

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**

Специальность: 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д-р физ.-мат. наук, доцент
Масловская
Анна Геннадьевна

Благовещенск – 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1 Дробно-дифференциальные модели динамических систем: основные теоретические концепции, методы численной реализации и приложения к исследованию физических процессов и явлений.....	17
1.1 Базовые положения теории дробно-дифференциальных уравнений...	19
1.1.1 Определения дробной производной.....	21
1.1.2 Обзор численных методов решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка.....	26
1.1.3 Ключевые аспекты применения численных методов для решения эволюционных дробно-дифференциальных задач математической физики.....	32
1.2 Математическое моделирование динамики фрактальных физических систем: применение аппарата дробно- дифференциального исчисления.....	38
1.2.1 Фрактальность физических объектов и дробно-дифференциальный подход.....	38
1.2.2 Примеры математических моделей, формализуемых с помощью дифференциальных уравнений дробного порядка.....	44
1.2.3 Сегнетоэлектрические материалы и фрактально- синергетический подход в задачах исследования их структуры и свойств.....	48
1.2.4 Дробно-дифференциальные модели динамических откликов и эрeditарность в сегнетоэлектриках.....	60
1.3 Основные выводы.....	65
2 Дробно-дифференциальные модели формирования нестационарных поляризационных откликов сегнетоэлектриков.....	69
2.1 Гибридная фрактально-стохастическая модель кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инжекции.....	70
2.1.1 Концептуальная постановка задачи моделирования	

электронно-индуцированного процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков.....	72
2.1.2 Математическая формализация механизмов перестройки доменной структуры и формирования поляризационного отклика сегнетоэлектрика.....	74
2.2 Эредитарные модели формирования динамических откликов сегнетоэлектриков на тепловые воздействия.....	78
2.3 Дробно-дифференциальные модели характеристик динамики изменения полярного состояния сегнетоэлектрика.....	85
2.3.1 Модели поляризационных характеристик сегнетоэлектриков в рамках теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова.....	85
2.3.2 Эредитарные модификации термодинамических моделей поляризационного гистерезиса и дробно-дифференциальная модель кинетики доменной границы сегнетоэлектрика.....	91
2.3.3 Обобщенное описание формирования динамических откликов сегнетоэлектриков в концепции модели аномальной диффузии.....	96
2.4 Основные результаты и выводы.....	100
3 Вычислительные схемы и алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей эволюционных процессов в сегнетоэлектриках.....	103
3.1 Вычислительная схема решения начальной задачи для дробно-дифференциального уравнения модели формирования поляризационного тока.....	104
3.2 Вычислительные схемы для реализации эредитарных моделей динамических откликов сегнетоэлектриков на тепловые воздействия.....	110
3.3 Вычислительные алгоритмы для реализации дробно-дифференциальной модели сегнетоэлектрического гистерезиса и динамики доменной границы.....	115
3.4 Основные результаты и выводы.....	124
4 Комплекс программ моделирования динамических откликов	

сегнетоэлектрических материалов и вычислительные эксперименты.....	127
4.1 Описание, назначение и структура программного комплекса.....	128
4.2 Верификация программных решений с использованием тестовых задач.....	133
4.2.1 Проверка адекватности работы вычислительных алгоритмов решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка.....	134
4.2.2 Проверка адекватности работы вычислительных алгоритмов моделирования процесса аномальной диффузии.....	136
4.3 Вычислительные эксперименты и анализ результатов расчета нестационарных характеристик полярного состояния сегнетоэлектриков.....	140
4.3.1 Компьютерное моделирование тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в инжекционном режиме.....	141
4.3.2 Компьютерное моделирование формирования пироотклика сегнетоэлектрика в режиме интенсивного нагрева.....	144
4.3.3 Компьютерное моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории.....	149
4.3.4 Реализация дробно-дифференциальной модели сегнетоэлектрического гистерезиса.....	153
4.3.5 Реализация модели движения доменной границы в процессе переключения поляризации.....	161
4.4 Основные результаты и выводы.....	165
Заключение.....	168
Список литературы.....	171
Приложение А Копии свидетельств об официальных регистрациях программ для ЭВМ.....	202

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность 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 современных 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 математический аппарат дробно-дифференциальных уравнений используется для математического моделирования динамических откликов сложно-структурированных физических сред, возникающих в неравновесных внешних условиях. Такие процессы также относят к неклассическим, или аномальным. При построении дробно-дифференциальных математических моделей для формализации эффектов памяти в физической системе 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 объемного строения и топографии поверхности, а также обнаруживающие фрактальные закономерности динамических характеристик. В частности особый класс перспективных и 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. Сегнетоэлектрические материалы демонстрируют сложный скейлинг доменных конфигураций, самоподобие процессов зародышеобразования и эффекты памяти в процессе переключения поляризации, фрактальные закономерности при регистрации динамических откликов кристаллов. Фрактальные свойства доменных структур, диэлектрических откликов и характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков диагностированы рядом независимых исследователей (Т. Ozaki, J.F. Scott, В.Я. Шур, Y-R. Jeng, D.B. Li, К. Uchino, В. Tadic, M.K. 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 – Авраами) и В. Ducharme, В. Zhang, Z. Bin (модель диэлектрического гистерезиса), на основе численного решения обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка Т.К. Барабаш и А.Г. Масловской (модель тока переключения поляризации).

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, основан-

ных на аппроксимациях производных дробного порядка, в частности конструирование вычислительных схем на основе конечно-разностного подхода. Специфика построения конечно-разностных схем для дробно-дифференциальных задач заключается в получении удовлетворительного порядка аппроксимации и снижении вычислительных затрат на достаточно ресурсоемкие вычисления. Поэтому в данном аспекте особенно важным является построение и реализация эффективных вычислительных схем повышенного порядка точности. 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 диссертационного исследования и формирует круг вопросов, которые требуют отдельного рассмотрения.

Основная гипотеза исследования заключается в том, что использование дробно-дифференциальной концепции, представляющей, в некотором смысле, обобщение целочисленных аналогов, значительно расширяет спектр функциональных возможностей методологии численного моделирования и предоставляет «гибкий инструмент» для прогнозирования поведения фрактальных физических систем.

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.

С этой целью был сформулирован и решен ряд научных задач.

1. Математическая формализация дробно-дифференциальных моделей нелинейных динамических систем, 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 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 постановке начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными).

3. Формализация 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.

Методы и средства решения научных задач.

Для решения поставленных задач диссертационного исследования 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 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 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.

Полученные результаты можно рассматривать как вклад в развитие фундаментальных представлений, методов и средств математического моделирования поведения сложных физических систем.

Предлагаемый дробно-дифференциальный подход представляет собой генерализацию используемых классических дифференциальных моделей для описания динамики изменения полярного состояния сегнетоэлектрика, включая последние в качестве частных случаев. Вариация порядков дробного дифференцирования предоставляет исследователю дополнительный гибкий и чувствительный инструмент математической «настройки» моделируемых характеристик в соответствии с закономерностями, наблюдаемыми в практике физического эксперимента.

Решение поставленных задач имеет важное значение для развития системно-комплексного подхода в задачах математического моделирования рассматриваемых физических систем и включает полный цикл вычислительного эксперимента: анализ предметной области, формализация математических моделей, конструирование вычислительных схем и алгоритмов, программирование и анализ результатов модельных экспериментов.

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 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).

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. Для проверки адекватности результатов моделирования осуществлялось сравнение модельных расчетов с экспериментальными данными.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены на следующих научных мероприятиях: VI, VIII Международных научных конференциях «Математическое и компьютерное моделирование (Омск, 2018, 2020); VIII Международной молодежной научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем» (Уфа, 2018); 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); International multi-conference on industrial engineering and modern technologies (Vladivostok, 2020); 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); научно-методических семинарах кафедры «Математический анализ и моделирование» Амурского государственного университета (2019-2021 гг.); научном семинаре Института прикладной математики ДВО РАН (Владивосток, 2021).

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 диссертационной работы 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 потоков энергии на функциональные материалы» (№ гос. рег. НИР АААА-А16-116033010062-3) в 2018-2020 гг.; проект «Математические и компьютерные модели для анализа и прогнозирования процессов воздействия электронного облучения на полярные диэлектрические материалы», поддержанный грантом АмГУ в 2018-2019 гг.; проект 20-31-90075 «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов фрактальных физических систем», получивший поддержку РФФИ по результатам конкурсного отбора научных проектов, выполняемых молодыми учеными, обучающимися в аспирантуре, в 2020-2022 гг.

Публикации и личный вклад автора. По материалам диссертации опубликовано 20 работ, в том числе три статьи в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ (переводные версии двух статей опубликованы 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 WOS, Scopus); две статьи – в 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 [1] автору принадлежат алгоритм и прикладная программа решения дробно-дифференциальной задачи, адаптированной к реализации математической модели финансовой системы. В совместной работе [2] авторский вклад заклю-

чается в численной реализации и проведении вычислительных экспериментов для базовой термодинамической модели процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков. Все остальные работы опубликованы в соавторстве с научным руководителем, при определяющем вкладе соискателя в представленные результаты.

Соответствие паспорту специальности. Научные результаты, полученные в рамках диссертации, соответствуют трем пунктам паспорта специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (1.2.2).

П. 4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента – в части

– разработки и компьютерной реализации гибридной вычислительной схемы для математической модели электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков, основанной на стохастическом алгоритме симуляции процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры и численном решении начальной задачи для дробно-дифференциального уравнения;

– разработки вычислительных алгоритмов моделирования процесса аномальной диффузии для фрактальных сред с памятью на основе комбинированных конечно-разностных итерационных схем в приложениях к задачам интенсивного температурного нагрева и переключения поляризации сегнетоэлектриков.

П. 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента – в части

– генерализации на основе дробно-дифференциального подхода математических моделей и разработке вычислительных средств, используемых для описания механизмов формирования поляризационных откликов сегнетоэлектрических материалов на внешние воздействия;

– прогнозирования поведения характеристик сегнетоэлектриков в неравновесных внешних условиях на основе данных вычислительных экспериментов.

П. 8. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования – в части разработки системы компьютерного моделирования формирования нестационарных откликов сложных физических систем с памятью, формализуемых в виде задач Коши для дробно-дифференциальных уравнений и начально-граничных задач для полулинейных дробно-дифференциальных уравнений с частными производными (интерфейсы прикладных программ ориентированы на следующие примеры моделей: формирование тока переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции, формирование пироэлектрического тока в условиях интенсивного нагрева сегнетоэлектрика, гистерезисная зависимость поляризации от приложенного поля и динамики движения доменной стенки сегнетоэлектрика).

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и 1 приложения. Рукопись диссертации содержит 204 страницы основного текста, 36 рисунков, 3 таблицы; список литературы из 297 наименований.

Первая глава 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.

Оригинальная часть исследований представлена в главах 2-4 диссертации, которые структурно и функционально соответствуют этапам реализации полного цикла вычислительного эксперимента. Вторая глава включает физико-математические постановки задач математического моделирования нестационарных откликов в сегнетоэлектриках на основе дробно-дифференциального подхода, третья глава содержит сконструированные вычислительные схемы и

алгоритмы реализации введенных моделей, четвертая – посвящена описанию разработанного комплекса программ и анализу результатов вычислительных экспериментов.

В приложении представлены копии свидетельств об официальных регистрациях программ для ЭВМ.

1. ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ: ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ КОНЦЕПЦИИ, МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ИССЛЕДОВАНИЮ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ

В настоящее время при исследовании реальных процессов и явлений методами математического моделирования использование строго детерминированного подхода связано с существенными ограничениями. Во многих случаях рассматриваемые физические системы обладают свойствами фрактальности, обусловленными сложным геометрическим строением поверхностей, неоднородностью динамических характеристик, наличием эффектов эрeditarности и наследственности.

Теория фракталов нашла применение при описании геометрических свойств сложных объектов, при анализе и прогнозировании поведения сложных динамических систем. Одно из основных направлений использования концепций фрактального формализма – апостериорный анализ размерности физических объектов. Явление самоподобия и сложный скейлинг рассматривают на геометрическом уровне, выдвигая на первый план фрактальность строения и топографии поверхностей самих объектов (шероховатость, неоднородность, изрезанность, нерегулярность, структуры самоорганизации, повторяемость в различных масштабах и т.п.). В ряде случаев актуальными являются и фрактальные свойства динамических характеристик процессов. Математический инструментарий в подобных исследованиях представлен методами фрактального и мультифрактального анализа изображений и временных рядов (методы покрытий, мультифрактальной параметризации, Фурье- и вейвлет-анализ, метод Херста, флуктуационный анализ и др.)

Кроме того, в различных предметных областях активно разрабатываются математические модели, позволяющие визуализировать фрактальные структуры, а также прогнозировать поведение динамических характеристик самоподобных физических систем. Одна из аналитических возможностей,

предоставляемых фрактальной теорией – использование концепций дробно-дифференциального исчисления, в частности аппарата дробно-дифференциальных уравнений, для моделирования протекающих процессов. Теория дробно-дифференциального исчисления как самостоятельное научное направление развивалась на протяжении длительного времени. Поэтому в настоящее время существует альтернативная точка зрения, разделяющая понятия «фрактальный» (fractal) и «дробный» (fractional).

С целью акцентирования сложного скейлинга и неоднородности среды в математическую постановку задачи вводят дробные производные по координатам, а для математической формализации процессов в системах с памятью используют дробную производную по времени.

Поскольку аналитические решения дробно-дифференциальных задач можно найти только в весьма ограниченном ряде случаев, особое место в практике математического моделирования занимают численные методы. Именно приближенные методы составляют методическую основу реализации дробно-дифференциальных моделей физических систем.

В рамках настоящего исследования приложение результатов моделирования и прогнозирования фазового состояния динамических фрактальных физических систем с памятью ориентировано на описание характеристик процесса изменения полярного состояния особого класса диэлектрических материалов – сегнетоэлектриков, проявляющих свойства самоподобия, сложного скейлинга и эрдитарности.

В связи с вышеизложенным в настоящей главе представлен литературный обзор, включающий основные вопросы использования различных определений дробной производной для численного решения дробно-дифференциальных задач и применение указанного подхода для математического моделирования поведения сложных физических систем, в том числе характеристик сегнетоэлектрических материалов.

1.1. Базовые положения теории дробно-дифференциальных уравнений

Математический аппарат, связанный с использованием производных и интегралов нецелых порядков, имеет более чем трехвековую историю. По-другому нецелочисленные интегро-дифференциальные операторы называют дробными, хотя они могут иметь действительный или комплексный порядок и, следовательно, также включать целые значения. Первое упоминание о производных дробного порядка встречается в переписке Г. Лейбница и Я. Бернулли. В письмах Г. Лейбница к Г. Лопиталю (1695 г.) и Дж. Уоллису (1697 г.) ставился вопрос о существовании производной порядка $\frac{1}{2}$. В своих трудах Л. Эйлер (1738 г.) также заметил, что нецелой производной от степенной функции можно придать смысл. Первая попытка дать определение дробной производной принадлежит Ж. Фурье (1822 г.) [3- 5].

Начиная с XIX века, идет активное накопление результатов и формирование дробного интегро-дифференциального исчисления как самостоятельного раздела математического анализа. Так, в 1832-1837 гг. появляется серия работ Ж. Лиувилля, в которых он выводит определение нецелой производной, основанное на дифференцировании представимой в виде ряда показательной функции. Он же предложил определять нецелую производную через предел разностного отношения. Эта идея нашла продолжение в исследованиях А.В. Летникова. В 1847 г. Б. Риман пришел к следующей конструкции дробного интегрирования:

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{\varphi(\tau) d\tau}{(\tau-t)^{1-\alpha}}, \quad t > 0,$$

которая вместе с конструкцией Ж. Лиувилля служит одной из основных форм дробного исчисления. Немаловажным вкладом в решение проблемы оказались изыскания Х. Хельмгрена: он выдвинул идею о том, что дробное дифференцирование можно рассматривать как операцию, обратную дробному интегрированию, дал строгий вывод формулы Г. Лейбница для дробной

производной от произведения двух функций, вывел понятие дробного интегрирования одной функции по другой, развил идею применения дробных интегралов к обыкновенным дифференциальным уравнениям и др.

А. Грюнвальд (1867 г.) и А.В. Летников (1868 г.) развивают идею Б. Римана о распространении формулы $f^{(n)}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\Delta_h^n f)(x)}{h^n}$ на случай нецелых n . А.В. Летников в своих работах вывел строгое и обстоятельное построение теории дробного дифференцирования, дал развернутое изложение применения дробного интегро-дифференцирования к решению дифференциальных уравнений [3, 4].

Следующим этапом развития дробного исчисления можно назвать появление формулы Коши для аналитических функций в комплексной плоскости. Дальнейшее развитие данной идеи связывают с трудами Н.Я. Солина.

В конце XIX века выходит работа Ж. Адамара, в которой предлагается искать производную нецелого порядка от аналитической функции через почленное дифференцирование ее ряда Тейлора. Г. Харди и М. Рисс (1915 г.) используют дробное интегрирование при суммировании расходящихся рядов. А в 1917 г. Г. Вейль предлагает новое определение дробного интеграла для периодических функций. А. Маршо (1927 г.) ввел новую форму дробного интегрирования от конечных разностей. В 1940 г. появляются работы А. Эрдейна, Х. Кобера, в которых выводится модификация дробного интегро-дифференцирования. Их формулы нашли применение в интегральных операторах и интегральных уравнениях. В 1967 г. итальянским механиком М. Капуто было введено новое определение дробной производной. В рамках диссертационной работы не представляется возможным осветить все открытия в области дробного исчисления, но достаточно полные обзоры можно найти в работах [3-6].

В настоящее время аппарат дробного интегрирования и дифференцирования продолжает активно развиваться как в теоретическом

направлении, так и в области практического применения. Появляются новые модификации определений производных, интегралов нецелого порядка и их свойств, расширяется сфера применения данного аппарата.

Дробное исчисление является обобщением операций интегрирования и дифференцирования на операторы нецелого порядка. Пусть a и t – границы операций, порядок $\alpha \in R$, тогда непрерывный интегро-дифференциальный оператор может быть определен как [7]:

$${}_a D_t^\alpha = \begin{cases} \frac{d^\alpha}{dt^\alpha}, & \alpha > 0, \\ 1, & \alpha = 0, \\ \int_a^t (dt)^\alpha, & \alpha < 0. \end{cases}$$

Некоторые свойства, действительные для производных целого порядка, выполняются и для дробных – например, свойство линейности [3, 8]:

$$D_t^\alpha (p(t) + q(t)) = D_t^\alpha (p(t)) + D_t^\alpha (q(t)),$$

$$D_t^\alpha (cp(t)) = cD_t^\alpha (p(t)), \quad c = const.$$

На основе правила Лейбница (производной от произведения двух функций) выводится правило дифференцирования произведения функций нецелого порядка [4]:

$$D_t^\alpha (p(t)q(t)) = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{\alpha}{j} D_t^{\alpha-j} (p(t)) D_t^j (q(t)).$$

Правило композиции дифференциальных операций для функции $p(t)$ $D_t^\alpha D_t^\beta (p(t)) = D_t^{\alpha+\beta} (p(t))$ в общем случае не выполняется [9]. Более подробно элементарные свойства нецелых производных представлены в трудах [3, 5]. Следует заметить, что поведение дробной производной напрямую зависит от вида выбранного определения.

