_s$ .

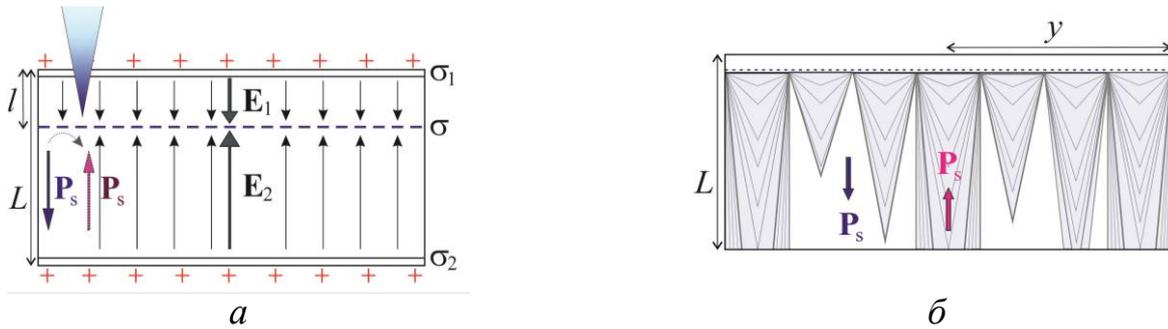


Рис. 1. Схема взаимодействия источника с образцом – а, схема прорастания доменов в процессе переключения поляризации – б.

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  $v_\infty$ ;  $\tau_2 = (\delta \epsilon \epsilon_0 L)/(jl)$  – характерный параметр – «время» накопления заряда, создающего поле  $E_2 = \delta$  при данной плотности тока  $j$ ;  $\epsilon$  – 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 – Аврами 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 переключения 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 непереполяризованного 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 переключение 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 описана простейшая одномерная постановка задачи математического моделирования процесса зарядки полярных диэлектриков. Модель построена с использованием следующих предположений: в качестве носителей заряда рассмотрены только электроны, так как дырочная проводимость невелика; в образце отсутствует собственная проводимость, и под действием электрического поля в диэлектрике дрейфуют инжектированные заряды; в силу того, что сегнетоэлектрики демонстрируют эффекты памяти, введем в уравнение дробную производную по времени.

Тогда задача примет вид:

$$\frac{d^\alpha \rho}{dt^\alpha} = - \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho^2, \quad \rho(t_0) = \rho_0, \quad (4)$$

где  $t \geq t_0$ ,  $\frac{d^\alpha y(t)}{dt^\alpha}$  – дробная производная Капуто,  $0 < \alpha \leq 1$ . Аналитическое решение (4) в

случае  $\alpha=1$ : 
$$\rho(t) = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \cdot \rho_0}{\mu_n \rho_0 t + \varepsilon \varepsilon_0}.$$

В разделе 2.3 показаны эредитарные модели сегнетоэлектрического гистерезиса.

В подразделе 2.3.1 выведено уравнение, описывающее сегнетоэлектрический гистерезис, в котором свободная энергия взята как функция гиперболического тангенса от поляризации

$$G(\mathbf{P}) = \eta \cdot \tanh(R \cdot \mathbf{P}),$$

где  $\mathbf{P}$  – спонтанная поляризация,  $\eta$ ,  $R$  – положительно определенные константы.

Отметим, что построение функции насыщения на основе гиперболического тангенса, как правило, является чисто эмпирическим подходом и выводится с помощью формальной логики. Множитель  $R$  определяет наклон петли.

Тогда дробно-дифференциальный аналог кинетического уравнения эволюции спонтанной поляризации, вызванной приложенным электрическим полем, можно записать как

$$\frac{\xi}{t^*} \frac{d^\alpha P}{d\tau^\alpha} = - \left[ \eta \cdot \tanh(R \cdot \mathbf{P}) - E_0 \sin(2\pi f t^* \tau) \right]. \quad (5)$$

Математическая модель замыкается заданием начального условия  $P(\tau_0) = P_0$ .

В подразделе 2.3.2 описана дробно-дифференциальная модель сегнетоэлектрического гистерезиса на основе уравнения Ландау – Халатникова.

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

$$\frac{1}{t^*} \frac{d^\alpha P}{d\tau^\alpha} = aP + bP^3 - cP^5 + \tilde{E}(\tau), \quad P(0) = P_0, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (6)$$

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,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\tilde{E}(t) = (E_0 \nu / \delta) \sin(\omega t^* \tau)$ ,  $E_0$  – амплитуда поля, В/м;  $\nu$  – безразмерный коэффициент;  $\omega = 2\pi f$  – радиальная частота, рад/с;  $f$  – частота колебаний электрического поля, Гц.

**В третьей главе** приведен ряд концептуальных постановок задач моделирования динамических процессов, наблюдаемых в сегнетоэлектриках в условиях внешнего воздействия: нагрев, приложенное поле, электронное облучение, сводящиеся к начально-краевым задачам для уравнений с частными производными нецелого порядка.

В разделе 3.1 предложены эредитарные модели тепловых процессов, возникающих при исследовании пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика. Сделан акцент на связи и различии в построении математических моделей эредитарных систем, обладающих памятью и характеризующихся 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:

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial \tau^\alpha} = \frac{k_T t^*}{\rho c(T)} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (7)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial T(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x=0} = -\frac{Q}{k_T}, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad T(x, \tau)|_{x=L} = T_0, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (9)$$

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:

$$I(t) = \frac{S}{d} \int_0^d \gamma(T) \frac{\partial T(x, T)}{\partial t} dx, \quad (10)$$

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

В разделе 3.2 формулируется концептуальная постановка задачи – проведение математического моделирования процессов нестационарной зарядки полярных диэлектриков при облучении электронными пучками средних энергий.

В качестве модельных объектов рассматриваются типичные сегнетоэлектрики, для которых известна практика применения методов растровой электронной микроскопии для анализа свойств и модификации их полярных структур. Будем полагать, что образец подвержен облучению сфокусированным пучком электронов средних энергий (1-40 кэВ). Из многочисленных эффектов воздействия электронного облучения на диэлектрик будем рассматривать эффект зарядки с учетом собственной электронно-стимулированной проводимости образца. Будем считать, что при использовании нанесенных тонких металлических электродов их влияние пренебрежимо мало, а включение источника в образце происходит мгновенно. Учтем, что кристаллические материалы моделируются сплошными изотропными средами, для которых могут быть инициализированы общие физические и химические параметры, а также электрические характеристики. В простейшем случае считаем, что модель сферически-симметричная. Линейный размер объекта выбирается таким образом, чтобы краевые эффекты не играли существенной роли при численном решении задач. Результат моделирования – пространственно-временные распределения объемной плотности инжектированных зарядов, потенциала и индуцированного электрического поля. Допустим, рис. 2, что объект и внутренний источник зарядов, действующий в нем, обладают сферической симметрией (при локальном воздействии источника и определенной энергии пучка такое приближение можно считать оправданным).