1.1.1. Определения дробной производной

Дробная производная в отличие от целой не имеет однозначного определения. На практике чаще всего используют дробные производные

Римана – Лиувилля [3, 9], Грюнвальда – Летникова [3, 5] и Капуто [6, 4, 10]. Другие определения связаны с именами таких известных ученых как Г. Вейль, Ж. Фурье, О. Коши, Н. Абель, А. Маршо, К. Нишимото и др. Дробное дифференцирование, как правило, определяют как операцию, обратную дробному интегрированию.

Определение 1. Для функции $f(t)$, заданной на отрезке $[a, b]$, каждая из формул [3]

$${}^{RL}D_{a+}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dt} \right)^n \int_a^t \frac{f(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}}, \quad (1.1)$$

$${}^{RL}D_{b-}^{\alpha} f(t) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dt} \right)^n \int_t^b \frac{f(\tau) d\tau}{(\tau-t)^{\alpha-n+1}}, \quad (1.2)$$

где $n = [\alpha] + 1$, $\alpha > 0$, $[\alpha]$ – целая часть α , $0 \leq \{\alpha\} < 1$ – дробная часть числа α , $\Gamma(n)$ – гамма-функция Эйлера, называется дробной производной Римана – Лиувилля порядка α – соответственно левосторонней и правосторонней.

Через $AC^n(\Omega)$, где $n = 1, 2, \dots$ и Ω – отрезок, обозначим класс функций $f(t)$, непрерывно дифференцируемых на Ω до порядка $n - 1$, причем $f^{(n-1)}(t) \in AC(\Omega)$.

Если $0 < \alpha < 1$ и $f(t) \in AC([a, b])$, то функция имеет почти всюду производные ${}^{RL}D_{a+}^{\alpha} f(t)$ и ${}^{RL}D_{b-}^{\alpha} f(t)$.

Для того чтобы производные (1.1) и (1.2) с порядком $\alpha \geq 1$ существовали, достаточно, чтобы $\int_a^t \frac{f(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\{\alpha\}}}$ принадлежал к классу $AC^{[\alpha]}([a, b])$, т.е. достаточным условием является выполнение $f(t) \in AC^{[\alpha]}([a, b])$.

Определение 2. Для функции $f(t)$, заданной на отрезке $[a, b]$, каждая из формул [9, 11, 12]

$${}^C D_{a+}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}}, \quad (1.3)$$

$${}_{b-}^C D_t^\alpha f(t) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \int_t^b \frac{f^{(n)}(\tau) d\tau}{(\tau-t)^{\alpha-n+1}}, \quad (1.4)$$

где $n = [\alpha] + 1$, $\alpha > 0$, $[\alpha]$ – целая часть α , $0 \leq \{\alpha\} < 1$ – дробная часть числа α , называется левосторонней и правосторонней дробной производной Капуто.

Если $f(t) \in AC^{[\alpha]+1}([a, b])$, то производные Капуто (1.3), (1.4) непрерывны на $[a, b]$ [12, 13].

Дробную производную Капуто правильнее называть производной Герасимова – Капуто, так как именно А.Н. Герасимов ввел аналогичную производную при рассмотрении дифференциальных уравнений с частными дробными производными [9].

Приведем простейший пример вычисления дробной производной от степенной функции (который будет использован далее для верификации моделей на тестовых задачах). Если $f(t) = t^k$, то производная дробного порядка может быть вычислена по формуле: $\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k-\alpha+1)} t^{k-\alpha}$.

Определение Грюнвальда – Летникова было введено, чтобы придать дробной производной смысл предела отношения бесконечно малых величин по аналогии с классическим анализом.

Определение 3. Дробной производной Грюнвальда – Летникова произвольного нецелого порядка $\alpha > 0$ от функции $f(t)$, заданной на отрезке $[a, b]$, называется выражение [6, 14]

$${}^{GL} D_t^\alpha f(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{k! \Gamma(\alpha-k+1)} f(t-k\Delta t), \quad (1.5)$$

где Δt – бесконечно малое приращение независимой переменной.

Значения $\Delta t > 0$ соответствуют левосторонним производным, $\Delta t < 0$ – правосторонним.

В этом случае интуитивно понятной и прозрачной является аналогия с построением конечно-разностных формул численного дифференцирования для «обычной», целочисленной производной [3, 9]:

$$\frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t}, \quad \frac{df^2(t)}{dt^2} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) - 2f(t - \Delta t) + f(t - 2\Delta t)}{(\Delta t)^2},$$

...

$$\frac{df^n(t)}{dt^n} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f(t - k\Delta t), \quad \text{где } \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} - \text{биномиальные коэф-}$$

фициенты. Заменяя в последнем порядок (целой) n производной на порядок α (дробной производной), а факториальные функции – на Гамма-функцию, получим определение

$${}^{GL}D_t^\alpha f(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t^\alpha} \sum_{k=0}^{\left\lfloor \frac{t-a}{\Delta t} \right\rfloor} (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{k! \Gamma(\alpha-k+1)} f(t - k\Delta t) \quad (1.5')$$

в случае дробной производной Грюнвальда – Летникова с конечным пределом (ряд в формуле (1.5) ограничен $m+1$ слагаемыми, где $m = \left\lfloor \frac{t-a}{\Delta t} \right\rfloor$), порядок точности будет соответствовать $O(\Delta t)$.

В силу эквивалентности определений Римана – Лиувилля и Грюнвальда – Летникова все свойства, действительные для дробной производной Римана – Лиувилля, справедливы и для Грюнвальда – Летникова [3, 12].

Ключевым отличием дробных производных от целых является нелокальность, т.е. результат дифференцирования зависит от значений функции во всех точках некоторого отрезка или числовой прямой, а не от значений функции в малой окрестности точки.

В случае дробной производной Капуто на функцию $f(t)$ накладываются дополнительные ограничения, связанные с существованием входящего в формулы (1.3), (1.4) интеграла [3, 10, 15]. Однако значительным преимуществом формулы Капуто является более естественное для практических приложений решение проблемы начальных условий для дробно-дифференциальных уравнений. Также необходимо отметить, что, несмотря на сходство формул Римана – Лиувилля и Капуто, считать их равнозначными нельзя, потому что свойства дробных производных существенно отличаются от их целочисленных аналогов.

Так, дробная производная от константы по формуле Римана – Лиувилля в отличие от производной Капуто в общем случае не равна нулю [8]. В работе [16] приведена модификация определения Римана – Лиувилля, в которой данная проблема успешно решена. Стоит также отметить преимущества дробной производной Римана – Лиувилля: для этого определения подынтегральная функция не должна быть непрерывной в нуле и дифференцируемой. Плюсом дробной производной Капуто является то, что она позволяет включать традиционные начальные и граничные условия в формулировку дифференциальной задачи [17, 18]. Тем не менее, определения Римана – Лиувилля и Капуто взаимосвязаны следующим образом [19]:

$${}^C D_t^\alpha f(t) = {}^{RL} D_t^\alpha f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k - \alpha + 1)} (t - a)^{k-\alpha},$$

$${}^C D_t^\alpha f(t) = {}^{RL} D_t^\alpha f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(b)}{\Gamma(k - \alpha + 1)} (b - t)^{k-\alpha}.$$

Кроме того, существуют частные случаи, когда определения совпадают полностью – например, для функции $f(t)$, определенной на всей оси $t \in (-\infty, \infty)$ и имеющей $[\alpha] + 1$ непрерывных производных, стремящихся к нулю при $t \rightarrow \pm\infty$, выполняется равенство:

$${}^{RL} D_t^\alpha f(t) = {}^C D_t^\alpha f(t) = {}^{GL} D_t^\alpha f(t).$$

Для правосторонних производных подобное равенство также справедливо.

На сегодняшний день известны и другие подходы к определению дробной производной, а также модификации и обобщения формул (1.1) – (1.5). Например, в [3] можно познакомиться с определениями дробных производных Маршо и Вейля, в [20] описана производная Рисса и ее применение в решении физических задач, формулы производных с комплексными порядками представлены в [3, 21, 22], в работах [3, 23] описаны операторы с детерминированной функцией от времени в качестве порядка дифференцирования, а в [24] рассмотрен случай, когда порядком дифференцирования является случайная вели-

чина. Более подробно свойства дробных производных и нецелых интегралов изложены в работах [3, 9, 15, 25, 26]. В дальнейшем в диссертационном исследовании использованы только левосторонние определения дробных производных (1.1) – (1.5).

1.1.2. Обзор численных методов решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка

Исторически развитие аппарата дробно-дифференциального исчисления (как в свое время и целочисленного дифференцирования) привело к развитию теории дифференциальных уравнений дробного порядка. Интерес исследователей во многом был обусловлен возможностями расширить классические, детерминированные рамки при решении прикладных задач за счет введения дробной производной. И, как оказалось на практике, подобный подход позволил построить математические модели, адекватно описывающие процессы в сложных физических системах. В настоящем разделе будут рассмотрены востребованные в практическом плане постановки дробно-дифференциальных задач – задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка и нестационарные начально-граничные задачи для уравнений с частными производными дробного порядка.

Несмотря на то, что аналитические методы решения дробно-дифференциальных уравнений активно развиваются [3, 15, 27, 28, 29, 30], получить точное решение удастся лишь для ограниченных классов задач. Возникают сложности не только с накладываемыми начальными и/или граничными условиями, но и с тем, что сама дробная производная в силу своей нелокальности является достаточно сложным математическим объектом. Поэтому актуально нахождение приближенного решения. В настоящее время в этом направлении активно развиваются как сеточные, так и аналитико-приближенные методы (метод коллокации, метод Галеркина). Изложение полного спектра методов приближенного решения дробно-дифференциальных задач выходит за рамки данной работы, поэтому основной акцент будет сделан на конечно-разностных

алгоритмах, предполагающих предварительную численную аппроксимацию производных дробного порядка.

Как правило, точность аппроксимации дробных производных находится в прямой зависимости от сложности вычислений таковых, более того, к дифференцируемой функции могут быть предъявлены требования принадлежности к более высокому классу гладкости – как, например, для функции в определении Капуто.

На сегодняшний день накоплено достаточно большое количество трудов по аппроксимации производных дробного порядка. Например, в работе [31] введена численная аппроксимация дробной производной Капуто ($0 < \alpha < 2$, $\alpha \neq 1$) с порядком точности $2 - \alpha$ посредством приближенного вычисления интеграла в уравнении (1.3) методом трапеций с последующим применением экстраполяции Ричардсона.

В работах [32, 33] и [34] описано приближение первого порядка точности формул Римана – Лиувилля и Капуто ($0 < \alpha < 1$) соответственно. В [35] – конечно-разностная аппроксимация определения Капуто ($0 < \alpha < 1$) с точностью $1 - \alpha$. Автор [36] построил трехточечную компактную аппроксимацию для дробной производной Капуто порядка точности $3 - \alpha$.

В [37] предложен способ аппроксимации производной Римана – Лиувилля и Капуто, полученный путем замены интеграла бесконечным рядом степенной функции. В [38] представлен перечень способов аппроксимации производной путем замены подынтегральной функции различными полиномами, с последующем вычислением интегралов с помощью формулы трапеции, формулы Симпсона и др. Также использовались методы аппроксимации $L1$, $L2$, $L2C$ для дробной производной Капуто. Порядок точности в приближенных формулах Римана – Лиувилля и Капуто варьировался от 1 до $3 - \alpha$. Обширный обзор современных методов численной аппроксимации различных нецелых производных можно найти в [39, 7].

Достаточно простой способ аппроксимации производной Капуто ($0 < \alpha < 1$) с точностью порядка $2 - \alpha$ на основе метода $L1$ описан в статье [10] и

развит в цикле последующих работ [36, 40]. Рассмотрим замену дробной производной Капуто ($0 < \alpha < 1$) разностным представлением на отрезке $[0, L]$ с временной сеткой $\Omega_{\Delta t} = \{t_k = k\Delta t, k = \overline{0, M}\}$:

$${}^C D_t^\alpha f(t_k) = \sum_{r=0}^{k-1} \lambda_{k-r-1} (f(t_{r+1}) - f(t_r)) + O(\Delta t^{2-\alpha}), \quad (1.6)$$

где веса $\lambda_r = \frac{(r+1)^{1-\alpha} - r^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)\Delta t^\alpha}$.

Высокоточная конечно-разностная аппроксимация дробной производной на основе определения Капуто (1.3) получена в работе [41]. Вывод аппроксимации дробной производной Капуто основан на разложении подынтегральной функции в ряд Тейлора с последующей заменой производных конечно-разностными соотношениями. Следуя этой работе, введем конечно-разностную сетку $\Omega_{\Delta t} = \{t_j = j\Delta t, j = \overline{0, N}\}$, на которой аппроксимация производной дробного порядка функции одной переменной f будет записана в виде:

$$\begin{aligned} {}^C D_t^\alpha f(t_j) = & \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{l=0}^{j-1} [w_{1,j-l} (f_{l+1} - f_{l-1}) + \\ & + w_{2,j-l} (f_{l+1} - 2f_l + f_{l-1})] + O(\Delta t^{3-\alpha}), \end{aligned} \quad (1.7)$$

где Δt – шаг по времени; $f_{l+1} = f(t_{l+1})$; $j = \overline{1, N}$; $0 < \alpha < 1$; $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция Эйлера; $f(t)$ – дифференцируемая функция.

Весовые функции в (1.7) задаются следующим образом:

$$\begin{aligned} w_{1,j-l} &= \frac{2-\alpha}{2} [(j-l)^{1-\alpha} - (j-l-1)^{1-\alpha}], \\ w_{2,j-l} &= (j-l)^{2-\alpha} - (j-l-1)^{2-\alpha} - (2-\alpha)(j-l-1)^{1-\alpha}, \end{aligned}$$

при $j = \overline{1, N}$, $l = \overline{0, j-1}$.

Существует не так много публикаций, посвященных аппроксимации производной Капуто выше первого порядка, поэтому определенный интерес представляет работа [42] для $1 < \beta \leq 2$. Автор [42] предложил искать интеграл в (1.3) путем аппроксимации производной второго порядка линейным сплайном с по-

следующим применением формулы центральной разности. Для временной сетки $\Omega_{\Delta t} = \{t_j = j\Delta t, j = \overline{0, N}\}$ запишем данное представление в виде:

$${}^c D_t^\beta f(t_j) = \frac{\Delta t^{-\beta}}{\Gamma(4-\beta)} \left\{ v_{j,0} \delta_0^2 f_0 + \sum_{k=1}^j v_{j,k} (f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}) \right\} + O(\Delta t^2), \quad (1.8)$$

где $\delta_0^2 f_0 = \Delta t^2 \frac{d^2 f}{dt^2}(t_0)$.

Весовые функции при $j = 1, \dots, N-1$, $k = 0, 1, 2, \dots, j$ имеют вид:

$$v_{j,k} = (j-1)^{3-\beta} - j^{2-\beta} (j-3+\beta), \quad k=0;$$

$$v_{j,k} = (j-k+1)^{3-\beta} - 2(j-k)^{3-\beta} + j^{2-\beta} (j-k-1)^{3-\beta}, \quad 1 \leq k \leq j-1;$$

$$v_{j,k} = 1, \quad k=j.$$

На сегодняшний день известны работы с порядком точности, например [43], выше $3-\alpha$ аппроксимации нецелых производных.

Дробная производная Грюнвальда – Летникова часто используется для численной аппроксимации дробной производной Римана – Лиувилля [4, 10, 44, 45, 46]. Эта формула достаточно проста в применении, но, как правило, отличается невысоким порядком точности. В статье [47] рассматривается компактная конечно-разностная схема высокого порядка точности, основанная на идее применения техники расщепления операторов для решения двумерного уравнения диффузии с дробной производной по времени. Для производной по времени Римана – Лиувилля используется приближение Грюнвальда – Летникова, а пространственные производные второго порядка аппроксимируются компактными конечными разностями для получения полностью дискретной неявной схемы.

Дифференциальным уравнением дробного порядка называют дифференциальное уравнение, которое содержит хотя бы одну нецелую производную. Будем считать, что функции, входящие в дробно-дифференциальное уравнение, обладают всеми свойствами, при которых нецелые производные от этих функций существуют, а уравнение разрешимо.

Вопросы существования и единственности решения начальных и граничных задач, а также их вид и смысл для обыкновенных дробно-дифференциальных уравнений, в большей части для линейных, рассматривались в работах [3, 6, 5, 9, 10, 15, 31, 48, 49]. Для квазилинейных и нелинейных обыкновенных дробно-дифференциальных уравнений в [50-55] приведено доказательство существования и исследован вопрос единственности решения.

Многообразие определений нецелой производной накладывает свой отпечаток на корректность постановки задачи Коши или краевой задачи для дробно-дифференциальных уравнений. Так, поиск единственного решения обыкновенного дифференциального уравнения с производной Капуто проводится на основе знания в начальный момент времени значений производных целого порядка функции, а для Римана – Лиувилля требуется значение дробной [3, 5, 9, 10]. Самым простым решением проблемы нелокальности начальных и/или граничных условий является сведение исходной задачи к задаче с однородными условиями – например с помощью замены переменных [56, 57].

Вопрос физической интерпретации неоднородных начальных условий неоднократно поднимался в научной литературе, вызывая жесткую полемику. Так, в работе [31] отмечено: «... Для дифференциальных уравнений с дробной производной Римана – Лиувилля начальные условия представляют собой некоторые дробные производные неизвестного решения в начальной точке ($t = 0$)..., которые являются функциями от t . Эти начальные условия не являются физическими; кроме того, неясно, как такие величины измерять экспериментально...». В то же время в работе [58] указано: «Начальные условия для дробно-дифференциальных уравнений с производными Римана – Лиувилля, выраженные через дробные производные, имеют физический смысл, и соответствующие величины могут быть получены из измерений». В случае использования определения дробной производной Капуто начальные условия просто статичны и обладают довольно определенным физическим смыслом [31]. В то же время известно, что при нулевых начальных условиях дробные производные Римана – Лиувилля, Грюнвальда – Летникова и Капуто совпадают [10].

В статье [59] на примере уравнения Торвика показано, как численное приближение решения линейного дробно-дифференциального уравнения может быть вычислено путем сведения задачи к системе обыкновенных и дробно-дифференциальных уравнений, каждое из которых имеет порядок не выше единицы. Идея сведения обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка к системе алгебраических уравнений реализована и в [60-62].

Дробно-дифференциальная задача Коши вида:

$$D_t^\alpha y(t) = f(y(t), t), \quad (1.9)$$

$$y^{(k)}(0) = y_0^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, [\alpha] - 1, \quad (1.10)$$

где $D_t^\alpha y(t)$ – дробная производная в смысле Капуто, $\alpha > 0$, $[\alpha]$ – первое целое число не меньше α , $y_0^{(k)}$ может быть любым действительным числом была решена методом, основанном на предиктор-корректорной схеме Адамса – Башфорта – Моултона [63].

Немного улучшенный подход предиктора-корректора для решения уравнения Фоккера – Планка был упомянут в [64]. Статья [65] посвящена численному рассмотрению дробно-дифференциальных уравнений (1.9) – (1.10) при $k=0$. На основе определения Грюнвальда – Летникова построены разностные схемы решения, описаны основные свойства явных и неявных методов, освещены вопросы, касающиеся устойчивости, сходимости методов, доказана асимптотическая устойчивость этих методов. Предложена идея добавления поправочного члена в случае неоднородного начального значения для производных Грюнвальда – Летникова и Римана – Лиувилля.

В работе [66] решено дробно-дифференциально-разностное уравнение Бюргерса разностным методом из [10].

Некоторые другие численные алгоритмы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка, построенные на основе аппроксимации определения Капуто, представлены в [31]. Обширный спектр методов решения дробно-дифференциальных уравнений изложен также в [67]: различные многошаговые методы для решения обыкновенных диффе-

ренциальных уравнений дробного порядка, методы решения систем дробных дифференциальных уравнений.

Развитие алгоритмов предикт-корректорных конечно-разностных схем, построенных соответственно на основе формулы Грюнвальда – Летникова и аппроксимации производной Капуто, в контексте реализации различных математических моделей, требующих численного решения задач для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка (и системы обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка), представлены в авторских работах [68-70] – в приложении к задачам физики полярных диэлектриков и в работе [1] – в приложении к моделированию динамики финансовой системы.

1.1.3. Ключевые аспекты применения численных методов решения для эволюционных дробно-дифференциальных задач математической физики

При использовании дробно-дифференциального подхода математическая формализация процессов и явлений основана на введении дифференциальных уравнений с частными производными дробного порядка, которые чаще всего получают путем замены производной целого порядка ее дробным аналогом. В серии работ, посвященных исследованию разрешимости начально-граничных задач для уравнений (систем уравнений) в частных производных дробного порядка, можно выделить исследования [10, 71-75], а также монографию [76], в которой, кроме вопросов разрешимости, показаны аналитические способы решения некоторых видов подобных уравнений. Так, в работе Y. Luchko [77] исследован вопрос существования и единственности решения начально-граничных задач для уравнений с частными производными диффузионного типа с дробной производной Капуто по времени. Автор J. Kempainen [75] рассмотрел вопросы корректности математических постановок для сходных задач с граничными условиями Робина. D. Stan и J.L. Vazquez [74] проведено исследование разрешимости нелинейного реакционно-диффузионного уравнения (в частности уравнения Фишера) с дробной производной по координате.

В числе задач, представляющих особый практический интерес, можно выделить математические модели явлений и процессов диффузионной приро-

ды, представляющих пространственное и временное изменение концентрации вещества, либо сопровождающих процессы переноса тепла и зарядов. У ряда аморфных структур, пористых сред, жидких кристаллов, полимеров, биополимеров, белков, биосистем и даже экосистем результаты моделирования часто не согласуются с реальными наблюдениями. Подобные процессы могут сопровождаться значительными градиентными изменениями анализируемых характеристик или очень длительным временем ожидания эффектов последействия. Один из подходов к построению математических моделей нестандартных диффузионных явлений и явлений переноса в неоднородных, сложноструктурированных и эредитарных системах основан на использовании аппарата дробно-дифференциального исчисления. Детерминированную модель нестационарного диффузионного процесса преобразуют в дробно-дифференциальную модель аномальной диффузии, заменяя целые производные дробно-дифференциальными аналогами:

$$\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial t^\alpha} = d(x) \frac{\partial^\beta c(x,t)}{\partial x^\beta} + q(x,t), \quad (1.11)$$

где $c(x,t)$ – функция концентрации вещества; $d(x)$ – коэффициент диффузии; $q(x,t)$ – функция источника или стока; $0 < \alpha \leq 1$ и $1 < \beta \leq 2$ – порядки дробного дифференцирования по времени и пространственной координате соответственно.

Варьируя порядки дробных производных, можно получить уравнения, описывающие процессы [78]: субдиффузии (замедленное блуждание), если $2\alpha < \beta$; классической диффузии, если $2\alpha = \beta$; супердиффузии (ускоренное блуждание), если $2\alpha > \beta$.

Кинетика протекания аномальных процессов переноса диффузионного типа также может быть хорошо описана степенными законами [5, 79] с дробным показателем степени, в таком случае наблюдается отклонение среднего квадрата смещения частиц от времени в форме, отличной от линейного закона, $\langle r^2 \rangle \sim t^p$. Величина показателя p также соответствует введенной выше классификации процессов аномальной диффузии: супердиффузионные (ускоренное

блуждание, связанное с прыжковым механизмом переноса) при $1 < p < 2$, субдиффузионные (замедленное блуждание, возникающее из-за наличия ловушек в среде). Субдиффузия чаще всего наблюдается в системах с памятью, а супердиффузия обычно встречается в самоподобных средах. Если среда обладает пространственной и временной нелокальностью, то возможно протекание процессов как первого, так и второго видов. К дробным дифференциальным уравнениям диффузионного типа относят супердиффузионные, субдиффузионные, диффузионно-волновые, адвекционно-диффузионные, реакционно-диффузионные и многие другие.

Исследованиям в области разрешимости начальных и начально-граничных задач, построения аналитического решения для линейных диффузионных уравнений с производной дробного порядка посвящены труды [3, 9, 15, 34, 76, 80-86]. Получение точного решения основывалось на использовании различных подходов: интегрального преобразования Фурье, Лагранжа, функции Грина, метода разделения переменных Фурье, точечного преобразования растяжений, сведения к интегральным уравнениям Вольтерра.

К сожалению, получение аналитического решения, разрешение вопросов существования и единственности нелинейных дробно-дифференциальных уравнений не были исследованы в полной мере. Относительно небольшое количество работ [87-90] посвящено получению точного решения нелинейного уравнения аномальной диффузии. Существование и единственность решений некоторых таких уравнений доказаны в [74, 91]. Построение точных решений для уравнений вида (1.11) не всегда возможно, так как в условиях конкретной физической задачи замкнутая математическая постановка предполагает наличие начальных и граничных условий для нестационарного уравнения аномальной диффузии, что затрудняет использование аналитических методов. Поэтому во многих практических ситуациях оправдано применение приближенных методов, основанных на аппроксимациях производных дробного порядка.

Теория численных методов решения дробно-дифференциальных задач привлекает внимание многих современных авторов. Так, в [92-94] представлено

численное решение уравнения аномальной диффузии с дробной производной по времени. В [93-95] предложено решение аномальной диффузии в ограниченной области на основе модификации конечно-разностной схемы Кранка – Николсон и доказана устойчивость предложенной схемы. В работе [96], кроме схемы Кранка – Николсон, рассмотрены еще явная и неявная модифицированные конечно-разностные схемы. Решение уравнения диффузии с дробной производной по координате предложено авторами работ [97, 98]. Автор [10] рассмотрел уравнение дробной диффузии Нигматуллина и уравнения дробной диффузии Шнайдера – Вайса, в которых решения получены с помощью преобразований Лапласа и Фурье в сочетании с функцией Миттаг – Леффлера.

Целое направление в разработке конечно-разностных методов решения дробно-дифференциальных уравнений с частными производными основывается на применении формулы Грюнвальда – Летникова (1.5'). Однако прямое использование формулы (1.5') для аппроксимации дробных производных по пространственным переменным приводит к неустойчивым явным или неявным методам конечных разностей. Этот вывод был теоретически обоснован в [45] при построении неявных и явных методов Эйлера для решения нестационарного пространственно-дробного уравнения адвекции-диффузии. Неявная схема для двусторонних пространственно-дробных уравнений в частных производных, основанная на двух приближениях первого порядка к левой и сдвинутой вправо дробной производной Грюнвальда – Летникова, была предложена в [46]. Теоретический анализ неявного метода, явного метода и аналога метода Кранка – Николсона, основанного на модифицированной формуле Грюнвальда – Летникова, также представлен в этих исследованиях. Полученные данные свидетельствуют о точности первого порядка аппроксимации по пространственной переменной и безусловной устойчивости методов. Кроме того, в [99] была предложена конечно-разностная схема второго порядка точности типа Кранка – Николсон, основанная на смещенной вправо дробной производной Грюнвальда – Летникова. Неявные методы конечных разностей, основанные на формуле Грюнвальда – Летникова, были предложены для решения уравнения дробной

диффузии по времени [100] дробного уравнения Фоккера – Планка [101] и уравнения дробной аномальной субдиффузии по времени [102]. Эти схемы характеризуются первым порядком точности по времени и безусловной устойчивостью.

Известна серия исследований [100, 103, 104], посвященных построению модифицированных конечно-разностных схем для решения пространственно-временных уравнений дробной диффузии с использованием взвешенных и смещенных операторов Грюнвальда (связанных с подходом, предложенным в [45, 46]). В этих работах производная Капуто используется для определения дробной производной по времени, эквивалентной производной Грюнвальда – Летникова при однородных начальных условиях. Теоретически проанализированы абсолютная устойчивость и сходимость схем. Результат, полученный [45, 46], был распространен на случай пространственно-временного дробного уравнения аномальной диффузии в [44], где сконструированы и исследованы теоретически явные и неявные конечные разности схемы, основанные на операторах Грюнвальда – Летникова. Строго доказана точность первого порядка по пространственным и временным переменным и абсолютная устойчивость неявной схемы. В исследовании [105, 106] получено решение краевой задачи для двумерного уравнения теплопроводности с дробными производными по времени и по пространственным переменным и также подтверждена абсолютная устойчивость неявной схемы.

Решение дробного аналога уравнения теплопроводности методом конечных разностей на основе аппроксимации дробной производной Грюнвальда – Летникова представлено в работе [107].

Кроме того, подход, предложенный в [45, 46], оказался легко адаптируемым для решения многомерных задач математической физики. Например, в работах [47, 99, 108, 109] приведены результаты построения разностных схем и их теоретический анализ, включая точность, устойчивость и сходимость. В исследованиях [110] представлена модификация этого подхода на основе комби-

нации с неявной схемой Яненко для решения системы нестационарных полулинейных реакционно-диффузионных уравнений.

Решение начально-граничной задачи для уравнения адвекции-диффузии с производными дробного порядка по времени и состоянию с эффектом функционального запаздывания описано в [111, 112]. На основе комбинации неявной схемы, смещенных формул Грюнвальда – Летникова для аппроксимации дробных производных по пространственным переменным и $L1$ -алгоритма для аппроксимации дробных производных по времени, кусочно-постоянной интерполяции и экстраполяции продолжения дискретной предыстории модели по времени получен достаточно высокоточный алгоритм решения поставленной задачи. В предыдущих работах автора также рассмотрено решение уравнения аномальной диффузии на основе неявной схемы и схемы Кранка – Николсон [113, 114].

В статье [115] для дробного уравнения субдиффузии с граничными условиями Дирихле и Неймана предлагается комбинация компактной конечно-разностной схемы в пространстве и модифицированного правила трапеций по времени.

Порядок аппроксимации дробной производной в большинстве представленных в литературе работ – менее второго. Более точные приближения получены при решении уравнений адвекции-диффузии [43] и субдиффузии [36] с дробной производной по времени, а также при конструировании алгоритма приближенного решения диффузионно-волнового уравнения нецелого порядка [116] и уравнения теплопроводности [115]. В работе [47] приведено численное решение двумерного уравнения диффузии с дробной производной по времени. С помощью метода альтернативного направления исходная задача разделена на две отдельные одномерные задачи. Авторами была доказана устойчивость полученной вычислительной схемы. Предлагаемая схема удобна, когда порядок дробной производной α лежит в интервале $[0.5; 1)$. Но если $\alpha \in (0; 0.5)$, то для поддержания высокой точности вводится поправочный член.

В статье [117] разработан быстрый численный подход решения одного класса начально-краевых задач для пространственно-временных уравнений дробной конвекции – диффузии. Предложенный безусловно устойчивый неявный разностный метод основан на смещенной формуле Грюнвальда – Летникова и сходится со вторым порядком точности как по временной, так и по пространственной переменной. Дальнейшие вычисления приводят к системам линейных уравнений с диагонально-постоянной матрицей, которые могут быть эффективно решены методами Крылова. Применение этих методов позволяет снизить требования к памяти для предлагаемой неявной разностной схемы с полиномиальной вычислительной сложности до логарифмической.

Однако многие вопросы, связанные с построением и программной реализацией вычислительных схем более высокого порядка точности (в том числе на основе определения Капуто) для решения уравнения аномальной диффузии, остаются открытыми и требуют дальнейшей проработки. В частности, востребованной в приложениях является задача разработки вычислительных схем решения начально-граничных задач для нелинейных дробно-дифференциальных уравнений типа «реакция-диффузия». Развитие данного подхода представлено в авторских исследованиях [118-128].

1.2. Математическое моделирование динамики фрактальных физических систем: применение аппарата дробно-дифференциального исчисления

С начала XX века, кроме активного развития фундаментальных основ, дробно-дифференциальное исчисление находит применение в исследованиях, связанных с математическим моделированием сложных физических систем.

1.2.1. Фрактальность физических объектов и дробно-дифференциальный подход

В широком смысле под фракталами понимают нерегулярные самоподобные структуры. В 80-х годах прошлого века термин «фрактал» ввел

Б. Мандельброт, позаимствовав слово *fractus* из латыни, что в переводе означает «ломаный» или «дробленный» [129]. Заслуга Мандельброта состояла в том, что широко известные геометрические объекты («математические монстры»), а также методы их генерации и анализа, развиваемые плеядой ученых-предшественников, выделились в самостоятельную научное направление – теорию фракталов и мультифракталов. Активное развитие теория фракталов получила с появлением вычислительных устройств.

В теории фракталов понятие размерности объектов, отличающихся сложным скейлингом, является базовым, поскольку позволяет количественно характеризовать «степень» самоподобия, нерегулярности, шероховатости, изломанности и т.д. Для анализа многих сложно-структурированных объектов, задания только одной величины – фрактальной размерности – недостаточно, для этого используют статистический вес характеризующих структуру размерностей, представляемый в виде спектра размерностей. Такие объекты носят название «мультифракталы» [130]. Отметим, что фрактальные свойства присущи не только геометрическим структурам, динамические отклики многих физических систем, заданные временными рядами (колебания курсов валют и финансовых показателей, данные метеоизмерений, показатели биологической активности живых организмов, электрические сигналы и т.д.), также могут быть специфицированы на основе фрактального и мультифрактального подходов. Современный арсенал фрактального и мультифрактального анализа складывается из огромного количества методов, базирующихся на самых различных математических и алгоритмических концепциях. В числе наиболее известных фрактальных и мультифрактальных методов анализа изображений можно отметить методы фрактальной параметризации (в том числе метод покрытий и метод «островов среза») и методы, основанные на вейвлет-преобразованиях. Для исследования временных рядов используют метод Херста, метод, основанный на преобразовании Фурье, методы мультифрактального флуктуационного анализа, а также методы с вейвлет-преобразованиями.

Примеры приложения теории фракталов и мультифракталов к решению практических задач обширны. Она используется для описания хаотического поведения нелинейных динамических и диссипативных систем, неравномерного распределения материи во Вселенной, при исследовании трещин и дислокационных скоплений в твердых телах, при изучении электрического пробоя, диффузии и агрегации частиц, роста кристаллов. Теория фрактальной геометрии помогает описать процессы поглощения и рассеяния в пористых средах, используется для характеристики сильно развитой турбулентности, при моделировании свойств поверхности твердых тел, для описания молнии, при анализе процессов усталостного разрушения материалов, динамики доменных границ и переключения поляризации в сегнетоэлектриках, при исследовании различных стадий роста вещества за счет диффузии и последующей агрегации, распространения тепла в высокопористых средах, в квантовой механике при описании геометрической структуры волновых функций в точке перехода металл-диэлектрик. Похожие геометрические формы можно встретить в абсолютно разных областях науки: в астрофизике – при описании процессов кластеризации галактик во Вселенной, в картографии – при изучении форм береговых линий и разветвленной сети речных русел и, например, в биологии – при анализе строения кровеносной системы или рассмотрении сложных поверхностей клеточных мембран [130].

Фрактальный и мультифрактальный анализ можно отнести к методам апостериорного исследования. Безусловно, в некоторых случаях концепции этой теории позволяют, раскрыв законы формирования/генерации некоторых структур, прогнозировать развитие их геометрии. Для временных рядов можно установить периоды персистентности и выполнить прогнозирование их поведения, привлекая дополнительные методы (например, нейронные сети и нечеткое моделирование). Тем не менее, главные инструменты фрактального анализа – методы, позволяющие количественно специфицировать фрактальные свойства уже имеющихся объектов – цифровых изображений и динамических данных в виде временных рядов. Чтобы описать динамику состояния сложных

объектов, предсказать характеристики в неравновесных условиях и научиться управлять такими системами, привлекают аналитический аппарат дробного исчисления [12, 124]. И если фрактальный анализ имеет дело со сложными объектами, характеризуемыми нецелой размерностью, то теория дробного дифференцирования базируется на дифференциальных операторах нецелых порядков. Одна из ключевых идей использования дробно-дифференциального подхода состоит в определении подходящего дифференциального оператора, зависящего от нецелого параметра порядка. В связи с чем теорию дробно-дифференциального исчисления зачастую рассматривают как аналитический раздел теории фракталов, показывая естественную взаимосвязь концепций «дробность» – «фрактальность» [131-133]. Вместе с тем понятно, что дробное дифференциальное и интегральное исчисление на протяжении длительного времени развивалось как самостоятельное научное направление. Поэтому существует альтернативная точка зрения, строго разделяющая понятия «фрактальный» и «дробный».

Центральным вопросом дискуссии является физический и геометрический смысл производной и интеграла дробного порядка. Несмотря на длительную историю развития дробного интегро-дифференциального исчисления, до сих пор отсутствует однозначная интерпретация рассматриваемых операций. В литературе выделяют несколько подходов к решению данной проблемы. Среди них на первый план выходят геометрический, физический и вероятностный.