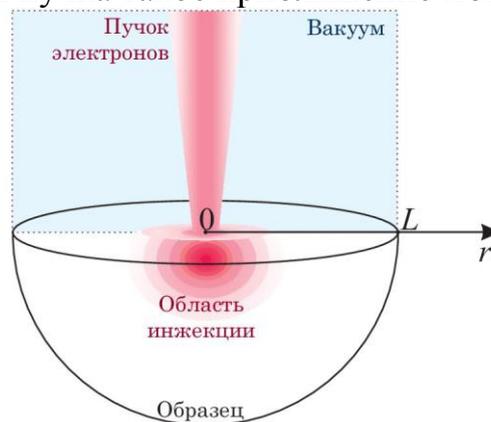


Рис. 2. Геометрическая схема объекта и внутреннего источника заряда.

Принимая во внимание геометрию задачи и формализуя присутствие эффектов памяти в физической системе, введем в рассмотрение дробно-дифференциальный аналог модели процесса зарядки полярного диэлектрика при электронном облучении:

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha \rho}{t^* \partial \theta^\alpha} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} + \frac{2D}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} - \mu_n E \frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho^2 + G, \\ \frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} = -\frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \\ E = -\frac{d\varphi}{dr}, \end{cases} \quad (11)$$

где  $\rho = \rho(r, \theta)$  – пространственно-временное распределение плотности зарядов в объекте, Кл/м<sup>3</sup>;  $\varphi = \varphi(r)$  – пространственное распределение потенциала, В;  $G = G(r)$  – функция источника, Кл/(м<sup>3</sup>·с),  $0 < r < L$ ;  $0 < \theta \leq T/t^*$ ;  $\theta = t/t^*$ ;  $t^*$  – некоторое характерное время процесса, с;  $\frac{\partial^\alpha \rho}{\partial \theta^\alpha}$  – производная Капуто,  $0 < \alpha < 1$ .

Раздел 3.3 посвящен разработке дробно-дифференциальных моделей: гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля и кинетики доменной границы сегнетоэлектрика. Представлены модификации нестационарных моделей Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающие полярное состояние сегнетоэлектриков на основе термодинамического подхода.

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

$$\frac{\partial^\alpha p}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + p + bp^3 - cp^5 + \sigma e, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (12)$$

$$p|_{t=0} = p_0(x), \quad 0 < x < l, \quad \left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{t=0} = \tilde{p}_0(x), \quad 0 < x < l, \quad (13)$$

$$-\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x=0} + qp|_{x=0} - g = 0, \quad \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x=l} + qp|_{x=l} - g = 0, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (14)$$

где  $\frac{\partial^\alpha p}{\partial t^\alpha}$  – левосторонняя производная Капуто;  $\alpha$  – порядок дробной производной по

времени,  $0 < \alpha \leq 2$ ;  $b = \frac{B}{A}(P_0)^2$ ,  $c = \frac{C}{A}(P_0)^4$  – безразмерные параметры;  $p = P/P_0$ ;  $P$  – спонтанная поляризация, Кл/м<sup>2</sup>;  $P_0$  – некоторое характерное значение спонтанной поляризации, Кл/м<sup>2</sup>;  $\delta$  – кинетический коэффициент, м·с/Ф;  $\psi$  – градиентный коэффициент, м<sup>3</sup>/Ф;  $A$ , м/Ф;  $B$ , м<sup>5</sup>/(Кл<sup>2</sup>·Ф);  $C$ , м<sup>9</sup>/(Кл<sup>4</sup>·Ф) – положительные термодинамические параметры;

$E = E_0 \sin(2\pi f \tilde{t})$  – напряженность поля в В/м;  $e = \frac{E_0}{AP_0} \sin\left(\frac{2\pi f t \delta}{A}\right)$ ;  $\tilde{t}$  – реальное время

процесса, с;  $\xi$  – длина образца, м;  $t = \frac{A}{\delta} \tilde{t}$  и  $x = \sqrt{\frac{A}{\psi}} \xi$  – безразмерные время и длина;  $q, g$  –

положительные параметры.

Математическая модель (9) – (11) позволяет описать гистерезисную зависимость

поляризации от приложенного поля.

Также представлена дробно-дифференциальная модель, описывающая динамику доменной границы в процессе переключения (схема переключения – на рис. 3).

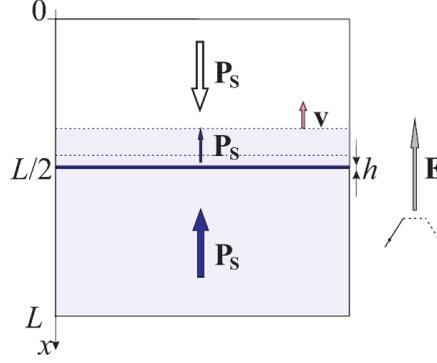


Рис. 3. Схема движения доменной стенки в процессе переключения.

Математическая постановка задачи примет вид:

$$\frac{\partial^\alpha P}{\partial \tau^\alpha} = \bar{D} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \bar{a}P + \bar{b}P^3 - \bar{c}P^5 + \bar{E}(\tau), \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (15)$$

$$P|_{\tau=0} = P_0 \tanh(x/\lambda), \quad 0 \leq x \leq L, \quad P|_{x=0} = -P_0, \quad P|_{x=L} = P_0, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (16)$$

где  $\lambda$  – параметр, характеризующий толщину доменной стенки, м;  $\bar{D} = t^* D = t^* \psi / \delta$ ,  $\bar{a} = t^* A / \delta$ ,  $\bar{b} = t^* B / \delta$ ,  $\bar{c} = t^* C / \delta$ ;  $\alpha$  – порядок дробной производной,  $0 < \alpha < 1$ ;  $\tau = t/t^*$  – безразмерное время;  $t^*$  – характерное время, с;  $\theta$  – время наблюдения, с;  $\bar{E}(\tau) = (E_0 t^* v / \delta) \sin(\omega \tau t^*)$ .

Построение вычислительных схем и алгоритмов реализации предложенных математических моделей в силу их специфики требует привлечения численных методов.

**В четвертой 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 4.1 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:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = f(t, u(t)), \quad u(t_0) = u_0, \quad t_0 < t < \theta, \quad (17)$$

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:

$$u_{GL}^p(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_i, u_{GL}^c(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (18)$$

$$u_{GL}^c(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_{i+1}, u_{GL}^p(t_{i+1})) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (19)$$

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:

$$u_C^p(t_{i+1}) = u_0 + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^i b_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)), \quad i = \overline{0, N-1}, \quad (20)$$

$$u_C^c(t_{i+1}) = u_0 + \frac{(\Delta t)^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \left( f(t_{i+1}, u_C^p(t_{i+1})) + \sum_{j=0}^i a_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)) \right) \quad (21)$$

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

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

Схема (18) – (19) имеет порядок аппроксимации  $O(\Delta t)$ , схема (20) – (21) –  $O((\Delta t)^{1+\alpha})$ . Второй этап реализации данной модели предполагает вычисление тока переключения поляризации на основе соотношений (2) и (3) с использованием метода Монте-Карло.

В разделе 4.2 для задачи (4) построен вычислительный алгоритм для обыкновенного дробного по времени дифференциального уравнения, лежащего в основе модели зарядки полярных диэлектриков. Численное решение задачи Коши для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения найдено с помощью явного трехшагового метода Рунге – Кутты.