Как правило, авторы первых двух подходов пытаются провести аналогию с целочисленными операторами. Геометрический подход, в свою очередь, можно разделить на классический и фрактальный. В рамках классического геометрического подхода интеграл нецелого порядка толкуется в терминах площадей плоских фигур [134]. Геометрический смысл нецелой производной дается на основе геометрии струйных пучков [135].

Приверженцы фрактального подхода, как уже отмечено, говорят о существовании связи между фракталами и дробными операторами и

предлагают трактовать операции над нецелыми операторами через операции, которые заданы на фрактальных многообразиях [136, 131-133].

Физический подход делится на несколько подгрупп, основанных на идеях теории линейных систем (операции дробного интегрирования и дифференцирования сопоставляются с дробными передаточными функциями линейных систем); теории измерений (дробные операции соотносятся с полученными результатами измерения заданной величины с помощью некоего устройства); существование фрактальных свойств в пространственной структуре или ее временной динамике.

Вероятностные подходы основаны на «неклассическом» (чаще всего негауссовском) поведении в статистических распределениях управляющих параметров состояний [12].

Одна из первых работ, описывающих связь между дробными операторами и фракталами – статья [137]. В исследованиях [138-141] показано соответствие между дробным интегралом в определении Римана – Лиувилля, дробной производной Грюнвальда – Летникова [142] и множеством Кантора, а также кривой Коха. Автор [142] приходит к выводу, что дробное исчисление можно использовать для точного изменения или управления фрактальной размерностью любого стохастического или детерминированного фрактала с координатами, которые могут быть выражены как функции одной независимой переменной (обычно это время). В [143] определена линейная связь между порядком дробного исчисления и размерностями графиков функции Вейерштрасса.

В силу того, что в реальных физических средах свойство самоподобия может быть только в рамках определенного диапазона масштабов, при физической фрактальной интерпретации дробные операции связывают с нецелой топологической размерностью, характерной для сред со сложной геометрической структурой [5, 144]. Изучение сильно неоднородных сред и использование аппарата дробного интегрально-дифференциального исчисления для описания физических свойств подобных сред можно найти в [5, 144, 132,

145-148]. Описывая физический смысл дробных операций на канторовом множестве, автор [137] пришел к выводу, что в реальных процессах и системах, динамика которых является самоподобным процессом во времени, часть состояний системы в ходе развития процесса становится недоступной (теряется). А так как фракталы претерпевают разрывы на всех масштабах, то, чтобы перейти к непрерывному описанию, приходится использовать временное усреднение по всему ансамблю фракталов. Это приводит к возникновению сверхмедленных диффузионных процессов [5, 144, 149], что обуславливает наличие у среды временной нелокальности – памяти, а в случае стохастического процесса – немарковости. Для учета этого свойства в математических моделях вводят дробную производную по времени.

В исследовании [132] предлагается искать связь между фракталами и дробным исчислением не в переопределении дробных операторов через фракталы, а в физических истоках степенных законов масштабирования сложных систем. Для многих природных явлений характерна длительная память и наследственные свойства, которые, в свою очередь, являются основными особенностями дробных операторов. Степенные законы естественным образом возникают в физических явлениях, происходящих во фрактальных структурах. Порядок таких степенных законов строго связан с геометрической размерностью, в которой происходят явления, а также с параметрами, относящимися к физическим свойствам объекта.

Пространственная нелокальность характеризуется тем, что отклик системы на внешнее воздействие зависит от состояний всей системы (или, как самое малое, некоторой конечной окрестности точки), а не только от точки и ее бесконечно малой окрестности [5, 144, 150, 151]. Для отражения самоподобной неоднородной структуры или среды, в которой проходит процесс, как правило, используют дробную производную по координатам. Подобная нелокальность отмечается в плазмopodobных, вязкоупругих, электрических, а также в средах со сложной микроструктурой.

1.2.2. Примеры моделей, формализуемых с помощью дифференциальных уравнений дробного порядка

Операторы дробного порядка широко используются для формализации сложных динамических систем в различных отраслях наук: физике, химии, биологии, медицине, компьютерных науках, инженерных приложениях [131]. Все эти работы объединяет идея генерализации дифференциальных операторов за счет введения дробного порядка и более адекватного на этой основе описания сложных динамических систем.

К числу первых приложений теории дробного дифференцирования и интегрирования можно отнести работы Н. Абея (задача о таутохроне). В начале XX в. О. Хейвсайд и Т. Бромченок показали, что для полубесконечной резистивно-емкостной линии импеданс выражается дробной производной порядка $\frac{1}{2}$. В работах А. Геманта, А.В. Герасимова, Г. Скотта-Блэра и Ю.Н. Работнова производная нецелого порядка нашла применение в задачах для вязкоупругих сред. Ф. Майнари и М. Капуто, а затем Ю.Н. Работнов, Р. Бэгли и П. Торвик определили, что использование дробных операторов в дифференциальных уравнениях для построения моделей в задачах термовязкоупругости позволяет более адекватно описать некоторые процессы, в частности эффект гистерезиса при деформации вязкоупругих материалов. В настоящее время существует большое количество работ, в которых описаны модели на основе дробного исчисления для вязкоупругих сред и задач теории тепломассообмена [3, 5, 152].

В середине XX века опубликован ряд работ, связанных с процессом релаксации в диэлектрических материалах и поведением электрохимических сред. Было экспериментально доказано существование феномена памяти в процессах зарядки-разрядки конденсаторов и электрохимических ячеек. Модели на основе дробных производных смогли лучше описать подобные явления, чем их целочисленные аналоги [12].

В дальнейшем дробное интегро-дифференциальное исчисление нашло применение в построении множества процессов: переноса, сверхмедленной

релаксации в неупорядоченной среде; в физике полупроводников, полярных диэлектриков, плазмы, астрофизике, биологии, химии и т.д. [5, 6, 8, 15, 110, 152, 153].

Как известно, классические модели, построенные на основе обыкновенных дифференциальных уравнений с целым порядком, широко использовались в описании многих динамических процессов. Однако существуют системы, обладающие свойством памяти. Моделирование систем с помощью дифференциальных уравнений дробного порядка имеет больше преимуществ, чем классическое математическое моделирование целого порядка, в котором такой эффект не учитывается.

В [154] определен общий класс управляемых динамических систем n -го порядка, называемых мемристивными системами, через обыкновенное дробно-дифференциальное уравнение.

Модель роста численности населения на основе обыкновенного дифференциального уравнения с нецелой производной, а также модель для определения уровня алкоголя в крови, описываемой посредством задачи Коши для системы двух дробно-дифференциальных уравнений, построены в [155]. Кроме того, дифференциальные уравнения дробного порядка естественным образом связаны с системами с памятью, они тесно связаны и с фракталами, которых много в биологических системах. В работе [156] предложены системы дробных обыкновенных дифференциальных уравнений для моделирования взаимодействия опухолей и ВИЧ-инфекции с иммунной системой. В [110] предложена гибридная математическая модель коммуникации бактериального сообщества, выраженная в виде системы нелинейных дробных уравнений типа «реакция-диффузия». Модель представляет обобщение целочисленного аналога и позволяет математически формализовать эффект памяти колонии бактерий в процессе ее развития. В исследованиях показано, что в присутствии эффектов памяти биологическая система «экономит энергию», формируя наследственный динамический отклик.

Будучи нелокальной, дробная производная хорошо подходит для

моделирования многих финансовых процессов, в основном потому, что некоторые финансовые и экономические переменные (например, процентная ставка, цена акций и т.д.) демонстрируют зависящий от времени эффект памяти. На основе дробных обыкновенных дифференциальных уравнений разработана новая нелинейная система финансовой модели [157], в работе [1] реализована дробная модификация финансовой модели Чена.

Достаточно обширный спектр применения элементов дробного исчисления в естествознании и других научных областях можно найти в [15]. Здесь описаны некоторые математические модели, основанные на дробных уравнениях с частными производными, для процессов, происходящих в вязкоупругих телах, сплошных средах с памятью, для более частных задач – прогноза распределения концентрации поглощающих молекул по трассе лазерного излучения, трансформации полей температуры и влажности в приземленном слое, процессов релаксации в сложных конденсированных системах, расчетов численности популяции и состояний вещества, решения задачи теории сопла Лавалея и др. Широкий перечень задач в таких областях как стохастические системы, реология, биофизика, термодинамика, сводящихся к уравнениям с дробными производными, приведен в [158].

Задача о движении пластины в ньютоновской вязкой жидкости сводится к дробному уравнению Баглея – Торвика с заданными начальными условиями [10]. В [150] осуществлен анализ экспериментальных данных по аномальному переносу в неупорядоченных полупроводниках, демонстрирующих фрактальные свойства. Показано, что концентрации неравновесных носителей при дисперсионном переносе выражаются через устойчивые плотности и удовлетворяют дробно-дифференциальным уравнениям, в частности уравнению аномальной диффузии.

Вопрос о применимости дробных производных в физических моделях был поднят в статье [159]. В ней продемонстрирован обобщающий характер применения аппарата производных и интегралов дробного порядка при описании модели среды, обладающей свойствами: упругость – вязкоупругость – вяз-

кая жидкость. Применение дробного исчисления в физике также описано в [160]. Сформулированы дробные теоремы Грина, Стокса и Гаусса. Доказательства этих теорем реализованы для простейших областей. Рассмотрены дробно-нелокальные уравнения Максвелла и соответствующие дробно-волновые уравнения.

Решению задач тепломассообмена, сводящихся к начально-краевым задачам для дробных уравнений в частных производных, посвящена монография [152]. В [161] рассмотрено уравнение теплопроводности с дробными производными, полученное на основе модификации закона Фурье во фрактальной среде. Модель процесса теплопроводности с численной реализацией представлена в работе [96].

Исследование распространения электромагнитных полей в средах, обладающих временной дисперсией, к таким средам относят, например, полимеры, при помощи дробного дифференцирования проведено в [162]. Авторы определили, что среды с временной дисперсией обладают фрактальными свойствами, и на основе дробных аналогов уравнений Максвелла получили уравнения для скалярного и векторного потенциалов, записанных при помощи дробных производных Капуто. Приведено численное решение диффузионно-волнового уравнения дробного порядка.

В обзорах [163, 164] рассматриваются гидромеханические задачи, в которых с помощью производных дробного порядка описываются движение тел в вязкой жидкости, гидромеханика турбулентности, турбулентная диффузия.

Практическое применение уравнения аномальной диффузии показано в [165]. Исследованы дробные аналоги уравнений Гельмгольца и Шредингера.

В монографии [166] представлены некоторые физические и математические модели по теме «Разработка новых технологий для оценки безопасности захоронения радиоактивных отходов в геологических формациях». Для описания неклассического, аномального переноса радионуклидов в сильно неоднородных трещиноватых средах предложены модели дробной диффузии, стохастической адвекции, диффузии по перколяционному кластеру и др.

Существенная часть авторских публикаций ориентирована на приложения аппарата дробного дифференцирования для моделирования сложных физических систем: описания динамики фазовой границы [69, 70], решения задачи теплопроводности [107, 128] и уравнения аномальной диффузии [107, 118-121, 123-128].

1.2.3. Сегнетоэлектрические материалы и фрактально-синергетический подход в задачах исследования их структуры и свойств

В настоящее время многие исследователи уделяют пристальное внимание вопросам динамического поведения и неравновесного состояния неоднородных нелинейных систем – например, процессам, происходящим в реальных кристаллах. Получило развитие фрактально-синергетическое направления в материаловедении [167]. Под синергетикой понимают междисциплинарное направление науки, объясняющее образование и самоорганизацию моделей и структур в открытых системах, далеких от термодинамического равновесия.

На сегодняшний день развитие фрактально-синергетического подхода в физике конденсированного состояния представлено различными концепциями, составляющими теоретический базис подобных исследований: теория самоорганизации и хаоса (включая анализ устойчивости) динамических систем (например, ансамблей дефектов); фрактальный анализ самоподобных структур и динамических данных, заданных временными рядами; стохастический, перколяционный и клеточно-автоматный подходы для дискретно-имитационного моделирования поверхностных явлений, кластерных структур и процессов агрегации, явлений роста, процессов протекания в пористых средах и др. В числе важнейших объектов подобного подхода могут быть рассмотрены сегнетоэлектрики, которые обладают интересными фрактальными свойствами.

Сегнетоэлектрики относятся к полярным диэлектрикам, в которых в определенном интервале температур может возникать спонтанная (самопроизвольная) поляризация. Характерной чертой сегнетоэлектриков является то, что спонтанную поляризацию можно переориентировать посредством приложенного внешнего электрического поля. Кроме того,

влияние на поляризацию могут оказывать давление, температура и другие внешние факторы.

Родоначальником термина «сегнетоэлектричество» является сегнетова соль, у которой в начале XX века чешский ученый Дж. Валашек впервые обнаружил нелинейные электрические свойства [168]. Последующее развитие направления сегнетоэлектричества шло быстрыми темпами на основе теоретических представлений, созданных трудами В.Л. Гинзбурга, А.Ф. Девоншира, Дж.С. Слейтера, В. Кокрена и др. На сегодняшний день известны уже сотни сегнетоэлектрических кристаллов.

Сегнетоэлектрические материалы характеризуются рядом уникальных свойств, таких как значительная диэлектрическая проницаемость, наличие пироэлектрического, пьезоэлектрического, электрокалорического эффектов, нелинейные электрооптические характеристики и др. На сегодняшний день сегнетоэлектрики нашли широкое применение во многих областях современной техники – радиотехнике, акустике, оптоэлектронике, пиро- и пьезотехнике – в качестве запоминающих динамических и статических устройств вычислительной техники, сенсоров акустических и тепловых волн (в том числе пироприемников), пьезоэлементов, модуляторов лазерного излучения, активных элементов в СВЧ-устройствах и пр. [169-171]. Истории, фундаментальным основам и применению сегнетоэлектриков посвящено большое количество обзоров – например, [168, 172, 173].

Существование спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических материалах связано с некоторыми особенностями структуры кристаллов, в частности с отсутствием центра симметрии в кристаллической решетке. Из-за несовпадения «центров тяжести» положительных и отрицательных зарядов в элементарной ячейке появляется дипольный момент. Вследствие взаимодействия поляризованных ячеек происходит упорядочивание расположений их дипольных моментов, которые ориентированы параллельно друг другу в направлении, называемом полярной осью кристалла. В отсутствии внешнего электрического поля такое расположение дипольных моментов

приводит к спонтанной поляризации. В общем случае состояние диэлектрика задается поляризацией P , определяемой как суммарный дипольный момент единицы объема. Условие устойчивости или минимальности полной энергии сегнетоэлектрика возможно лишь при разбиении кристалла на разнонаправленные спонтанно поляризованные области – домены, как показано, например, на рисунке 1.1. Граница, разделяющая два домена, называется доменной стенкой.

Кристаллы сегнетоэлектриков можно разделить на одноосные, в них существует одно направление спонтанной поляризации (например, триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$, ниобатлития LiNbO_3 , танталат лития LiTaO_3 , германат свинца $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$) и многоосные, в которых таких направлений несколько (например, титанат бария BaTiO_3 , феррит висмута BiFeO_3 , титанат свинца PbTiO_3). Существование нескольких направлений спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических материалах приводит к более сложной по сравнению с одноосными доменной структуре. Так, в BaTiO_3 в зависимости от направления внешнего поля в процессе переполяризации могут образовываться как 180° , так и 90° домены.

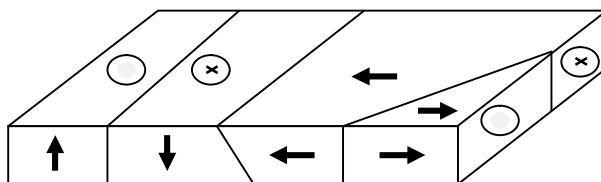


Рисунок 1.1 – Пример схемы разбиения сегнетоэлектрика на домены.

Стрелками показано направление вектора поляризации

При приложении к сегнетоэлектрическому кристаллу с симметричной доменной структурой в направлении сегнетоэлектрической оси постоянного электрического поля напряженностью E в кристалле возникает ненулевая поляризация. С увеличением поля E зависимость $P(E)$ сначала имеет линейный характер (при слабых полях), а затем становится нелинейной. Наиболее крутому участку кривой $P(E)$ соответствует интенсивная перестройка доменной струк-

туры. Когда поляризация становится равной спонтанной P_S , ее рост практически прекращается в результате процессов ионного и электронного смещения, при этом кристалл становится однодоменным. Значение P_S может быть получено экстраполяцией зависимости $P(E)$ к значению $E = 0$. При обращении поля E в нуль вещество сохраняет остаточную поляризацию P_r . Под действием противоположно направленного поля, равного коэрцитивной силе E_c , поляризация становится равной нулю. Кривая деполяризации, полученная при уменьшении напряженности внешнего электрического поля E , приложенного к сегнетоэлектрику, не будет совпадать с кривой поляризации. Это обусловлено тем, что уменьшение поляризации P будет отставать от уменьшения напряженности E . Кривая, выражающая зависимость поляризации сегнетоэлектрического кристалла от напряженности внешнего поля $P(E)$, называется диэлектрическим гистерезисом (рисунок 1.2) [168].

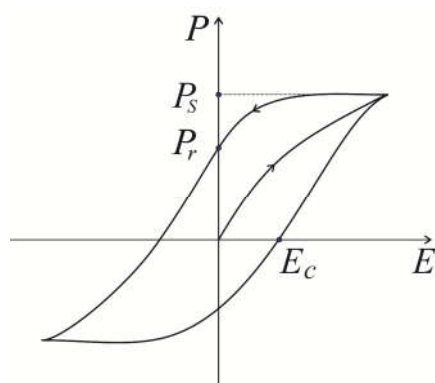


Рисунок 1.2 – Общий вид гистерезисной зависимости поляризации P от напряженности поля E

Увеличение температуры в сегнетоэлектриках приводит к фазовым переходам, при которых изменяется симметрия кристаллической решетки и, как следствие, изменяется спонтанная поляризация, вплоть до ее полного исчезновения. Температура, при которой сегнетоэлектрик превращается в обычный диэлектрик (исчезает доменная структура), называется температурой Кюри T_C , а точка перехода – точкой Кюри. Фаза после T_C носит название

параэлектрической. Существуют сегнетоэлектрики, у которых две точки Кюри – верхняя и нижняя. Такие вещества сохраняют свои сегнетоэлектрические свойства в интервале температур, заданном верхней и нижней границами. Например, для сегнетовой соли существуют две точки Кюри -15 C° и $+22.5\text{ C}^\circ$.

Термодинамической теорией, позволяющей количественно описать поведение материала в окрестности фазового перехода первого и второго рода, является теория структурных фазовых переходов Ландау. На основе этой теории Гинзбург и Девоншир развили феноменологическую термодинамическую теорию сегнетоэлектричества [172]. Она описывает структурные фазовые переходы, ассоциированные с изменением порядка расположения атомов или с изменением кристаллографической сингонии образца.