В общем виде задача (4) сводится к виду:

$$\frac{d^\alpha y(t)}{\partial t^\alpha} = f(t, y(t)), \quad t \in [t_0, T], \quad y(t_0) = y_0, \quad (22)$$

где  $y(t) \in C[t_0, T]$ ,  $f(t, y(t)) \in C[t_0, T] \times R$ .

Тогда для задачи Коши для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения (22) построим вычислительную схему на основе 3-шагового модифицированного метода Рунге – Кутты:

$$\begin{cases} K_1 = h^\alpha f(t_i, y_i), \\ K_2 = h^\alpha f(t_i + c_2 h, y_i + a_{21} K_1), \\ K_3 = h^\alpha f(t_i + c_3 h, y_i + a_{31} K_1 + a_{32} K_2), \\ y_{i+1} = y_i + w_1 K_1 + w_2 K_2 + w_3 K_3, \end{cases} \quad (23)$$

$$\text{где} \quad a_{11} = 0.5(\Gamma(\alpha+1))^{-1}, \quad a_{21} = \frac{\Gamma(\alpha+1)^2 \Gamma(2\alpha+1) + 2\Gamma(2\alpha+1) - \Gamma(3\alpha+1)}{4\Gamma(\alpha+1)(\Gamma(\alpha+1) - \Gamma(\alpha+1))},$$

$$a_{22} = -\frac{0.25\Gamma(2\alpha+1)}{2\Gamma(2\alpha+1)^2 - \Gamma(3\alpha+1)}, \quad c_2 = \left( \frac{0.5}{\Gamma(1+\alpha)} \right)^{1/\alpha}, \quad c_3 = \left( \frac{0.25}{\Gamma(1+\alpha)} \right)^{1/\alpha},$$

$$w_1 = \frac{8\Gamma(1+\alpha)^3 \Gamma(1+2\alpha)^2 - 6\Gamma(1+\alpha)^3 \Gamma(1+3\alpha) + \Gamma(1+2\alpha)\Gamma(1+3\alpha)}{\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1+2\alpha)\Gamma(1+3\alpha)},$$

$$w_2 = \frac{2\Gamma(1+\alpha)^2 (4\Gamma(1+2\alpha)^2 - \Gamma(1+3\alpha))}{\Gamma(1+2\alpha)\Gamma(1+3\alpha)}, \quad w_3 = -\frac{8\Gamma(1+\alpha)^2 (2\Gamma(1+2\alpha)^2 - \Gamma(1+3\alpha))}{\Gamma(1+2\alpha)\Gamma(1+3\alpha)},$$

$h$  – шаг по времени,  $i = \overline{0, N}$ ,  $t_i = t_0 + ih$ . Метод (23) абсолютно устойчив, если  $\left| 1 + \lambda h^\alpha / (\alpha!) + (\lambda h^\alpha)^2 / (2\alpha)! + (\lambda h^\alpha)^3 / (3\alpha)! \right| \leq 1$ ,  $\lambda$  – const перед  $y(t)$  функции  $f(t, y(t))$ .

Аналогичным образом строится вычислительная схема для задач из пункта 2.3.

В разделе 4.3 разработан вычислительный алгоритм для решения прикладной задачи оценки пироэлектрического отклика сегнетоэлектрического кристалла при интенсивном тепловом нагреве.

В условиях начально-граничной задачи (7) – (9) 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:

$$\frac{(\Delta \tau)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} T_i^{j-k+1} = \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}) + \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j), \quad (24)$$

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 4.4 с использованием аппроксимации производной Капуто построена неявная конечно-разностная схема для сферически-симметричного диффузионно-дрейфового уравнения (11) с производной дробного порядка по времени.

Введем в рассмотрение пространственно-временную сетку  $\Omega_h^\tau = \{r_i = ih, i = \overline{0, M}, \theta^j = j\tau, j = \overline{0, N}\}$ , где  $h$  – шаг по координате,  $\tau$  – шаг по времени. Для построения конечно-разностной аппроксимации уравнения, определяющего пространственно-временное распределение плотности зарядов, воспользуемся формулой

$$\frac{\partial^\alpha u(x_i, t^{j+1})}{\partial t^\alpha} = \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^j \tilde{\mu}_k^\alpha (u_i^{j+1-k} - u_i^{j-k}) + O(\Delta t^{2-\alpha}). \quad (25)$$

Здесь  $\Gamma$  – Гамма-функция,  $\tilde{\mu}_k^\alpha = (k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}$ ,  $k = \overline{0, M}$ .

Для аппроксимации дрейфового слагаемого использовалась формулу Роберта – Вейс-

$$\text{ca: } \frac{\partial \rho}{\partial r} \Big|_i^{j+1} = \frac{\rho_i^{j+1} - \rho_{i-1}^{j+1} + \rho_{i+1}^j - \rho_i^j}{2h} + O(h^2).$$

Тогда сконструированная неявная конечно-разностная схема приняла вид

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{D}{h^2} + \frac{D}{hr_i} - \frac{\mu_n E_i^j}{2h} \right) \rho_{i-1}^{j+1} + \left( \frac{\tau^{-\alpha} \tilde{\mu}_0}{t^* \Gamma(2-\alpha)} + \frac{2D}{h^2} - \frac{D}{hr_i} + \frac{\mu_n E_i^j}{2h} + \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho_i^j \right) \rho_i^{j+1} - \frac{D}{h^2} \rho_{i+1}^{j+1} = \\ & = \frac{\tau^{-\alpha}}{t^* \Gamma(2-\alpha)} \left( -\sum_{k=1}^j \tilde{\mu}_k (\rho_i^{j+1-k} - \rho_i^{j-k}) + \tilde{\mu}_0 \rho_i^j \right) + \left( \frac{D}{hr_i} - \frac{\mu_n E_i^j}{2h} \right) (\rho_{i+1}^j - \rho_i^j) + G_i, \end{aligned} \quad (26)$$

где  $i=1, \dots, M-1$ ,  $j=0, \dots, N-1$ .

Общий порядок аппроксимации вычислительной схемы (26) будет определяться порядками аппроксимаций производных по времени и координате, соответственно  $O(\tau^{2-\alpha} + h^2)$ . Из начального и граничного условий определим значения  $\rho_i^0 = \rho^0$  для  $i=0, \dots, M$  и  $\rho_M^{j+1} = 0$  для  $j=0, \dots, N-1$ . Для аппроксимации граничного условия II рода, включающего производную первого порядка, используем несимметричную конечно-разностную формулу:

$$\frac{-3\rho_0^{j+1} + 4\rho_1^{j+1} - \rho_2^{j+1}}{2h} = 0, \quad j=0, \dots, N-1. \quad (27)$$

Аналогично записываются уравнения, аппроксимирующие граничные условия для потенциала поля  $\varphi$ . На каждом временном слое происходит расчет распределения потенциала на основе решения краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения методом конечных разностей:

$$\left( 1 - \frac{h}{r_i} \right) \varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \left( 1 + \frac{h}{r_i} \right) \varphi_{i+1} = -\frac{h^2 \rho_i^j}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad \varphi_M = 0, \quad i=1, \dots, M-1, \quad j=0, \dots, N. \quad (28)$$

Напряженность электрического поля  $E$  вычислялась с использованием аппроксимации производной формулой центральной разности.

В разделе 4.5 предложены вычислительные алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов на внешнее воздействие электрического поля – гистерезисной зависимости поляризации от поля в субдиффузионных, супердиффузионных режимах и динамики движения доменной границы.

На основе конечно-разностной аппроксимацией дробной производной Капуто (25) для задачи (12) – (14) построены вычислительные схемы для уравнения аномальной диффузии при различных режимах.

Тогда для  $0 < \alpha < 1$  получим

$$\begin{aligned} & \frac{-1}{\Delta x^2} p_{i-1}^{j+1} + \left( \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \tilde{\mu}_0^\alpha + \frac{2}{\Delta x^2} - 1 - b(p_i^j)^2 + c(p_i^j)^4 \right) p_i^{j+1} - \frac{1}{\Delta x^2} p_{i+1}^{j+1} = \\ & = -\frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \left( \sum_{k=1}^j \tilde{\mu}_k^\alpha (p_i^{j+1-k} - p_i^{j-k}) - \tilde{\mu}_0^\alpha p_i^j \right) + \sigma e^{j+1}, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $i=1, \dots, M-1$ ,  $j=0, \dots, N-1$ .

Чтобы построить конечно-разностную схему для  $1 < \alpha < 2$ , была введена следующая замена  $\alpha = 1 + \beta$ ,  $\beta < 1$ .

Пусть  $U(x, t) = \frac{\partial p(x, t)}{\partial t}$ , тогда

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} = U, \\ \frac{\partial^\beta U}{\partial t^\beta} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + p + bp^3 - cp^5 + \sigma e. \end{cases}$$

Разностная схема представима в виде

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\Delta x^2} p_{i-1}^{j+1} + \left( \frac{\Delta t^{-1-\beta}}{\Gamma(2-\beta)} \eta_0^\beta + \frac{2}{\Delta x^2} - 1 - b(p_i^j)^2 + c(p_i^j)^4 \right) p_i^{j+1} - \frac{1}{\Delta x^2} p_{i+1}^{j+1} = \\ & = -\frac{\Delta t^{-\beta}}{\Gamma(2-\beta)} \left( \sum_{k=0}^{j-1} (\eta_k^\beta - \eta_{k+1}^\beta) U_i^{j-k} + \frac{\eta_0^\beta}{\Delta t} p_i^j + \eta_j^\beta U_i^0 \right) + \sigma e^{j+1}, \\ & U_i^{j+1} = \frac{p_i^{j+1} - p_i^j}{\Delta t}, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad j = \overline{0, M-1}. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь  $\eta_k^\beta$  – веса, аналогичные  $\tilde{\mu}_k^\alpha$ .

Решение уравнения (12) приводит к системе полулинейных уравнений на каждом временном слое. В этом случае разумно объединить конечно-разностные схемы (29), (30) с итерационной процедурой. Сформируем последовательность приближений  $\{p_i^{(s)}\}$ , сходящуюся к  $p_i^j$  для каждого момента времени  $t^j, j = \overline{1, N}$ , по формулам:  $(p_i^{(s)})^3 \approx (p_i^{(s-1)})^2 p_i^{(s)}$ ,  $(p_i^{(s)})^5 \approx (p_i^{(s-1)})^4 p_i^{(s)}$ , где  $s=1, 2, \dots$  – номер итерации. Исходя из значения предыдущего временного шага, итерационный алгоритм начинается с  $p_i^{(0)} = p_i^{j-1}$ . Таким образом, комбинируя метод конечных разностей с итерационной процедурой, можно сохранить порядок точности построенной вычислительной схемы.

Использование несимметричных формул конечных разностей второго порядка позволяет аппроксимировать граничные условия III рода

$$-\frac{-3p_0^j + 4p_1^j - p_2^j}{2\Delta x} + qp_0^j - g = 0, \quad \frac{3p_N^j - 4p_{N-1}^j + p_{N-2}^j}{2\Delta x} + qp_N^j - g = 0, \quad j = \overline{1, N}.$$

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 пятой главе** («Программы 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 5.1 содержится описание программного обеспечения решаемых научных задач (согласно стандартной спецификации требований), структуры и режимов работы комплекса программ. Программная реализации сконструированных алгоритмов проведена в ППП Matlab. 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 5.1 представлены результаты верификации работы вычислительных алгоритмов на основе сравнения данных программных и аналитических решений, полученных для тестовых задач.

Сравнение 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. Тем не менее, модифицированный трехшаговый метод Рунге – Кутты в случае производной Капуто является более высокоточным ( $O(h^{3\alpha})$ ), но условно устойчивым.

Проведено численное исследование сконструированной вычислительной схемы (29). 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 неявная схема, полученная на основе определения Грюнвальда – Летникова.

Проведен анализ практической сходимости схемы с использованием правила Рунге. Вычислена 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 меньшим, сходимость «ускоряется», затем отмечается некоторое ее замедление и на достаточно подробной сетке наблюдается тенденция к установлению скорости на единичном уровне (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 5.2 представлены серия вычислительных экспериментов и анализ результатов расчета (на основе дробно-дифференциального подхода) нестационарных характеристик полярного состояния сегнетоэлектриков.

В п. 5.2.1 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. 4 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. 4 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.

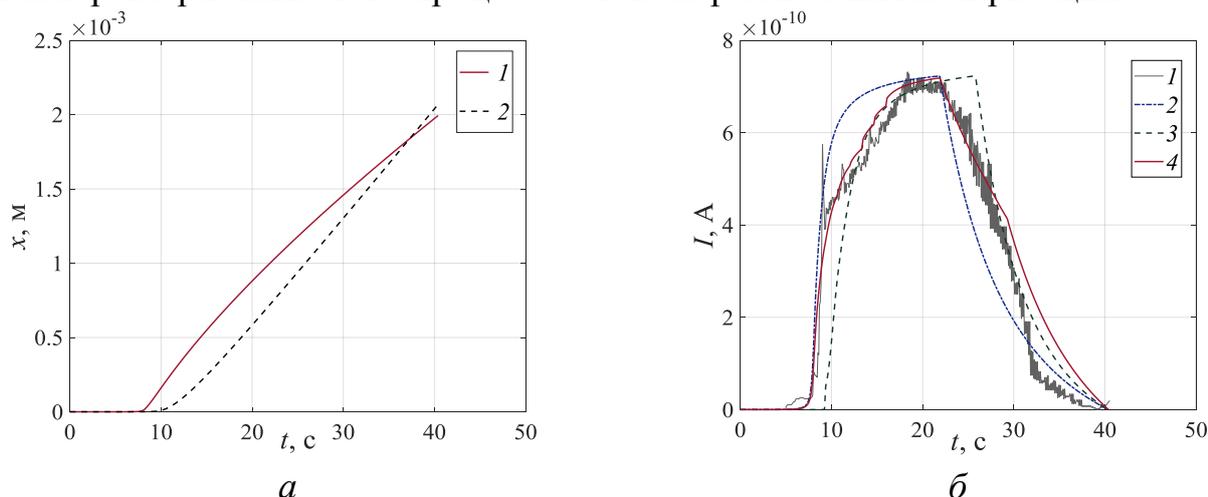


Рис. 4. Зависимость координаты от времени при движении доменной стенки: дробно-дифференциальной стохастической модели – 1, модели с целочисленной производной – 2 – а; результаты моделирования импульса тока переключения поляризации кристалла ТГС в сравнении с данными эксперимента – 1: дробно-дифференциальная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