Согласно концепциям термодинамической теории, состояние равновесной сегнетоэлектрической системы может быть задано фиксированным набором величин: поляризация P , электрическое поле E , температура T , механические деформации η и напряжение σ . Как правило, поляризация и деформация вводятся в рассмотрение как внутренние параметры, электрическое поле и механическое напряжение – как внешние.

Основной тезис термодинамической теории сегнетоэлектриков формулируется так: при заданных внешних параметрах свободная энергия сегнетоэлектрика F может быть представлена как функция десяти переменных (шесть компонент тензора деформаций, три компоненты поляризации и одна скалярная величина – температура). Вторым фундаментальным аспектом является априорное требование – величины зависимых переменных соответствуют минимуму свободной энергии F для равновесного состояния системы.

В окрестности температуры Кюри функция F раскладывается в степенной ряд, параметры которого могут быть рассчитаны с использованием экспериментальных данных или на основе первопринципного моделирования. Условия centrosymmetrichности неполярной фазы позволяют уменьшить число членов ряда. В частном случае, когда приложенные механические напряжения отсутствуют, индукция направлена вдоль одной из кристаллографических осей, для

одноосного сегнетоэлектрика плотность свободной энергии можно разложить по степеням единственной компоненты поляризации [172]:

$$F = \frac{1}{2}AP^2 + \frac{1}{4}BP^4 + \frac{1}{6}CP^6 - EP, \text{ Дж/м}^3, \quad (1.12)$$

где $P=P(x,t)$ – спонтанная поляризация, Кл/м²; $A=A_0(T - T_{CW})$, м/Ф; B , м⁵/(Кл²·Ф); C , м⁹/(Кл⁴·Ф) – термодинамические постоянные.

Равновесной конфигурации будет соответствовать минимум плотности свободной энергии F : $\frac{\partial F}{\partial P} = 0$. Выражение (1.12) позволяет определить зависи-

мость электрического поля E от поляризации P : $E = AP + BP^3 + CP^5$.

Линейную диэлектрическую восприимчивость выше точки перехода можно определить, дифференцируя последнее по P и принимая $P = 0$:

$$\chi = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{1}{\varepsilon_0 A}. \quad (1.13)$$

Согласно теории Ландау – Гинзбурга – Девошира, предполагается, что в окрестности температуры Кюри $T_{\tilde{N}}$ коэффициент A зависит от температуры

$$A = A_0(T - T_{CW}), \quad (1.14)$$

в то время как другие коэффициенты в разложении термодинамического потенциала от температуры не зависят. Температура T_{CW} , при которой A изменяет знак, не всегда совпадает с температурой Кюри. Для большинства сегнетоэлектриков будет справедлив закон Кюри – Вейсса (для χ) при $T > T_{CW}$:

$$\frac{1}{\chi} = \varepsilon_0 A_0(T - T_{CW}). \quad (1.15)$$

Изменение свободной энергии между параэлектрической фазой $T \gg T_{CW}$ и сегнетоэлектрической $T \ll T_{CW}$ зависит от знака коэффициента B . При $T = T_{CW}$, если $B > 0$, происходит фазовый переход II рода, а если $B < 0$, то переход I рода.

В связи с высокой востребованностью сегнетоэлектриков в радиотехнике, акустике, оптоэлектронике, пиро- и пьезотехнике, вычислительной технике

исследование фазовых переходов, неравновесной динамики доменной структуры и гистерезисных явлений имеет ключевое значение. На сегодняшний день накоплен большой объем материала по экспериментальному и теоретическому изучению динамики доменной структуры и процессов переключения поляризации. Среди экспериментальных методик выделяют: метод химического травления, метод декодирования, зондовые методы, методы на основе микроскопов (поляризационный, электронный, атомно-силовой) и многие другие [168, 172, 173]. В числе основополагающих теоретических концепций, используемых для описания процессов переключения поляризации и динамики доменных границ, можно отметить следующие: подход к описанию кинетики перестройки доменной структуры и токов переполаризации, основанный на теории Колмогорова – Авраами [174-177]; фундаментальные соотношения, полученные на основе термодинамической теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира [172, 178-180, 2]; аналитические и решеточные (стохастические) модели Изинга и Гейзенберга [181], известные своим применением в описании свойств ферромагнетиков и мультиферроиков [182, 183]. В методологической основе реализации перечисленных подходов лежат самые разнообразные математические методы: методы аппроксимации функций, аналитические и численные методы решения дифференциальных уравнений, метод Монте-Карло, методы теории перколяции, клеточные автоматы и др.

Теория кристаллизации Колмогорова – Авраами как теоретическая основа была применена для моделирования токов переключения поляризации в сегнетоэлектриках [184]. Модель Колмогорова – Авраами – Ишибаши была разработана для моделирования тока переключения поляризации посредством статистического описания зарождения и роста обращенных доменов в сегнетоэлектриках [185]. Эта модель считается наиболее подходящей для объемных кристаллических материалов и чистых эпитаксиальных пленок. В то же время разработана модификация модели Колмогорова – Авраами для описания переключения поляризации в поликристаллических неупорядоченных тонких сегнетоэлектрических пленках [186]. Позднее подход Колмогорова –

Аврами был расширен с учетом взаимодействия растущих доменов с границами кристаллов из-за автомодельности процесса [187, 176]. Модель движения доменной границы в сегнетоэлектриках под воздействием электронного пучка описана в [188].

Существуют многочисленные исследования, посвященные моделированию переключения поляризации и перемещения доменных границ в сегнетоэлектриках [172, 189, 190]. В основе представленных моделей лежит термодинамическая теория Ландау – Гинзбурга – Девоншира. Так, в работе [191] на основе зависимой от времени модели Ландау – Гинзбурга проведено исследование по измерению скорости движения и толщины доменной стенки сегнетоэлектрика.

Феноменологическая теория ограниченного диссипацией движения сегнетоэлектрических доменных границ под действием внешнего поля смещения применена к случаю 90° доменной стенки в бездефектном кристалле BaTiO_3 [192]. Количественная оценка предельной подвижности получена в рамках уравнения движения Ландау – Халатникова и обобщенной модели Гинзбурга – Ландау – Девоншира с использованием параметров модели, оцененных по результатам независимых экспериментов.

В нашем исследовании обобщенное уравнение Ландау – Халатникова (или зависящее от времени уравнение Ландау – Гинзбурга), описывающее переключение поляризации в сегнетоэлектриках, рассматривалось как с теоретической, так и с вычислительной точки зрения [2].

Авторы [193], используя двумерное моделирование фазового поля сегнетоэлектрических пленок, которое включает энергию Ландау – Девоншира, градиентное слагаемое и электрическую энергию деполяризации, а также промежуточное электрическое граничное условие, провели моделирование доменной структуры сегнетоэлектрических пленок.

Полное и многоаспектное изложение всех теоретических направлений выходит за рамки данного обзора. Но обратим внимание на подходы, представляющие фрактально-синергетическую концепцию в исследованиях

доменной структуры и динамических откликов сегнетоэлектриков. Сегнетоэлектрики представляют собой интересные объекты исследования с точки зрения приложения теории самоорганизации, поскольку доменные конфигурации сегнетоэлектриков обладают самоподобным строением, а динамические характеристики переключения поляризации проявляют эффекты памяти.

Как было показано рядом независимых авторов, доменные конфигурации сегнетоэлектрических систем отличаются как фрактальным строением, так и самоподобным характером зародышеобразования и развития доменов.

В обзоре К. Uchino [194] представлена фрактальная концепция для объяснения природы сегнетоэлектрических явлений и их важнейших свойств, таких как диэлектрическая проницаемость, диэлектрические потери, гистерезис, акустическая эмиссия и др.

В цикле работ Т. Ozaki [195] исследованы фрактальные свойства и проведена аналогия со строением множества Кантора для геометрии доменных конфигураций кристаллов дигидрофосфата калия (KDP), дигидрофосфата цезия (CDP) и триглицинсульфата (TGS) на основе анализа растровых микроскопических изображений. Так, одномерный профиль изменения контраста доменов характеризуется размерностью $D=0.756$.

В ранней работе Д.В. Пелегова [196] предложено использовать концепции фрактального формализма для описания кинетики фазовых превращений в сегнетоэлектриках как физических систем с ограниченным диапазоном скейлинга. Примером такой системы послужили пленки и керамика цирконата-титаната свинца (PZT). Автор ввел зависимость фрактальной размерности от времени и изучил влияние ограниченного диапазона масштабирования на значение фрактальной размерности, применяя методы фрактального анализа кривых (метод Минковского, RMS-метод). В работах Н.М. Галияровой и соавторов [197] на основе анализа микроскопических изображений и диэлектрических откликов показано, что сегнетоэлектрики (сегнетова соль, титанат бария, TGS, CDP, молибдат гадолиния) являются объектами с фрактальной доменной

структурой, образующейся и эволюционирующей в процессе самоорганизации термодинамической системы. Для анализа использованы фрактографические методы покрытий, в том числе метод «островов среза».

Различными авторами с использованием фрактальной теории были изучены также эффекты усталости и наноразмерные домены в сегнетоэлектрических пленках [198, 199]; фрактальная динамика доменов [189]; временная зависимость релаксации поляризации и ее влияние на форму доменов и изменение шероховатости доменных стенок сегнетоэлектрических пленок [200]; размерные эффекты в титанате бария, характеризующиеся различными значениями фрактальных размерностей [201]; индуцированные полем смещения доменные стенки в титанате бария и гетероструктурах, описываемые различной фрактальной размерностью при различных внешних полях [202].

Фрактальная характеристика структуры тонких пленок цирконата-титаната свинца по данным атомно-силовой микроскопии описана в работе Y.-R. Jeng и соавторов [203]. Фрактальная размерность исследованных структур варьировалась в диапазоне 2.1–2.5, сложность структур увеличивалась при отжиге материалов.

В работе [204] на основе расчета фрактальной размерности Хаусдорфа исследованы характеристики доменных стенок в тонких пленках мультиферроика феррита висмута BiFeO_3 .

Методы мультифрактального анализа были взяты на вооружение при исследовании особенностей геометрического строения доменов различных сегнетоэлектрических систем. В работе В.В. Титова и соавторов [205] проведено описание формирования и эволюции сегнетоэлектрических керамик на основе метода мультифрактальной параметризации и анализа бинаризованных цифровых изображений.

В исследованиях А.Г. Масловской и соавторов методами покрытий, мультифрактальной параметризации и максимумов модулей коэффициентов вейвлет-преобразования исследованы статические доменные конфигурации типичных сегнетоэлектриков (с распределением фрактальной размерности в диа-

пазоне $D = 1.6 - 1.9$), а также закономерности динамики доменов кристаллов ТГС при электронно-индуцированном переключении поляризации. В последнем случае показано, что наблюдаемый эффект эрозии доменов при воздействии электронного пучка приводит к увеличению фрактальной размерности [206]. В работе [207] в рамках метода максимумов модулей вейвлет-преобразования разработаны алгоритмы фильтрации и маркировки линий локальных экстремумов, апробированные для оценки скейлинговых характеристик растровых изображений доменных структур кристаллов ТГС. Вычислительный эксперимент проведен на примере изображений кристаллов, находящихся при комнатной температуре, прогретых до температуры Кюри и полученных в результате глубокого отжига. Показано, что отжиг при температуре $T=70^\circ\text{C}$ вызывает модификацию геометрии «псевдо-доменов» и их выстраивание в вытянутые цепочки, характеризующиеся узким мультифрактальным спектром. Это означает, что остаточный поляризационный контраст сложно организован и более «упорядочен», чем исходная доменная структура.

Другим важным направлением синергетического подхода применительно к физике сегнетоэлектриков можно считать исследование фрактальных закономерностей динамических откликов кристаллов.

Так, Н.М. Галияровой [167] представлено исследование механизмов движения доменных границ, диэлектрические отклики реальных сегнетоэлектриков в области низких и инфранизких частот и проявление их фрактальных закономерностей. Установлено, что существуют универсальные типы диэлектрических откликов, отличающиеся распределением времен релаксации, вызванные фрактальностью систем. Автором введены в рассмотрения процессы самоорганизации за счет коллективных процессов в сегнетоэлектрических материалах, обуславливающих закономерности поведения диэлектрических спектров, механизмов поляризации в средних и сильных полях, явления стохастичности и появление отрицательных диэлектрических потерь.

В работе S. Tsukada и др. [208] рассматривались свойства самоорганизации неоднородной доменной структуры сегнетоэлектрика-релаксора

$\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ в режиме динамического теплового нагрева по данным рассеяния рентгеновских лучей. Авторы работы [209] диагностировали фрактальные свойства другого сегнетоэлектрика-релаксора $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ по данным спектроскопии комбинационного рассеяния света. Оценена фрактальная размерность $D=2.6$, при которой осуществляется перколяционный переход так называемых полярных нанообластей.

В работе В. Tadić [210] представлена 3D-модель Изинга для исследования процессов формирования гистерезисной зависимости поляризации от приложенного поля, с учетом вариации размеров доменов. Автор провел анализ шумовой компоненты электрических токов с использованием метода Фурье (шумы Баркгаузена – характерные всплески на кривой тока переключения поляризации, вызванные неоднородной перестройкой доменной структуры).

Спектральные мультифрактальные характеристики токов переключения поляризации и эволюция доменов кристалла ТГС при электронном облучении исследованы в работах Т.К. Барабаш [211, 212]. Используются методы мультифрактального флуктуационного анализа и методом максимумов модулей коэффициентов вейвлет-преобразования. Отмечается, что зависимость импульса тока переключения поляризации от времени, отражающая процессы перестройки доменной структуры под действием электронного облучения, характеризуется персистентным поведением: показатель Херста $H=0.73$ и фрактальная размерность $D = 1.27$. Этот факт соответствует проявлению эффектов долговременной памяти в сегнетоэлектрических материалах. Рассчитанный мультифрактальный спектр размерностей дает вариацию значений фрактальной размерности в широком диапазоне $0.9 \leq D \leq 1.9$.

В серии публикаций В.Я. Шура и соавторов (например, [175, 213]) предложен фрактальный подход к моделированию кинетики фазовых переходов, описаны результаты исследования фрактальной геометрии элементов формируемых доменных структур с использованием метода покрытий, метода Фурье и метода Херста для анализа динамических характеристик процессов переключения (токов переключения и шумовых компонент) как временных рядов.

Резюмируя содержание данного подраздела, можно заключить: современные исследования, базирующиеся на аппарате фрактального анализа изображений и временных рядов, свидетельствуют, что сегнетоэлектрические материалы проявляют фрактальные свойства геометрии доменных конфигураций, немарковский характер при формировании динамических откликов, свойства самоорганизации при перестройке доменов и эффекты временной памяти. Указанные свойства – следствие сложной и неоднородной пространственной структуры сегнетоэлектриков, стохастичности процесса зародышеобразования и роста доменов, многофазного состава, наследственности и гистерезисных свойств. В целом, фрактально-синергетическое направление в исследовании сегнетоэлектриков обладает существенным научным потенциалом и является весьма перспективным.

1.2.4. Дробно-дифференциальные модели динамических откликов и эрдитарность в сегнетоэлектрических материалах

Поскольку доменные структуры сегнетоэлектрических материалов отличаются фрактальными и мультифрактальными свойствами, а динамические характеристики переключения поляризации проявляют эффекты памяти, то данный класс объектов представляется весьма интересным с точки зрения приложения дробно-дифференциальной теории. Как уже было отмечено, в последние десятилетия свойства самоподобия и сложного скейлинга геометрии доменных конфигураций и эффекты памяти сегнетоэлектриков интенсивно исследуются с применением методов фрактального и мультифрактального анализа изображений и временных рядов. Дробно-дифференциальный аппарат, позволяющий моделировать динамические отклики, не является столь развитым. Можно назвать несколько важнейших результатов, полученных в рамках данной тематики отечественными и зарубежными авторами.

G.W. Bohannan [214] выдвигается гипотеза о том, что динамика диэлектриков может быть теоретически описана с использованием дробно-дифференциального подхода. Автором предложена серия математических моделей, формализующих нестационарные поляризационные процессы в диэлек-

триах. Так, учет эффектов памяти предложен на основе введения дробной производной по времени в уравнение Коула – Коула, лежащего в основе релаксационной модели для описания диэлектрической релаксации в полимерах:

$$(1 + \tau^q {}_0D_t^q)P(t) = (\varepsilon_s + \varepsilon_\infty \tau^q {}_0D_t^q)E(t), \quad (1.16)$$

где $\varepsilon_s = (dP/dE)_A \varepsilon_0^{-1}$ и $\varepsilon_\infty = (dP/dE)_\varphi \varepsilon_0^{-1}$ – низкочастотный и высокочастотный

пределы дисперсии; ε_0 – электрическая постоянная; $A = -\frac{d\Phi}{d\varphi}$ – сродство; Φ –

плотность термодинамического потенциала диэлектрика; φ – степень поляризации; ${}_0D_t^q$ – оператор дробного дифференцирования Римана – Лиувилля; q – порядок дробной производной.

На базе этого подхода автор предлагает несколько модифицированных моделей. Для численной реализации математической модели (с программным модулем, написанным на языке C++) использовано конечно-разностное представление на основе формулы Грюнвальда – Летникова. Результаты продемонстрированы на примере моделирования диэлектрических характеристик различных полимеров, в том числе поливинилиденфторида (PVDF) для широкого ряда частот.

Н.М. Галияровой [167] предложен фрактальный аналог соотношений неравновесной термодинамики для описания диэлектрических спектров двухфазных или полидоменных сегнетоэлектрических систем. На основе замены обычных производных производными дробного порядка в кинетические уравнения введено уравнение вида

$$D^\alpha \varphi = -\Gamma^\alpha \frac{d\Phi}{d\varphi}, \quad (1.17)$$

где D^α – оператор дробного дифференцирования; $0 < \alpha < 1$ – порядок дробной производной; Γ – феноменологический коэффициент; Φ – плотность термодинамического потенциала полидоменного сегнетоэлектрика; φ – степень поляризации (объемная доля переполаризующейся части образца).

Получены фрактальные аналоги релаксационных уравнений, а также дробно-дифференциальная модификация уравнения колебаний, аналитическое решение которого приводит к уравнению дисперсии:

$$\varepsilon^* - \varepsilon_\infty = \Delta\varepsilon_0 \left[1 + (i\omega\tau_\gamma)^\gamma + (i\omega\tau_\beta)^{1-\beta} \right]^{-1}, \quad (1.18)$$

где $0 < \beta < 1$, $\gamma > 1$ – порядки дробного дифференцирования; τ – параметр, имеющий смысл наиболее вероятного времени релаксации; $\Delta\varepsilon_0$ – релаксационная сила; $\varepsilon^* - \varepsilon_\infty$ – диэлектрическая дисперсия.