В п. 5.2.2 показана зависимость плотности объемного заряда от времени – реализации модели в постановке (4). В качестве объекта исследования рассмотрен типичный сегнетоэлектрик –  $\text{LiNbO}_3$ . Здесь  $\varepsilon = 40$ ,  $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м,  $\rho_0 = 5.6 \cdot 10^6$  Кл/м<sup>3</sup>,  $\mu_n = 5.7 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/(В·с),  $t \in [0, 10^{-10}]$  с. Для удобства расчетов перейдем к нормализованным величинам  $\vartheta = \rho / \rho_0$ ,  $\tau = t / t_{\max}$ ,  $0 < \tau < 1$ .

Численное решение, полученное на основе реализации алгоритма (23) при различных значениях порядка дробной производной  $\alpha$ , приведено на рис. 4а. Сравнение приближенного решения с точным решением при  $\tau = 1$ ,  $h \approx 0.004$  и  $\alpha = 0.99$  представлено на рис. 4б.

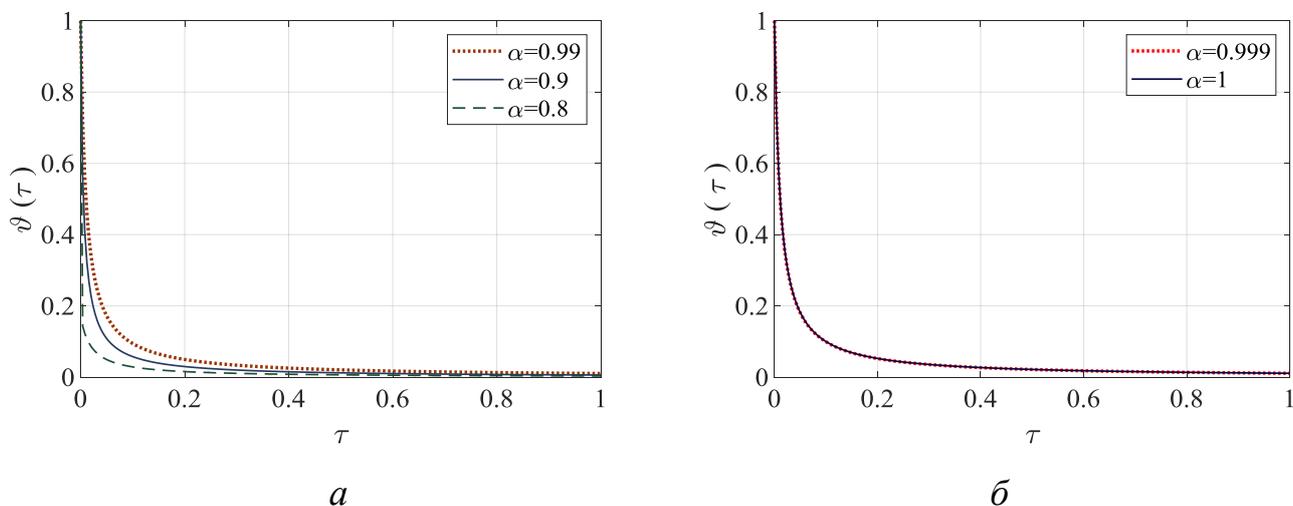


Рис. 5. Графическое представление  $\vartheta(\tau)$  при  $\alpha = 0.999$ ,  $\alpha = 0.9$ ,  $\alpha = 0.8$  – а, визуализация аналитического –  $\alpha = 1$  и численного решений задачи –  $\alpha = 0.999$  – б.

Уменьшение порядка  $\alpha$  приводит к более стремительному уменьшению искомой функции  $\vartheta(\tau)$ . Варьирование порядков дробных производных позволяет настраивать модель в соответствии с закономерностями, наблюдаемыми в экспериментах. Полученный результат может быть применен при моделировании процессов зарядки полярных диэлектриков в условиях электронного облучения.

В п. 5.2.3 приведены результаты реализации дробно-дифференциальной модификации обобщенной модели Ландау – Халатникова и модели на основе гиперболического тангенса для описания сегнетоэлектрического гистерезиса. С целью установить общие закономерности влияния порядка дробного дифференцирования на основные характеристики системы первый вычислительный эксперимент проведен для модельной задачи при следующих параметрах:  $\bar{a} = 0.05$ ,  $\bar{b} = 2.5$ ,  $\bar{c} = 30$ ,  $\bar{D} = 1$ ,  $\bar{E} = 20 \sin 5t$ ,  $\lambda = 0.01$ ,  $0 \leq t \leq 1.5$ ,  $0 \leq x \leq 1$ . Показано, что модель Ландау – Халатникова точнее описывает поведение сегнетоэлектрического гистерезиса.

В разделе 5.3 приведена серия вычислительных экспериментов нестационарных характеристик полярного состояния сегнетоэлектриков при внешнем воздействии (нагрев, облучение, электрическое поле) с последующей верификацией результатов.

В п. 5.3.1 представлены результаты моделирования пироотклика кристалла ТГС в окрестности температуры фазового перехода. Параметры модели установлены в соответствии 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 пирокоэффициента и теплоемкости использованы аппроксимации экспериментальных зависимостей. Рис. 4 а дает информацию о температурной динамике при реализации дробно-дифференциальной модели с различными значениями порядка дифференцирования.

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).

В п. 5.3.2 представлены результаты моделирования электронно-индуцированной зарядки сегнетоэлектриков (режим релаксации заряда). Параметры моделирования:  $\varepsilon = 30$ ,  $\mu_n = 74 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/(В·с),  $D = 1.915 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с,  $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м,  $L = 100 \cdot 10^{-6}$  м,  $T = 10^{-11}$  с,  $h = 0.2$  мкм,  $\tau = 0.02$  пс. На основе компьютерного моделирования транспорта электронов в облученной мишени методом Монте-Карло проведем аппроксимацию локальной области взаимодействия пучка электронов с образцом и введем начальное распределение плотности зарядов  $\rho^0(r) = \tilde{\rho}(1 - \nu) \exp\left(-\frac{(r - \omega_1)^2}{2\omega_2^2}\right)$ , где  $\nu$  – коэффициент вторичной электронной эмиссии электронов,  $\tilde{\rho}$ ,  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  – параметры аппроксимации.

Так как граница, для которой установлены краевые условия I рода, значительно удалена от градиентной зоны, при визуализации характеристик имеет смысл ограничивать диапазон изменения пространственной координаты.