Выражение позволило точно описать резонансный спектр. Автор рассматривает физический смысл дробной производной как изменение закона диссипации энергии при движении границ, находящихся в разных локальных условиях. Подобное модельное описание эквивалентно учету функций памяти (дробно-экспоненциального или дробно-степенного вида) и, как следствие, выражает немарковский, зависящий от предыстории процесса, релаксационный характер поляризации [167]. Математический аппарат дробного дифференцирования позволил установить антиперсистентный характер движения доменных стенок или аномальный характер диффузии дефектов, инициирующих эффекты торможения при движении доменных границ.

Одной из широко используемых математических моделей переключения поляризации сегнетоэлектриков является модель Колмогорова – Аврамы, известная также своими многочисленными модификациями. Модель позволяет описать ток переключения поляризации как отношение доли переключенного объема $V(t)$ образца к полному объему [185]:

$$I(t) = 2P_S \cdot S \cdot \frac{dV(t)}{dt}, \quad (1.19)$$

где S – площадь электрода образца, м^2 ; P_S – спонтанная поляризация, $\text{Кл}/\text{м}^2$.

Р.П. Мейлановым и С.А. Садыковым [215] предложена модель формирования токов переключения поляризации на основе аналитических представлений как дробно-дифференциальная модификация модели Колмогорова – Аврамы. Постановка задачи моделирования основывается на результатах диагности-

ки фрактальных характеристик механизмов перестройки доменов в процессе переключения поляризации и эффектов памяти сегнетоэлектриков. Для формализации эффектов памяти в модель (1.19) введена дробная производная по времени [215, 216]:

$$\bar{I}(\tau) = \frac{2P_s \cdot S}{t_0} \frac{d^\alpha}{d\tau^\alpha} V(\tau), \quad (1.20)$$

где t_0 – время переключения, с; α – порядок дробного дифференцирования, $\alpha \in (0, 1]$, значение $\alpha = 1$ соответствует отсутствию эффектов памяти; $\xi = t / t_0$ – безразмерное время; $2P_s \cdot S \cdot V(\xi)$ – величина заряда переключения, Кл.

Авторы, используя аппроксимацию для $V(\xi) = 1 - \exp(-\xi)$, приходят к следующему аналитическому представлению для временной зависимости тока переключения:

$$I(\xi) = \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \cdot \xi^{1-\alpha} \cdot \exp(-\xi) \cdot M(1 - \alpha, 2 - \alpha, \xi), \quad (1.21)$$

где $I(\xi) = \frac{\bar{I}(\xi) \cdot t_0}{2P_s \cdot S}$ – ток переключения; $M(a; b; z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера:

$$M(a_1, b_1, z) = 1 + \frac{az}{b} + \frac{(a)_2 z^2}{(b)_2 2!} + \dots + \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} + \dots,$$

где $(a)_n = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1)$, $(a)_0 = 1$, $(b)_n = b(b+1)(b+2)\dots(b+n-1)$, $(b)_0 = 1$.

Указанный подход был развит в серии работ А.Г. Масловской и соавторов применительно к модели формирования поляризационного отклика сегнетоэлектрика в режиме инжекционного воздействия электронным пучком средних энергий. В ранней работе [217] в рассмотрение введена классическая детерминированная модель, основанная на модификации подхода Колмогорова – Авраами

$$I(t) = \frac{2P_s}{L} \cdot S \cdot \frac{dx(t)}{dt}, \quad (1.22)$$

и выражения, определяющего скорость движения доменной границы:

$$v = v_m \exp\left(-\frac{\delta}{E}\right), \quad (1.23)$$

где v_m – максимальная скорость движения стенки при $E \rightarrow \infty$, м/с; δ – поле активации, В/м.

Итоговая модель была сформулирована в виде задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, определяющего динамику движения стенки (изменение координаты со временем и, как следствие, ток переключения). Дробно-дифференциальная модификация данной модели предложена в совместных исследованиях А.Г. Масловской и Т.К. Барабаш [218]. В основу математической модели положена начальная задача для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения, определяющего динамику изменения положения доменной границы согласно (1.23), следующего общего вида:

$$\frac{d^\alpha s(\tau)}{d\tau^\alpha} = f(\tau, s), \text{ с начальным условием } s(\tau_0) = s_0, \quad (1.24)$$

где $s(\tau)$ – безразмерное расстояние – координата доменной стенки; τ – безразмерное время; α – порядок дробной производной Грюнвальда – Летникова.

В алгоритм введен стохастический характер роста доменов, моделируемый с помощью метода Монте-Карло. В настоящей работе предложено развитие данного подхода [70, 68] в концепции построения схем более высокого порядка точности, на основе определения дробной производной Капуто и введения особого механизма стохастической динамики доменов.

Связь между устойчивой реакцией на переменный ток и переходной характеристикой была продемонстрирована с помощью дробного исчисления. В трудах группы D. Guyomar [219-221] рассматриваются прямая и обратная квазидинамические математические модели для описания динамики сегнетоэлектрического гистерезиса на основе дробных производных, показана зависимость гистерезиса от частоты. Например, обратная модель задается системой соотношений:

– если $\frac{dP}{dt} > 0$, то $P_i(t + dt) = f(E(t + dt) - E_{c_i})$,

– если $\frac{dP}{dt} < 0$, то $P_i(t + dt) = f(E(t + dt) + E_{c_i})$,

$$f(E) = \sigma \tan^{-1}\left(\frac{E}{\gamma}\right), \quad E = E_{static} + \rho \frac{d^\alpha P}{dt^\alpha},$$

где σ , γ , ρ – термодинамические параметры; E_c – коэрцитивное поле; α – порядок дробной производной Грюнвальда – Летникова.

Для вычисления производной используется конечно-разностная аппроксимация. Результаты демонстрируют приемлемое качественное и количественное согласование для различных сегнетоэлектрических материалов, в том числе для цирконата-титаната свинца.

В. Zhang [222] предложен идейно близкий подход, состоящий в использовании дробной производной для описания поляризационного гистерезиса на основе прямой и обратной квазидинамических моделей. Автор использует также численное вычисление производной дробного порядка на основе формулы Грюнвальда – Летникова. Проведен сравнительный анализ развиваемой модели с известной и широко используемой моделью Прејзаха. Результаты продемонстрированы в сравнении с данными эксперимента для пьезокерамики.

В серии исследований [120-122], [124-127] предложена дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова и вычислительные схемы для ее реализации, позволяющие проводить исследование гистерезисной зависимости поляризации от приложенного поля.

1.3. Основные выводы

В первой главе представлен аналитический обзор литературных данных по фундаментальным основам и прикладным аспектам предметной области – численным методам и алгоритмам реализации дробно-дифференциальных мо-

делей динамических откликов фрактальных физических систем, в частности применительно к характеристкам особого класса функциональных диэлектриков – сегнетоэлектрических материалов.

Описаны базовые положения теории дробно-дифференциального исчисления, проведен обзор основных определений, свойств и способов аппроксимации производных нецелого порядка. Представлен анализ работ, посвященных численным методам решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка и начально-граничных дробно-дифференциальных задач математической физики. Особое внимание уделено вопросам математического моделирования процессов аномальной диффузии.

Показаны концептуальное различие и связь между фрактальным и дробно-дифференциальным подходами к исследованию физических систем со сложной структурой и динамикой. Приведены примеры приложений теории дробного дифференцирования для математического моделирования фрактальных физических систем. Рассмотрены научные труды о фрактально-синергетическом подходе в задачах исследования структуры и свойств сегнетоэлектриков. На основе экспериментальных и теоретических исследований можно заключить, что по ряду характеристик сегнетоэлектрические материалы ведут себя как эрдитарные среды с фрактальной структурой. В числе модельных представлений, позволяющих прогнозировать диэлектрические отклики и кинетику переключения поляризации сегнетоэлектриков с учетом фрактальности строения доменов и присутствия эффектов памяти в таких материалах, можно выделить модели, основанные на использовании аппарата дробного дифференцирования.

В целом показано, что различным аспектам построения и реализации математических моделей динамических откликов фрактальных физических систем на основе дробно-дифференциального подхода посвящен достаточно широкий круг работ, однако, целый ряд вопросов (в частности, применительно к моделированию сегнетоэлектрических явлений) остается далеким от полного разрешения.

Известные дробно-дифференциальные модели, описывающие диэлектрические и поляризационные 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 концепты, описывающие механизмы поведения сегнетоэлектриков, включают аппарат дифференциальных уравнений и дают возможность прогнозировать нестационарные отклики таких систем. Однако в современной литературе практически не представлены дробно-дифференциальные модели динамических откликов сегнетоэлектрических материалов, формализуемые с помощью дифференциальных уравнений дробного порядка. Расширение теоретического базиса, с учетом эрдитарности процессов и самоподобия доменных структур в сегнетоэлектриках, в свою очередь, приведет к необходимости построения вычислительных схем для решения дифференциальных уравнений с дробными производными.

Таким образом, дополнительного исследования требуют следующие задачи: формализация дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов сегнетоэлектриков; построение эффективных и высокоточных вычислительных схем, предназначенных для реализации моделей; разработка комплекса программ, позволяющего проводить вычислительные эксперименты по исследованию динамических откликов сегнетоэлектрических материалов.

Специфика рассматриваемых проблем определяет **общую концепцию** настоящего исследования – развитие дробно-дифференциального подхода для математического и компьютерного моделирования динамических процессов фрактальных физических систем. **Объектом** исследования являются динамические отклики фрактальных физических систем, **предметом** исследования – численные методы и алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей динамических откликов сегнетоэлектриков.

Основная гипотеза исследования – использование дробно-дифференциальной концепции, представляющей в некотором смысле обобщение целочисленных аналогов, значительно расширяет спектр функциональных возможностей методологии математического моделирования и предоставляет «гибкий инструмент» для прогнозирования поведения фрактальных физических систем. Прототипом и сателлитом проблематики предметной области является задача моделирования поляризационных характеристик сегнетоэлектриков как фрактальных физических сред с памятью.

2. ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ОТКЛИКОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

В настоящее время методы и средства математического и компьютерного моделирования – неотъемлемые и перспективные составляющие при решении научных и инженерных задач, связанных с обоснованием законов и механизмов формирования откликов и прогнозированием поведения сложных физических систем. Внимание многих современных исследователей сосредоточено на изучении динамических физических систем, обладающих фрактальными свойствами и демонстрирующих эффекты памяти. Развитие фрактально-синергетического подхода в физике конденсированного состояния представлено различными концепциями, составляющими теоретический базис подобных исследований: теория самоорганизации и хаоса (включая анализ устойчивости) динамических систем (например, ансамблей дефектов); фрактальный анализ самоподобных структур и динамических данных, заданных временными рядами; стохастический, перколяционный и клеточно-автоматный подходы для дискретно-имитационного моделирования поверхностных явлений, кластерных структур и процессов агрегации, явлений роста, процессов протекания в пористых средах и др.

Среди множества фрактальных физических сред, проявляющих эффекты памяти, в настоящем исследовании внимание будет сосредоточено на представителях группы функциональных диэлектриков – сегнетоэлектрических материалах. Как было показано в обзорной главе, сегнетоэлектрики обладают фрактальными геометрическими свойствами организации доменных структур и демонстрируют эффекты памяти. Очевидно, что рассмотрение всех динамических процессов, протекающих в сегнетоэлектриках в неравновесных условиях, не может быть проведено в рамках одного исследования. Фокус приложений настоящей работы составляет описание законов и механизмов, обуславливающих формирование поляризационных откликов сегнетоэлектрических материалов в

режимах инъекции, интенсивного нагрева и воздействия внешнего поля. Прикладные области рассматриваемых математических моделей достаточно многообразны и перспективно важны: микро- и нанодоменная инженерия (управляемое переключение доменов под действием инжектированного пучка электронов); пироэлектрические измерения; приборная электроника, использующая в качестве функциональных элементов сегнетоэлектрики и основанная на эффекте переключения.

Общая методология построения и реализации математической модели, как известно, требует последовательного проведения следующих этапов: обследование предметной области (определение объекта моделирования, выявление управляющих параметров системы, установление законов, которым подчиняется объект); математическая постановка задачи моделирования; описание алгоритма; программная реализация и анализ результатов вычислительных экспериментов.

Настоящая глава посвящена детальному исследованию предметной области – описанию концептуальных постановок задач и математической формализации рассматриваемых процессов, формулировке математических постановок задач моделирования. Результаты, представленные в главе, изложены в работах [2, 70, 107, 118-128] автора.

2.1. Гибридная фрактально-стохастическая модель кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции

К основным интегральным характеристикам динамики изменения полярного состояния сегнетоэлектриков относят: петли гистерезиса, ток и плотность тока переключения поляризации, пиросигнал, пьезосигнал, рассеяние света. Особое место среди них занимает ток переключения поляризации. При правильной трактовке форма импульсов тока может дать представление о процессе переключения поляризации, определить отдельные

вклады элементарных механизмов в динамику доменов и произвести оценку некоторых параметров, отвечающих за развитие процессов в целом.

Исследование механизмов переключения поляризации сегнетоэлектрических материалов, как правило, основано на приложении разности потенциалов к металлическим электродам, нанесенным на верхнюю и нижнюю грани кристалла. В данных экспериментальных наблюдениях ток переключения поляризации фиксируют при неравновесной внешнем воздействии плавно меняющихся синусоидальных полей или импульсных полей различной формы – прямоугольных, пилообразных, трапециевидных и др. Стандартный набор экспериментальных методик применяют для анализа кинетики доменной структуры и переключения поляризации. Кроме того, в практике сегнетоэлектрических исследований нередки случаи разработки нестандартных методов исследования перестройки доменных структур и регистрации возникающих при этом поляризационных откликов [172].

Введем в рассмотрение процесс переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов в режиме токов электронно-стимулированной поляризации. Данная методика была разработана А.А. Согром и И.Б. Копыловой [223], математическая модель процесса переключения предложена А.Г. Масловской [217] и развита Т.К. Барабаш [218]. Метод позволяет одновременно регистрировать ток переключения и наблюдать процесс переключения поляризации, индуцированный воздействием инжекцией пучка электронов средних энергий (1-40 кэВ) в приповерхностный слой сегнетоэлектрика. Указанная методика растровой электронной микроскопии также дает возможность визуализировать динамический потенциальный контраст – микрофотографии сегнетоэлектрических доменных структур. Инжекция электронов лежит в основе одной из экспериментальных методик микро- и нанодоменной инженерии – управляемом переключении доменных структур сегнетоэлектриков под действием электронного зонда РЭМ. Методика применялась рядом независимых исследователей [224-226] и позволила создавать доменные структуры с заранее проектируемыми конфигурациями,

используя локальное воздействие электронного зонда.

Представим развитие дробно-дифференциальной модели процесса переключения поляризации сегнетоэлектрика в условиях электронного облучения, предложенного [218] на основе конструирования эффективных вычислительных схем (как будет изложено в главе 3) и модификации подхода к симуляции процесса зародышеобразования. Математический аппарат реализации модели будет строиться с использованием гибридного фрактально-стохастического подхода, предполагающего включение в вычислительный алгоритм процедуры метода Монте-Карло для организации стохастического процесса зародышеобразования в кристалле и реализацию дробно-дифференциальной модели движения доменной границы сегнетоэлектрика на основе модифицированной вычислительной схемы типа «предиктор-корректор» в концепции определения Капуто [69, 70].

2.1.1. Концептуальная постановка задачи моделирования электронно-индуцированного процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков

Приведем краткое описание физического объекта, для которого требуется разработать математическую модель. Будем рассматривать процесс переключения поляризации одноосного сегнетоэлектрика и формирование тока переключения поляризации при диагностике методом растровой электронной микроскопии.

В методе электронно-стимулированной поляризации [223, 227] 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 σ , σ_1 и σ_2 соответственно. 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 . Схема взаимодействия электронов с материалом показана на рисунке 2.1 *a*.

Теоретическое описание поляризационного тока $I(t)$ можно ввести с использованием модели Колмогорова – Авраами (1.16) [185, 252], в которой ток определяется отношением переключенного объема к полному объему образца. В данном случае это соотношение имеет следующий вид:

$$I(t) = 2 \frac{P_s S}{L} \frac{dx}{dt}, \quad v = v_m \exp\left(-\frac{\delta}{E_2}\right), \quad (2.1)$$

где P_s – спонтанная поляризация, Кл/м²; $S=2y \cdot d$ – площадь электрода, м²; L – толщина кристалла, м; $v = dx/dt$ – скорость движения доменной стенки, м/с; $x(t)$ – положение (координата) доменной границы, м; v_m – максимальная скорость движения стенки при $E \rightarrow \infty$, м/с; δ – поле активации, В/м.

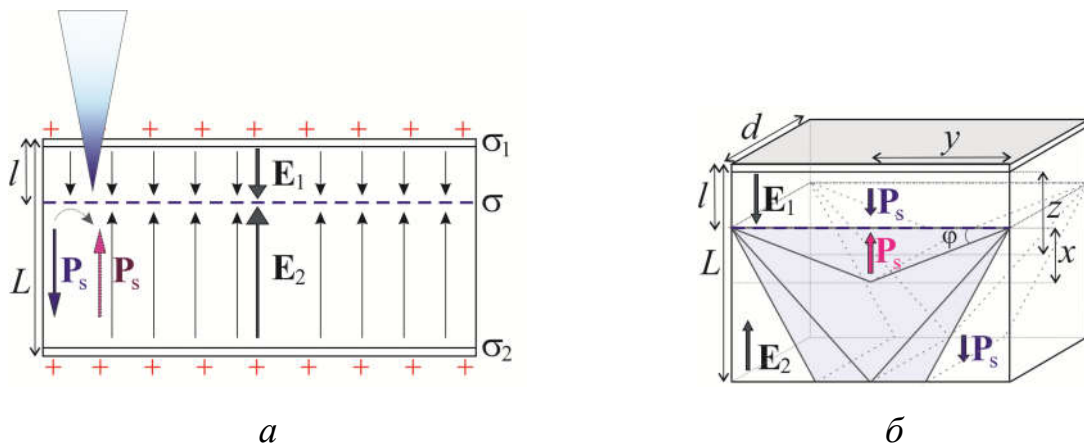


Рисунок 2.1 – Схема взаимодействия источника с образцом – *а*;
геометрическая схема модели движения доменной границы – *б*
в инжекционном режиме

В практике моделирования кинетики доменной структуры рассматривают два основных механизма переключения поляризации – боковой рост и сквозное прорастание доменов. Изображения доменных структур, визуализируемые в инжекционном режиме, демонстрируют незначительное изменение размеров и эффект эрозии доменов [217]. Последнее позволяет включить в модель механизм сквозного роста доменов – расширение переключенной области осуществляется за счет прорастания клиньев с фиксированной шириной основания $2y$ и

меняющимся углом наклона доменной границы φ . Геометрическая схема роста доменов показана на рисунке 2.1 б.

Учтем, что включение источника в объекте, строго говоря, не является мгновенным, т.е. процесс переключения начинается в момент времени $t_0 > 0$, близкий к нулевому значению, и завершается при достижении координатой середины клина $z(t) = l + x(t)/2$ нижней грани кристалла L .

Используя соотношения (2.1) и выражая абсолютную величину напряженности поля E_2 в необлученной части кристалла, после ряда преобразований [218] приходим к математической постановке задачи моделирования динамики доменной границы и формирования поляризационного тока сегнетоэлектрика в неравновесных условиях переключения поляризации.

2.1.2. Математическая формализация механизмов перестройки доменной структуры и формирования поляризационного отклика сегнетоэлектрика

Основу физико-математической модели составляет начальная задача для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка, определяющая динамику доменной границы. Математическая модель включает также совокупность выражений для оценки поляризационного тока, регистрируемого в режиме инжекции. Введение оператора дробного дифференцирования по времени в динамической модели позволяет математически описать сложный характер движения доменной стенки сегнетоэлектрика в предположении о наличии эффекта памяти.

Уравнение динамики доменной границы задается в безразмерном виде:

$$\frac{d^\alpha s}{dw^\alpha} = \exp\left(-\frac{\tau_2}{\tau_1 w + \frac{\tau_3}{2l}(1 + \cos^2 \varphi) \frac{Ls}{2}}\right), \quad 0 \leq s(w) \leq 2(1 - l/L), \quad (2.2)$$

с начальным условием

$$s(w_0) = 0, \quad (2.3)$$

где $s = x/L$ – безразмерное расстояние; $w = t/\tau_1$ – безразмерное время, $w \in [t_0/\tau_1, \theta/\tau_1]$; α – порядок дробной производной Капуто или динамическая

фрактальная размерность, $0 < \alpha < 1$; $\cos^2 \varphi = y^2 / (x^2 + y^2)$; $\tau_1 = L / v_m$ – характерное время пробега толщины кристалла доменной стенкой со скоростью v_m ; $\tau_2 = (\delta \varepsilon \varepsilon_0 L) / (jl)$ – характерный параметр – «время» накопления заряда, создающего поле $E_2 = \delta$ при данной плотности тока j ; ε – диэлектрическая проницаемость образца, ε_0 – диэлектрическая постоянная; $\tau_3 = 2P_s / j$ – характерный параметр – «время», в течение которого ток с плотностью j инициирует появление зарядов с поверхностной плотностью $\sigma = 2P_s$.

Уравнение (2.2) классификационно можно отнести к обыкновенным дифференциальным уравнениям с дробной производной по времени. Решение начальной задачи для неавтономного дифференциального уравнения дробного порядка в представленной постановке (2.2) – (2.3) не может быть построено на основе известных аналитических подходов и требует привлечения численных методов.

Корректность математической модели гарантируется выполнением требований существования и единственности решения данного класса задач, устойчивостью применяемых численных методов реализации (как будет показано далее), а также выполнением контрольных проверок – размерностей, физического смысла, экстремальных ситуаций.

Теоретическое исследование вопросов существования и единственности решения дробно-дифференциальных уравнений представляет предмет отдельного рассмотрения. В настоящей работе ограничимся представлением результатов, полученных другими авторами. Существование и единственность решения задачи Коши для нелинейного дробно-дифференциального уравнения вида

$$D^\alpha x(t) = f(t, D^\beta x(t)), \quad 0 < t \leq \theta, \quad x^{(k)}(0) = \eta_k, \quad k = 0, 1, \dots, m-1, \quad (2.4)$$

где $m-1 < \alpha < m$, $n-1 < \beta < n$, $(m, n \in \mathbb{N}, m-1 \geq n)$ – порядки дробных производных Капуто, представлено в работе [51]. Этот же вопрос был поднят для уравнения $D^\alpha x(t) = f(t, x(t))$, $x(a) = b$, где $0 < \alpha < 1$ – порядок дробной производной Римана – Лиувилля [228], где $f \in C^0(\mathbb{R}^+)$. В работе [229] раскрыта тема

существования и единственности решений для нелинейных начальных задач дробных дифференциальных уравнений, содержащих ψ -Капуто производную (ψ -Caputo Derivative) при $0 < \alpha \leq 1$, $t \in [t_0, \theta]$, $f : [t_0, \theta] \times R \rightarrow R$ – непрерывная функция, $b \in R$. Используя метод неподвижной точки Садовского, в [230] исследованы существование и единственность решения обыкновенного дифференциального уравнения с дробной производной Капуто ($0 < \alpha < 1$), где $f \in C(R, X) \cap L^1_{loc}(R, X)$ и $R = \{(t, x) : t \in [t_0, \theta], x \in B(0, r)\}$ для некоторого θ , $r > 0$, X – Банахово пространство. Доказательство существования решения начальной задачи для нелинейного дробно-дифференциального уравнения на полуоси в случае дробной производной Римана – Лиувилля приведено в [54].

Результат решения задачи (2.2) – (2.3) используем для расчета импульса тока переключения поляризации. Учитывая особенность кинетики движения доменных границ в режиме инжекции, введем в рассмотрение следующие принципы переключения поляризации. Будем считать, что до момента достижения доменной границей $x(t)$ нижней грани кристалла L ток будет определен площадью растущего домена согласно соотношению (2.1). Переключение поляризации закончится в момент достижения позицией середины клина $z(t)$ нижней грани L , при этом будут существовать «остаточные клинья» – части непереключенного объема.

Для симуляции процесса спадания поляризационного тока к нулевому уровню введем механизм переключения поляризации остаточных клиньев. Разобьем основание области непереключенного объема на M дискретных интервалов, каждый из которых «включает» в процесс переключения поляризации соответствующую область, начиная с момента достижения доменной границей $x(t)$ нижней грани кристалла L . Принимая во внимание введенную нормировку, ток переключения поляризации определяем соотношением:

$$I(w) = \begin{cases} I^1(s(w)) = 4 \frac{P_S y d}{\tau_1} \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 0 \leq s \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ I^2(s(w)) = 4 \frac{P_S y d}{s^2 \tau_1} L^2 \left[1 - \frac{k}{M} \right] \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 1 - \frac{l}{L} < s \leq 2 \left(1 - \frac{l}{L} \right), \end{cases} \quad (2.5)$$

где I – поляризационный ток, А; $k = \overline{0, M}$ – номер дискретного интервала при разбиении основания неполяризованного объема.

Выражение (2.5) определяет ток в размерном виде в зависимости от безразмерного времени w . Для перехода к размерному времени требуется обратная замена согласно выражению $w = t/\tau_1$, при этом $t \in [t_0, \theta]$ – рассматриваемый временной диапазон.

Однако рассмотренный подход, предполагающий движение «единого полярного фронта» в виде одного расширяющегося клинообразного домена, является достаточно грубым приближением к описанию механизма перестройки доменной структуры в процессе переключения поляризации. Как показывает ряд авторов [191], расширение области переключения поляризации сопровождается случайным процессом зародышеобразования доменов противоположной полярности. Для учета указанных закономерностей в рамках данного исследования введем стохастическую модификацию динамической модели. Будем считать, что в стартовый момент времени переключение начинается в объеме, составляющем до η частей от объема кристалла (в долях от единицы). Далее перестройка доменной структуры реализуется за счет роста доменов с одинаковой скоростью и с одинаковой шириной основания. «Включение» этих областей происходит последовательно, в некоторые случайные моменты времени, определяемые в соответствии со схемой метода Монте-Карло из допустимого диапазона $(0, \bar{t}]$.

Геометрическая схема модели показана на рисунке 2.2. Подобные процессы также физически связывают с появлением скачков Баркгаузена (отклонений токов от монотонной зависимости) на кривой тока переключения [231, 232].

Для каждой области с номером p , $p = \overline{1, P}$ проводится моделирование динамики движения доменной границы согласно (2.2) – (2.3). Ток переключения поляризации вычисляется с использованием базового соотношения (2.5) как су-

перпозиция токов, представляющих собой вклады отдельных областей, с учетом весовых коэффициентов:

$$I(w) = \begin{cases} \eta I^1(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{P-1} \sum_{p=2}^P I^1(s_p(w)), & 0 \leq s_p(w) \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ \eta I^2(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{P-1} \sum_{p=2}^P I^2(s_p(w)), & 1 - \frac{l}{L} < s_p(w) \leq 2 \left(1 - \frac{l}{L}\right). \end{cases} \quad (2.6)$$

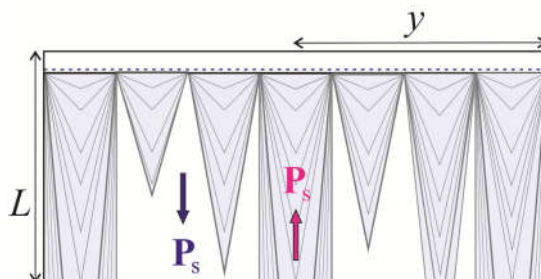


Рисунок 2.2 – Схема доменного роста в стохастической модификации динамической модели

2.2. Эредитарные модели формирования динамических откликов сегнетоэлектриков на тепловые воздействия

Дословный перевод термина «эредитарность» – наследственность – вызывает некоторое смешение терминов, относящихся к характеристикам функционирования систем во времени – «запаздывание» и «эффект памяти». Под эредитарностью понимают свойство системы сохранять память о своем прошлом. Если эредитарность (наследственность) определяется каким-то моментом прошлого, то в ней присутствует запаздывание и она формирует отклик на внешнее воздействие не мгновенно, а с некоторым временным лагом. Таким образом, свойство запаздывания определяет зависимость состояния системы в текущий момент времени от состояния, в котором она пребывала в определенный момент в прошлом. Если эредитарность характеризует зависимость состояния системы от целого периода времени в прошлом, то говорят о наличии памяти в динамической системе. Для стохастических процессов вводят в рас-

смотрение свойство «немарковскости» – будущее системы зависит от ее прошлого, и в отличие от марковского процесса становится принципиально важным, как система пришла в данное состояние.

Важно отметить, что для модельного описания указанных систем используют различный дифференциальный аппарат. Математические модели динамических систем, учитывающих явление наследственности-запаздывания, формулируются с использованием дифференциальных уравнений с запаздыванием (при наличии временного лага) и/или функционально-дифференциальных уравнений. В качестве дополнительной прикладной задачи в работах [233, 234] была рассмотрена и реализована математическая модель диффузионной системы с запаздыванием в приложении к задаче оценки температурного нагрева материалов при электронном облучении.

Математический аппарат построения моделей эредитарных процессов, предполагающих наличие в системе памяти, представлен дифференциальными уравнениями с производной дробного порядка по времени. Для акцентирования в дробно-дифференциальной модели сложного скейлинга и неоднородности сред в математическую постановку задачи вводят дробные производные по координатам. Кроме того, в современной практике известны и комбинированные подходы – дробно-дифференциальные модели, включающие временные лаги – запаздывание [114]. Немарковские процессы в сложных динамических системах моделируются с помощью стохастических дифференциальных уравнений.

Важным свойством сегнетоэлектриков является их принадлежность к классу пироэлектрических материалов, которые характеризуются присутствием пироэлектрического эффекта – изменением величины спонтанной поляризации при изменении температуры [169]. Из-за значительных показателей спонтанной поляризации и пьезоэлектрических свойств пироэлектрический эффект в сегнетоэлектриках намного сильнее, чем в линейных пироэлектриках. Пироэффект особенно заметен вблизи температуры Кюри, поскольку спонтанная поляризация и объемный пьезоэлектрический модуль кристалла интенсивно изменяются в этом диапазоне температур. Многие приложения

сегнетоэлектриков основаны на их пироэлектрических свойствах.

Пироэлектрический эффект в сегнетоэлектриках интенсивно исследуется как экспериментальными, так и теоретическими методами [235-242]. Анализ формы пироэлектрического тока позволяет охарактеризовать поляризацию в тех областях кристалла, в которые проникает тепловая волна. Метод модуляции (или динамический метод Чайновиса) можно причислить к методам измерения пироэлектрического отклика. Кроме того, в [235] была предложена система измерения пироэлектрического отклика с использованием метода компенсации с цифровым управлением. Пироэлектрические свойства сегнетоэлектриков изучаются также с помощью лазеров [236].

Многочисленные исследования нелинейного динамического пироэффекта в кристаллах группы ТГС (триглицинсульфат) были описаны в [237-241]. Полученные данные свидетельствуют, что пироэлектрический эффект, связанный с процессами переключения поляризации в сильных полях, вызван значительным градиентом температуры. Электрическое поле, возникающее под действием градиента температуры, превышает коэрцитивное поле, что приводит к переключению поляризации доменов. Как следствие, мы можем наблюдать скачки Баркгаузена – результат переключения достаточно больших площадей кристалла до 10^{-13} м³.

Исследования поверхностного слоя методом динамического пироэффекта для некоторых сегнетоэлектриков описаны в [238-241]. Связь между амплитудой пироэлектрического тока и частотой тепловых импульсов была исследована для оценки распределения поляризации в образце с использованием глубины проникновения тепловых волн [240]. В работе [241] предложена математическая модель распределения пироэффективности по толщине. Задача решена с помощью метода регуляризации Тихонова для интегрального уравнения Фредгольма первого типа.

В общем случае линейные тепловые и пироэлектрические характеристики сегнетоэлектриков используются для теоретического описания пироэлектрического эффекта. Однако линейные характеристики связаны с

низкотемпературным режимом. Вид пиросигнала может быть изменен за счет ярко выраженных температурных зависимостей пирозлектрического коэффициента, а также теплофизических параметров вблизи температуры фазового перехода. В случае теплопроводности материалов, характеризующихся эффектом памяти или нестандартной структурой, можно применить более адекватную модель теплового процесса на основе введения в уравнение теплопроводности производных дробного порядка [243, 96].

Поскольку сегнетоэлектрики демонстрируют сложную динамику и эффекты временной памяти, то для моделирования пирозлектрического тока в сегнетоэлектриках можно учесть эредитарность процесса, используя дробно-дифференциальный подход. Так как пирозлектрический ток определяется изменением температурного распределения в объекте, определенный научный интерес вызывает математическое моделирование процесса теплопроводности в начально-граничной задаче для нелинейного уравнения с частными производными с дробной производной по времени. Результаты данной части исследования опубликованы [107, 119].

Сформулируем описание математической модели при следующей концептуальной постановке. Будем считать, что оценке подлежит температурное распределение в объеме некоторого сегнетоэлектрического кристалла определенных геометрических размеров при воздействии на одну из граней образца интенсивного однородного по площади теплового потока заданной мощности (рисунок 2.3).

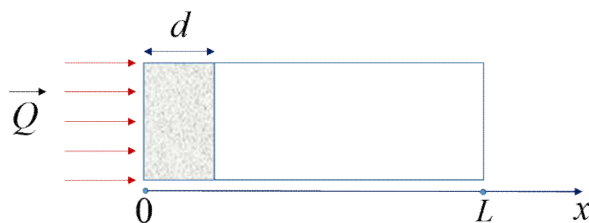


Рисунок 2.3 – Геометрическая схема объекта и действующего источника тепла

Начальная температура объекта соответствует комнатной температуре. Уровень нагрева сегнетоэлектрических материалов можно оценивать по отношению к температуре Кюри (температуре фазового перехода), при переходе через которую материал перестает быть сегнетоэлектриком и становится линейным пирозлектриком (осуществляется термодинамический переход из сегнетофазы в параэлектрическую фазу). Далее будем исходить из класса материалов, характеризуемых фазовым переходом II рода. Особенностью многих сегнетоэлектриков являются «аномалии» теплофизических и пирозлектрических характеристик данных сред вблизи температуры Кюри [169, 244].

Введем в рассмотрение детерминированную математическую постановку начально-граничной задачи для одномерного уравнения нелинейного уравнения теплопроводности:

$$\rho c(T) \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \operatorname{div}(k_T(T) \operatorname{grad} T(x,t)) + f(x,t), \quad t > t_0, \quad 0 < x < L, \quad (2.7)$$

где $T(x,t)$ – температурное распределение в объекте, К; k_T – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К); c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К); ρ – плотность материала, кг/м³; L – линейный геометрический размер объекта, м; t_0 – начальный момент времени, с; $f(x,t)$ – объемная плотность мощности тепловых источников, Вт/м³.

Анализ ряда экспериментальных данных для типичных сегнетоэлектрических материалов свидетельствует, что в широком температурном диапазоне температурной зависимостью коэффициента теплопроводности сегнетоэлектрических материалов можно пренебречь, в то время как λ -образная зависимость теплоемкости от температуры является ярко выраженной и может оказать влияние на характер температурного распределения в материале. В связи с этим примем соответствующее упрощение математической модели в постановке (2.7) и перейдем к ее «субдиффузионному» представлению, позволяющему исследовать процессы теплопроводности, протекающие в эрдитарных режимах:

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial \tau^\alpha} = \frac{k_T t^*}{\rho c(T)} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (2.8)$$

где α – порядок дробной производной Капуто, $0 < \alpha < 1$; $\tau = t/t^*$ – безразмерное время; t^* – некоторое характерное время процесса, с; $\tau_0 = t_0/t^*$.

Заметим, что представленное уравнение теплопроводности (2.8) с учетом безразмерной переменной времени τ позволяет корректно согласовать размерности физических величин, определяющих состояние моделируемой системы. Для представления результата в виде температурного распределения в различные моменты времени потребуется обратный переход $t = \tau \cdot t^*$. Уравнение (2.8) дополним начальным условием:

$$T(x, \tau_0) = T_0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (2.9)$$

где T_0 – температура окружающей среды.

Для нагреваемой поверхности кристалла введем граничное условие II рода и зададим тепловой поток на границе области:

$$\left. \frac{\partial T(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x=0} = -\frac{Q}{k_T}, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (2.10)$$

где $Q = W/S$ – удельная мощность поверхностного тепловыделения, Вт/м²; W – мощность теплового источника, Вт; S – площадь нагреваемой грани образца, м².

При задании условия на противоположной грани кристалла при $x = L$ будем считать, что эта граница существенно удалена от градиентной зоны (рассматривается модель «толстого» кристалла) и на ней устанавливается температура, равная температуре окружающей среды:

$$T(x, \tau) \Big|_{x=L} = T_0, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*. \quad (2.11)$$

Итоговая геометрическая схема объекта также соответствует рисунку 2.3.

Таким образом, математическая постановка задачи теплопроводности включает дробно-дифференциальное уравнение с частными производными (2.8), начальное (2.9) и граничные условия (2.10) – (2.11).