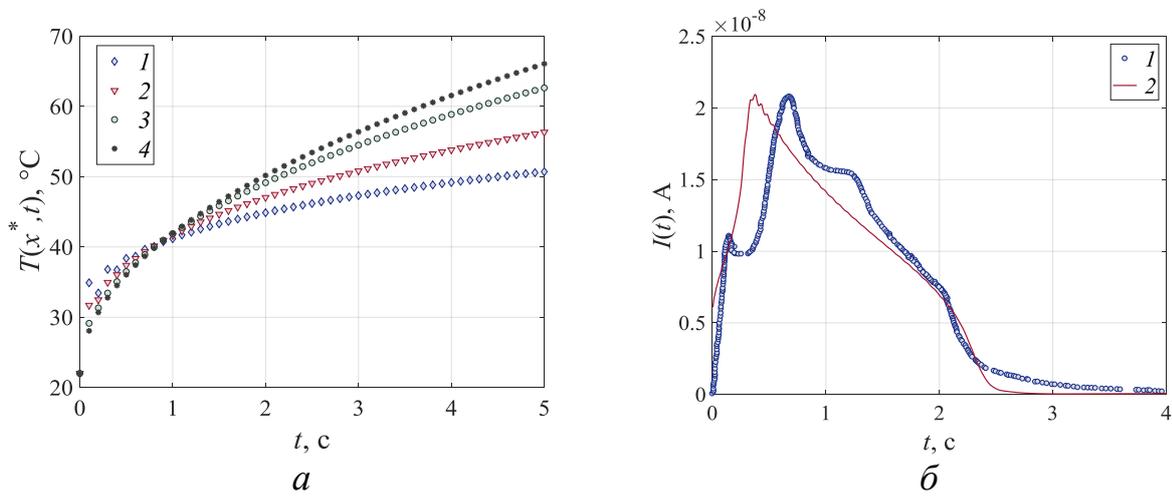


Рис. 4. Результаты моделирования: температурная динамика  $T(x^*, t)$  в точке действия источника  $x^*=0$  (1 –  $\gamma_1=0.5$ , 2 –  $\gamma_2=0.7$ , 3 –  $\gamma_3=0.9$ , 4 –  $\gamma_4=1$ ) – а; пироотклик кристалла ТГС – 2 в сравнении с данными эксперимента – 1 – б.

Инициализируя набор параметров для симуляции методом Монте-Карло – стартовая энергия пучка 25 кэВ при поверхностной плотности зарядов  $10 \text{ Кл/м}^2$ , получим, что коэффициент вторичной электронной эмиссии и параметры аппроксимации соответствуют значениям:  $\nu = 0.244$ ,  $\tilde{\rho} = 2.09 \cdot 10^6 \text{ Кл/м}^3$ ,  $\omega_1 = 0.76 \text{ мкм}$ ,  $\omega_2 = 0.75 \text{ мкм}$ .

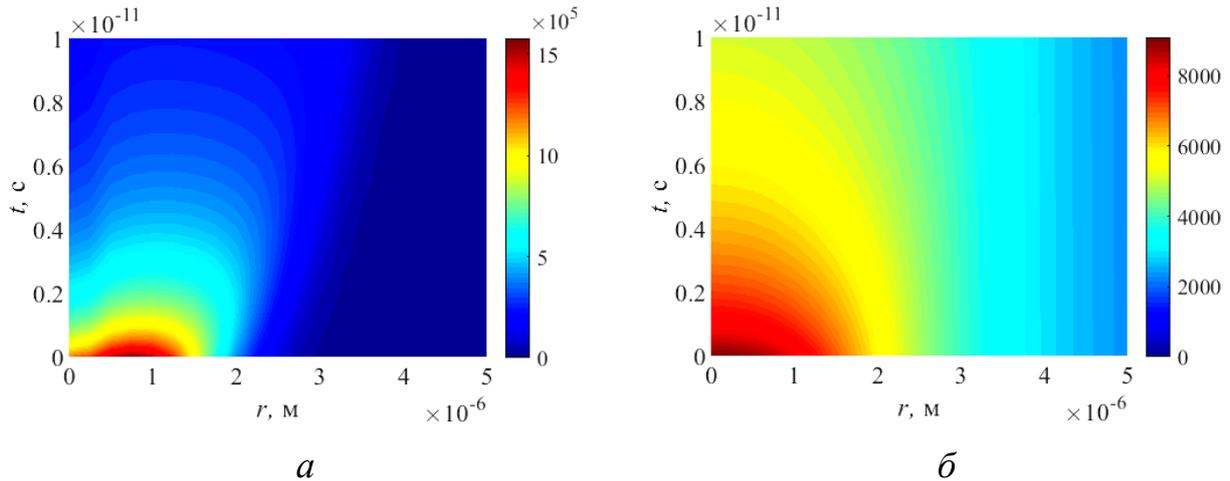


Рис. 5. Пространственно-временные распределения абсолютных величин, характеризующих процесс релаксации электронно-стимулированного заряда в кристалле ниобата лития: плотность заряда  $\rho(r, t)$  в  $\text{Кл/м}^3$  – а, потенциал  $\phi(r, t)$  в В – б.

Можно видеть (рис. 5), на границе зоны инжекции ( $\sim 2 \text{ мкм}$ ), что поле существенно превышает значение коэрцитивного для ниобата лития  $E_c \sim 10^6 \text{ В/м}$ .

На рис. 6а отображены координатные профили изменения абсолютной величины напряженности при значении  $\alpha=0.99$ .

Кроме того, существенный интерес представляет прогнозирование времени релаксации заряда в конкретных условиях зарядки. Дробно-дифференциальная модификация математической модели зарядки в нашем случае учитывает эффект «динамической памяти» системы. Поэтому важен модельный расчет пространственно-временного распределения объемной плотности зарядов при вариации динамической дробной размерности процесса, за которую отвечает порядок дробного дифференцирования по времени. Серия

расчетов, проведенных для различных значений  $\alpha$ , свидетельствует, что в субдиффузионных режимах уменьшение порядка дробной производной по времени соответствует снижению времени релаксации индуцированного в полярном диэлектрике заряда. Так, приближенная оценка времени релаксации для классического режима составляет 10 пс, в то время как для  $\alpha=0.95$  это 2.5 пс, а для  $\alpha=0.9$  – 1 пс.

Более детально эффект «памяти», выраженный в данном случае снижением максимального уровня объемной плотности зарядов в процессе релаксации, при варьировании динамических режимов иллюстрируется рис. 6б. Использование аппарата дробного дифференцирования по времени позволяет модифицировать дифференциальную модель процесса зарядки с учетом эффектов памяти, сопровождающих динамические процессы, протекающие в сегнетоэлектриках. В этом случае динамическая память физической системы определяет скорость релаксационных процессов, а порядок дробного дифференцирования по времени выступает дополнительным управляющим параметром математической модели, что дает возможность выбирать адекватные формализованные представления и прогнозировать электрические характеристики полярного диэлектрика.

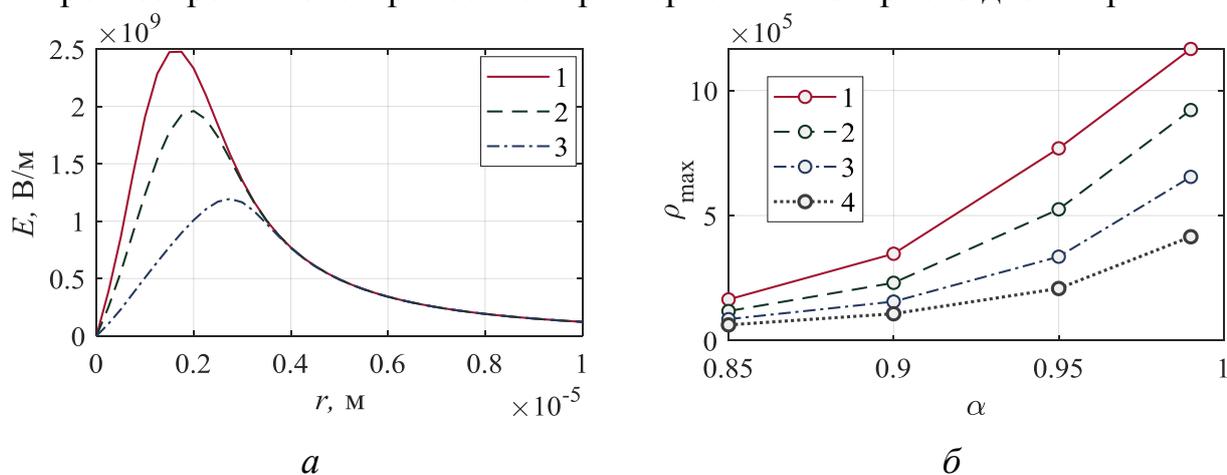


Рис. 6. Координатные профили изменения абсолютной величины индуцированного поля  $E$ , В/м в  $t_0$  – (1),  $t_1=0.1$  пс – (2),  $t_2=0.5$  пс – (3) – а; максимальные значения абсолютной величины объемной плотности зарядов  $\rho_{\max}$  (Кл/м<sup>3</sup>) для различных  $\alpha$  во время  $t$ : 0.625 пс (1), 1.25 пс (2), 2.5 пс (3) и 5 пс (4) – б.

В п. 5.3.3 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). Результаты моделирования сравнены 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. Приведено сравнение результатов моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса в различных динамических режимах.

Результаты моделирования представим для нормированного случая. В качестве вход-

ных параметров выберем значения, характерные для тонких пленок титана бария:  $b = 4.0544$ ,  $c = 5.1946$ ,  $q = 0.3314$ ,  $p_0 = 0$ ,  $\tilde{p}_0 = 0$ . На рис. 7 показаны результаты моделирования зависимостей поляризации от поля  $p(e)$  при различных значениях порядка дробной производной по времени  $\alpha$  при фиксированном значении толщины пленки  $l=1.37$ .

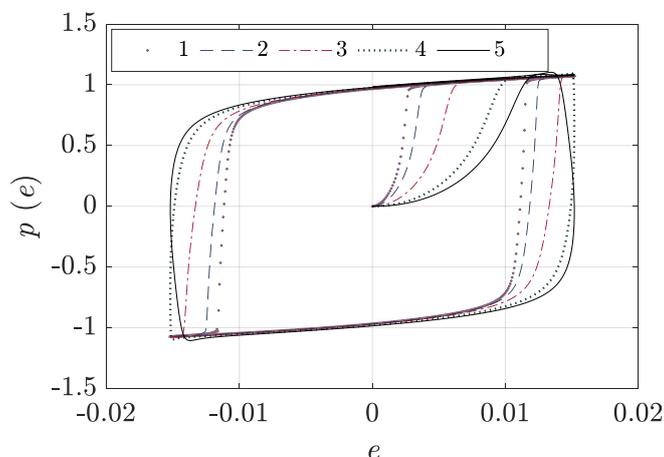


Рис. 7. Результаты моделирования петель сегнетоэлектрического гистерезиса: при  $\alpha=1 - 0.85$ ,  $\alpha = 0.9 - 2$ ,  $\alpha = 1 - 3$ ,  $\alpha = 1.1 - 4$ ,  $\alpha = 1.15 - 5$  для  $l=1.37$ .

В случае целого порядка производной ( $\alpha=1$ ) вычислительная схема строилась на основе классической неявной схемы для уравнения параболического типа. Для дифференциального уравнения с целой производной также применялась итерационная процедура. Можно отметить, что увеличение порядка дробной производной ведет к расширению петли, а при  $\alpha \geq 1.3$  петля гистерезиса теряет свою традиционную форму.

В разделе 5.3.4 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. 8 а показана динамика доменной границы при переключении поляризации, на рис. 8 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 реполяризации (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.

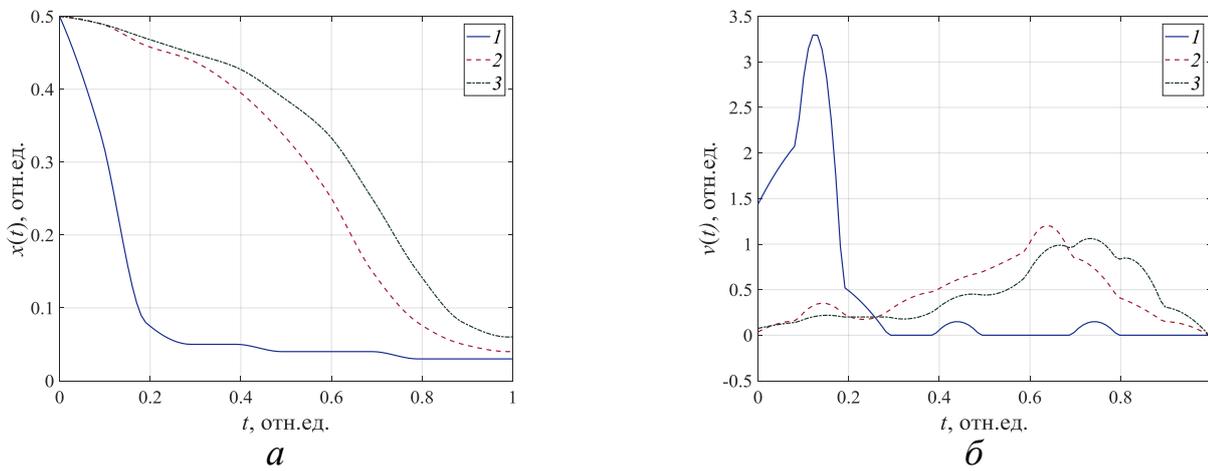


Рис. 8. Характеристики динамики доменной границы: координаты –  $a$  и скорости –  $b$  при варьировании порядка дробной производной 1 –  $\alpha=0.99$ , 2 –  $\alpha=0.85$ , 3 –  $\alpha=0.7$ .

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы. В ходе исследований решена актуальная научная задача – разработка 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, облучении электронными пучками средних энергий. 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, а также комплекс программ, проведены расчеты, анализ и интерпретация результатов моделирования.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Приведен ряд дробно-дифференциальных математических моделей, позволяющих воспроизводить динамические процессы, наблюдаемые в сегнетоэлектрических материалах в условиях внешнего воздействия: инжекции электронов, нагрева, приложенного поля, облучении электронными пучками средних энергий.

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. Построена дробно-дифференциальная модификация математической модели процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков.

6. Сконструированы вычислительные схемы для реализации модели инжекционного отклика, модели Ландау – Халатникова и простейшей модели зарядки в постановке начальной задачи для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения. В качестве определений использовались формулы Грюнвальда – Летникова, Капуто в концепции

предиктор-корректорных схем и метода Рунге – Кутты.

7. Сформулирован вычислительный алгоритм для решения прикладной задачи об оценке пироотклика сегнетоэлектрика при интенсивном тепловом нагреве. В основе алгоритма – процедура численного решения уравнения теплопроводности с дробной производной по времени с использованием формулы Грюнвальда – Летникова и концепции схемы Кранка – Николсон.

8. 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.

9. Для решения полулинейного уравнения аномальной диффузии построены две вычислительные схемы на основе определения Капуто для режима суб- и супердиффузии. Особенностью введенных схем является также комбинация метода конечных разностей и итерационных процедур.

10. 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.

11. 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 ( $\alpha=0.99$ ).

12. Представлена серия вычислительных экспериментов по исследованию закономерностей, характеризующих динамические отклики типичных сегнетоэлектриков в условиях электронного облучения, нагрева, переключения поляризации, электронного облучения. Концепция дробного дифференцирования позволяет изменять порядок производной, что невозможно при целочисленной дифференциации. Такая вариация может привести к моделям, которые более точно отражают экспериментальные наблюдения. Используя порядок дробной производной в качестве управляющего параметра, возможно настроить динамическую модель в соответствии с экспериментальными данными. Такая возможность настройки является весомым преимуществом по сравнению с моделями, использующими целочисленные производные, которые невозможно настроить таким же образом. Подводя итог, следует сказать, что использование дробной производной в моделировании может привести к более гибким и точным моделям, особенно для систем с эффектами памяти – таких, как сегнетоэлектрики. Подобный подход может расширить границы численного моделирования при изучении сложных физических систем.

*Автор выражает благодарность профессору Университета Иннополис, доктору физико-математических наук, профессору Анне Геннадьевне Масловской за поддержку и замечания по исследовательской работе.*

## СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Монография

Мороз Л.И., Масловская А.Г. Дробно-дифференциальные модели динамических откликов сегнетоэлектриков. – М.: Наука, 2022. – 159 с. – ISBN 978-5-02-040959-0

### Статьи в журналах, рекомендованных ВАК, и приравненных к ним

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. (ВАК, К3)

2. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Гибридный фрактально-стохастический подход к моделированию кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции // Математическое 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. (ВАК, К1)

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. (ВАК, К1)

4. 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). (WOS, Q1, ВАК, К1)

5. Moroz L.I. Time-fractional numerical modeling applied to diffusion-wave processes of bacterial biomass growth // Far Eastern Mathematical Journal. – 2022. – Т. 22. – № 2. – С. 207–212. (ВАК, К1)

6. Maslovskaya A., Moroz L. Time-fractional Landau-Khalatnikov model applied to numerical simulation of polarization switching in ferroelectrics // Nonlinear Dynamics. – 2023. – V. 111(5). – P. 4543–4557. (WOS, Q1, ВАК, К1)

7. Moroz L.I., Maslovskaya A.G. A Fractional-differential approach to numerical simulation of electron-induced charging of ferroelectrics // Journal of Applied and Industrial Mathematics. – 2024. – V. 18(1). – P. 137–149. (SCOPUS, Q2, ВАК, К1)

8. Мороз Л.И. Алгоритм для численного решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с дробной производной по времени и координате // Моделирование и анализ данных. – 2024. – № 3(14). – С. 105–117. (ВАК, К3)

### Статьи в зарубежных изданиях, цитируемых системами Web of Science и Scopus

9. 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).

10. 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.

11. 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. – Mu-

nich, 2020. – P. 180–191.

12. 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.

13. 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).

14. Kuttler C., Moroz L.I., Maslovskaya A.G. Numerical simulation of time-fractional diffusion-wave processes applied to communication in bacterial populations // Proceedings of the International Conference Days on Diffraction 2021, DD 2021. 2021. C. 114–119.

15. Maslovskaya A.G., Moroz L.I. Computational techniques for time-fractional modeling of thermal wave propagation in ferroelectrics // Proceedings of the International Conference Days on Diffraction, DD 2022. – 2022. – P. 95–100.

16. Moroz L.I., Veselova E.M., Maslovskaya A.G. Simulation of thickness-dependent polarization switching in ferroelectric thin films using COMSOL Multiphysics // Smart Innovation, Systems and Technologies, 2022. – V. 272. – P. 49–57.

17. Moroz L., Maslovskaya A. Time-fractional approach for numerical simulation of temperature-dependent hysteresis in ferroelectrics // Proc. of 2023 Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems, AMCSM 2023. – 2023. – P. 1–6.

18. Moroz L., Maslovskaya A. Numerical modeling of diffusion-wave polarization processes in ferroelectrics based on the time-fractional Landau-Khalatnikov equation // Proceedings of the International Conference Days on Diffraction, DD 2023. – V. 2023. – P. 150–155.

19. Moroz L.I., Barabash T.K., Maslovskaya A.G. Numerical simulation of polarization switching kinetics in ferroelectrics based on fractional Kolmogorov-Avrami model // Journal of Physics: Conference Series. – 2023. – V. 2514(1). – P. 012016 (9).

20. Maslovskaya A., Moroz L. Fractional diffusion-wave modification of Landau-Khalatnikov model applied to polarization switching in ferroelectric nanowires // Proc. of the IEEE, Days on Diffraction. – 2024. – P. 1–6.

### **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 № 2021611887 «Программа расчёта характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции дробно-дифференциального термодинамического подхода», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 19.02.2021, г. Москва.

4. 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.

5. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Свидетельство о государственной регистрации про-

граммы для ЭВМ № 2022613217 «Программа моделирования диффузионно-волновых процессов на основе дробно-дифференциального подхода», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 11.03.2022, г. Москва.

6. Мороз Л.И., Перепелкин А.И., Мороз Е.М. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023682810 «Программа моделирования популяционной динамики на основе дробно-дифференциального подхода», зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 31.10.2023, г. Москва.

***Адрес учредителя:***

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21

***Адрес редакции и издателя:***

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21

**Мороз Любовь Игоревна,**

ведущий научный сотрудник лаборатории математического моделирования сложных физических и биологических систем ФГБОУ ВО «АмГУ», канд. физ.-мат. наук

**Moroz Lubov Igorevna,**

Leading Researcher, Laboratory of Mathematical Modeling of Complex Physical and Biological Systems, Amur State University, Ph.D. in Physics and Mathematics

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования  
Российской Федерации (проект № 122082400001-8).*

**Системы моделирования динамических откликов функциональных диэлектриков: дробно-дифференциальная концепция. Препринт.**

---

Изд-во АмГУ. Подписано к печати 16.12.2024. Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 1,87. Тираж 50. Заказ 288. Бесплатно.

Email: [master@amursu.ru](mailto:master@amursu.ru)

Сайт: [www.amursu.ru](http://www.amursu.ru)