Второй этап решения данной задачи – нахождение пироэлектрического тока, наблюдаемого вблизи температуры фазового перехода в

сегнетоэлектриках с эффектом динамической временной памяти.

Рассмотрим образец сегнетоэлектрика с площадью электродов S и толщиной d так, что $S \gg d^2$. Положим, что образец был изготовлен в виде монокристалла. Если открытый кристалл закорочен, напряжение U между его гранями равно нулю. Связанные заряды компенсируются наличием зарядов свободных носителей в условиях равновесия. Если температура кристалла изменяется, то величина поляризации также изменяется из-за свободных зарядов, которые генерируют ток во внешней цепи, соединяющей электроды [245-248]. Для измерения пирозлектрического тока I в цепь обратной связи включают калибровочное сопротивление R_f , $U = IR_f$. Ток проводимости через образец равен нулю в условиях короткого замыкания. Это означает, что пирозлектрические измерения не зависят от сопротивления кристалла. Поскольку рассматривается одномерный случай, можно предположить, что поляризация изменяется по толщине d и не изменяется в других направлениях. Следовательно, пирозлектрический ток вызывается изменением спонтанной поляризации P_s [169]:

$$I(t) = \frac{S}{d} \int_0^d \frac{\partial P_s}{\partial t} dx. \quad (2.12)$$

Опираясь на определение пироккоэффициента $\gamma(x, T)$, получим следующее соотношение: $\frac{\partial P_s(x, T)}{\partial t} = \gamma(x, T) \frac{\partial T}{\partial t}$ Таким образом, изменение температурного поля кристалла приводит к изменению поляризации. Пирозлектрический ток можно задать следующим образом [169]:

$$I(t) = \frac{S}{d} \int_0^d \gamma(T) \frac{\partial T}{\partial t} dx, \quad (2.13)$$

где $\gamma(T)$ – усредненная по толщине температурная зависимость пироккоэффициента, Кл/(м²·К).

В данном случае пренебрегаем процессом теплообмена на границах образца, поскольку измерить параметр теплообмена для сегнетоэлектрического материала сложно. Ограничениями представленной математической модели

(2.8) – (2.11), (2.13) являются пренебрежением процессом теплообмена кристалла с окружающей средой и отсутствие учета возможности возникновения электрокалорического эффекта.

Чтобы задать граничное условие на необлученной поверхности образца $x=d$, решим уравнение теплопроводности (2.8) для области $0 \leq x \leq L$, где граница $L \sim 10d$ удалена от градиентной зоны. В результате будем считать введение условия Дирихле на границе $x=L$ оправданным.

2.3. Дробно-дифференциальные модели характеристик динамики изменения полярного состояния

Как было показано в обзорной части, теоретический анализ свойств фазовых переходов и переключения поляризации в сегнетоэлектриках могут быть выполнены с помощью термодинамической теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира. Достоинства термодинамического подхода к описанию свойств сегнетоэлектриков обсуждаются во многих работах [169, 172, 249]. Действительно, роль термодинамической теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира в исследовании сегнетоэлектриков трудно переоценить. Она служит теоретическим базисом, позволяющим с точки зрения различных приближений описывать диэлектрические, пироэлектрические, пьезоэлектрические, электрокалорические и другие свойства сегнетоэлектрических материалов, и во многих случаях дает удовлетворительное согласование с результатами экспериментов.

Численному исследованию классической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, построению и реализации ее дробно-дифференциального аналога посвящены работы [120-122, 124-128] автора.

2.3.1. Модели поляризационных характеристик сегнетоэлектриков в рамках теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова

Наиболее известный подход, использующий теорию Ландау – Гинзбурга – Девоншира для модельного описания сегнетоэлектрических явлений – это

модель Изинга. Математический аппарат здесь представлен аналитическими описаниями характеристик процессов в рамках теории эффективного поля [182, 250, 251] или решеточными (дискретными) моделями Изинга и Гейзенберга на основе метода Монте-Карло и алгоритма Метрополиса [183, 256].

Другим, не менее важным направлением является использование теории фазовых переходов Ландау для моделирования переключения поляризации сегнетоэлектриков и петель диэлектрического гистерезиса. Одной из пионерских работ в данном направлении является исследование [252]. Исааком Халатниковым был развит термодинамический подход, для описания состояния и динамического поведения поляризации сегнетоэлектриков во внешнем поле [249]. Предложенное уравнение вошло в теорию сегнетоэлектрическая как нестационарное уравнение Ландау – Халатникова, обобщенный аналог которого (с введенным градиентным слагаемым) соответствует уравнению Ландау – Гинзбурга.

В целях систематизации базовых моделей, основанных на теории Ландау, отметим, что, с математической точки зрения, развиты модели, описываемые алгебраическим уравнением, нестационарным обыкновенным дифференциальным уравнением I порядка (в постановке задачи Коши), обыкновенным дифференциальным уравнением II порядка (в постановке краевой задачи) и начально-граничной задачей для уравнения с частными производными [172, 249, 253-256].

Классическое уравнение Ландау – Халатникова (в постановке нестационарного обыкновенного дифференциального уравнения) было в центре внимания исследований при изучении характера переключения и явления гистерезиса в тонких сегнетоэлектрических пленках [178, 249, 256], частичного переключения под действием внешнего напряжения [178, 258], влияния электрокалорических и пироэлектрических эффектов на сегнетоэлектрический фазовый переход [259] и др. Однако классическое уравнение не учитывает пространственные флуктуации и неоднородное распределение поляризации.

Квазидинамическое дифференциальное уравнение в постановке краевой

задачи для обыкновенного дифференциального уравнения II порядка [172, 179], имеет тот недостаток, что лишь косвенно зависит от времени.

Обобщенное уравнение Ландау – Халатникова является кубическо-квинтическим уравнением с частными производными параболического типа (уравнение класса «реакция-диффузия»). Редукция уравнения до кубического представления применяется для моделирования переключения поляризации в сегнетоэлектриках с фазовым переходом II рода [191, 260].

Стоит отметить, что теория Ландау – Гинзбурга – Девоншира может быть применена для изучения поляризационных характеристик сегнетоэлектрических гетероструктур, которые являются составляющими в устройствах памяти благодаря возможности контролировать ряд поляризационно-зависимых функциональных свойств. Моделирование петель гистерезиса гетероструктурных сегнетоэлектриках проводилось, например, в [261] с использованием метода конечных разностей, примененного к кубическому уравнению в частных производных типа реакция-диффузия.

Как было сформулировано в первой главе, состояние сегнетоэлектриков можно определить набором термодинамических характеристик: температурой, поляризацией, электрическим полем, напряжением и деформацией. Феноменологически описания вводят заданием свободной энергии – термодинамической функции, зависящей от параметра порядка (плотности свободной энергии) – F , Дж/м³. В случае одноосных сегнетоэлектриков свободную энергию можно разложить по степеням единственной компоненты поляризации (для упрощения модели полем деформаций можно пренебречь) (1.12). Полная свободная энергия вычисляется как $G = \int_V F dV$, Дж. Из общих концепций термодинамической теории следует серия моделей изменения полярного состояния сегнетоэлектриков.

Характер сегнетоэлектрического фазового перехода, а также непрерывное или прерывистое поведение поляризации при $T < T_{CW}$ определяются знаком константы B (1.12). Если $B < 0$, имеет место скачкообразная зависимость

поляризации от температуры, и мы можем наблюдать фазовый переход I рода, тогда как $B > 0$ соответствует непрерывной зависимости поляризации от температуры и фазовому переходу II рода. В случае фазового перехода II рода слагаемым, содержащим пятую степень в выражении для плотности свободной энергии (1.12), можно пренебречь. Значения термодинамических параметров A_0 и C положительны для всех известных сегнетоэлектриков [172]. Далее для определенности будем рассматривать сегнетоэлектрики с фазовыми переходами I рода. Соответственно для сегнетоэлектриков с фазовыми переходами II рода в математических моделях требуется учесть знак термодинамической постоянной b .

Гистерезисную зависимость поляризации от приложенного внешнего поля (при определенной температуре T) можно определить, вводя формальное представление этого поля – например, в виде периодической зависимости [169, 172, 257]:

$$E(t) = E_0 \sin(\omega t), \quad (2.14)$$

где E_0 – амплитуда поля, В/м; $\omega = 2\pi f$ – радиальная частота, рад/с; f – частота колебаний электрического поля, Гц.

Простейшей математической моделью гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля можно считать прямое следствие из общего представления равновесной конфигурации как минимума свободной энергии:

$\frac{\partial F}{\partial P} = 0$, которое дается нелинейным алгебраическим уравнением:

$$A_0(T - T_{CW})P + BP^3 + CP^5 - E = 0. \quad (2.15)$$

Нестационарное уравнение Ландау – Халатникова описывает динамику изменения полярного состояния сегнетоэлектрика в рамках теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира [249]:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial P}, \text{ В/м}, \quad (2.16)$$

где δ – кинетический коэффициент, В·м·с/Кл (или м·с/Ф).

Заменяя плотность свободной энергии в (2.16) соответствующим

выражением (1.12), можно получить следующее дифференциальное уравнение – уравнение Ландау – Халатникова:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -A_0(T - T_{CW})P - BP^3 - CP^5 + E. \quad (2.17)$$

Сегнетоэлектрические материалы состоят из доменов, которые на практике часто переключаются в значительно меньшем электрическом поле, чем это описано в (2.17), т.е. экспериментальное коэрцитивное поле может быть меньше теоретического. Для соответствия равенства (2.17) экспериментальным данным, следуя [173, 178, 258, 262], член электрического поля умножается на безразмерный коэффициент масштабирования ν , так что (2.17) можно записать в виде

$$\delta \frac{dP}{dt} = -A_0(T - T_{CW})P - BP^3 - CP^5 + \nu E. \quad (2.18)$$

Динамическое уравнение (2.24), дополненное начальным условием $P(t_0) = P_0$, позволяет описать гистерезисную зависимость P от внешнего поля E .

Общий подход Ландау основан на теории самосогласованного поля, и, как следствие, уравнение (2.18) не учитывает флуктуации параметра порядка – поляризации. Следуя концепции Гинзбурга [172], для описания флуктуации в сегнетоэлектриках можно расширить формулу (2.18), добавив градиентное слагаемое или корреляционную энергию $\psi(\nabla P)^2$, где ψ – положительная термодинамическая постоянная, $\text{м}^3/\Phi$. Предполагая пространственную зависимость поляризации только от переменной x , для случая одной из составляющих поляризации обобщенное уравнение Ландау – Халатникова можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + aP + bP^3 - cP^5 + \sigma E(t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (2.19)$$

где L – толщина образца, м; $a = -A/\delta$, $b = -B/\delta$, $c = C/\delta$ – положительные константы, рассматривая сегнетоэлектрики с фазовым переходом I рода ($b < 0$) и полагая, что некоторая текущая температура T – например, комнатная

температура: $T < T_{CW}$; $\sigma = v/\delta$; $D = \psi/\delta$ – термодинамический параметр, представляющий собой комбинацию ранее введенных параметров, имеющий смысл и размерность коэффициента диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$.

Уравнение Ландау – Халатникова (2.19) в сочетании с выражением для электрического поля (2.14) обеспечивает теоретическую основу для математического моделирования поляризационного гистерезиса в сегнетоэлектриках с фазовым переходом I рода. Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом II рода математическая модель приведена к более простому виду, без пятого члена и с параметром $B < 0$.

Альтернативным вариантом, представленным в литературе (например, в [179]), является квазидинамический аналог уравнения (2.19):

$$D \frac{d^2 P}{dx^2} + aP + bP^3 - cP^5 + \sigma E(t) = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta \quad (2.20)$$

– обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка, которое требует задания граничных условий.

Для замыкания математической постановки задачи обобщенное уравнение Ландау – Халатникова (2.19) необходимо дополнить начальным $P(x, t_0) = P_0(x)$, $0 \leq x \leq L$ и граничными условиями. Как будет показано, конкретный вид граничных условий определяется физическим смыслом соответствующей частной задачи.

Таким образом, фундаментальная термодинамическая модель, описывающая поляризационное состояние сегнетоэлектрических материалов, задается начально-граничной задачей для полулинейного параболического уравнения (“cubic-quintic”) типа «реакция-диффузия».

Следует заметить, что исследованию комплексного уравнения Ландау – Гинзбурга посвящен достаточно широкий спектр работ. Данное уравнение (TDLG) имеет обширные области приложений для описания явлений нелинейной оптики, сверхпроводимости, нелинейных волн, гидродинамики и др. Например, в работах S. Chen, B. Guo [263] исследованы вопросы существования и единственности слабых решений, авторы [264] показали

существование глобальных аттракторов для данного уравнения, теоретический анализ частных случаев TDLG модели проведен в работах [265]. Однако теоретический анализ корректности модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова (которую можно рассматривать также как частный случай общей TDLG модели в приложении к сегнетоэлектрическим материалам) практически не представлен в литературе. Автором диссертации в работе [2], совместной с соавторами, был проведен теоретический анализ существования и единственности слабого решения обобщенного уравнения Ландау – Халатникова. Полученные теоретические результаты не следуют из стандартной теории параболических уравнений с монотонными операторами, поскольку в рассматриваемой модели полиномиальная часть не является вогнутой функцией поляризации. Однако, используя структуру полиномиальной части, удалось получить априорные оценки решения, что позволило доказать однозначную разрешимость задачи.

Также заметим, что в общем случае построение аналитических решений нелинейных уравнений с частными производными рассматриваемого вида связано с серьезными затруднениями и на практике широко применяют методы численной математики.

2.3.2. Эредитарные модификации термодинамических моделей поляризационного гистерезиса и дробно-дифференциальная модель кинетики доменной границы сегнетоэлектрика

Принимая во внимание сложный характер перестройки доменной структуры и эффекты памяти, введем в рассмотрение эредитарные модификации уравнений Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова на основе дробной производной Капуто по времени. Рассмотрим одноосный сегнетоэлектрический кристалл, в котором поляризация P является параметром порядка, описывающим его состояние. Это означает, что поляризация P зависит от одной пространственной переменной x , а поверхности образца связаны с координатами $x = 0$ и $x = L$, как показано на рисунке 2.4. Кроме того, предположим, что процесс инверсии поляризации в сегнетоэлектрическом

кристалле реализуется за счет приложения синусоидального электрического поля. Отметим, что поляризация и напряженность приложенного электрического поля являются векторными величинами. В этих условиях моделируются только два возможных состояния поляризации $\uparrow \mathbf{P}$ и $\downarrow \mathbf{P}$ после полного переключения на 180° , связанного с ориентацией приложенного поля $\uparrow \mathbf{E}$ и $\downarrow \mathbf{E}$ соответственно.

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

$$\frac{1}{t^*} \frac{d^\alpha P}{d\tau^\alpha} = aP + bP^3 - cP^5 + \sigma E(\tau), \quad P(\tau_0) = P_0, \quad (2.21)$$

где $P(\tau)$ – изменение поляризации с течением времени, Кл/м²; $\tau = \frac{t}{t^*}$ – безразмерное время; t^* – некоторое характерное время процесса, с; α – порядок дробной производной Капуто, $0 < \alpha < 1$; τ_0 – начальный момент времени [266].

Характерное время t^* процесса введено в модельное уравнение (2.21) с целью согласовать размерности переменных и параметров модели. При интерпретации результатов модельных расчетов потребуется обратный переход от безразмерного τ к размерному t времени.

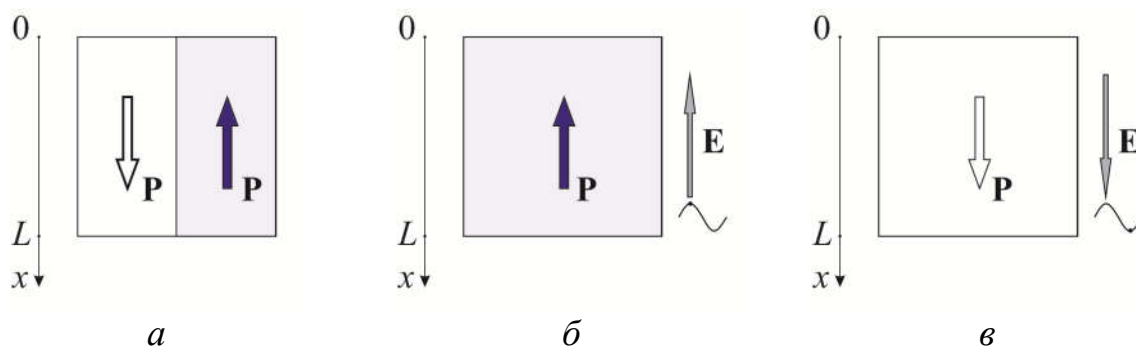


Рисунок 2.4 – Схема процесса переключения поляризации 180° доменов в сегнетоэлектрическом одноосном кристалле: в начальный момент времени $t = 0$ – а; для максимального значения приложенного поля – б; после полного переключения на 180° – в

Следует отметить, что в отличие от работ [249, 219-221], где также рассмотрен фрактальный аналог сегнетоэлектрического гистерезиса на основе аппроксимации дробной производной, наш подход предполагает моделирование фрактальной динамики на основе численного решения дробно-дифференциального уравнения, представляющего модификацию термодинамической модели.

Введем в рассмотрение эредитарный аналог модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова как начально-граничную задачу для нелинейного уравнения с частными производными с дробной производной по времени:

$$\frac{\partial^\alpha P}{\partial \tau^\alpha} = \bar{D} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \bar{a}P + \bar{b}P^3 - \bar{c}P^5 + \bar{\sigma}E(\tau), \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \theta/t^*, \quad (2.22)$$

где $\bar{D} = t^* D$, $\bar{a} = t^* a$, $\bar{b} = t^* b$, $\bar{c} = t^* c$, $\bar{\sigma} = t^* \sigma$; α – порядок дробной производной Капуто по времени, $0 < \alpha < 1$; $\tau = \frac{t}{t^*}$ – безразмерное время; t^* – характерное время, с; θ – время наблюдения процесса, с.

Начальные и граничные условия сформулируем в виде:

$$P|_{\tau=0} = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (2.23)$$

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = -\frac{P}{\lambda}, \quad 0 \leq \tau \leq \theta/t^*, \quad (2.24)$$

где α – порядок дробной производной Капуто, $0 < \alpha < 1$; λ – характерный параметр (длина экстраполяции), м.

Понятие экстраполяционной длины λ было введено для описания изменения поляризации на поверхности тонких пленок в рамках феноменологического подхода [172].

Проведем контроль размерностей для уравнения (2.22):

$$\left[\frac{1}{c} \cdot \frac{\text{Кл}}{\text{м}^2} \right] = \left[\frac{\text{м}^3}{\Phi} \cdot \frac{\Phi}{\text{м} \cdot \text{с}} \cdot \frac{\text{Кл}}{\text{м}^4} + \frac{\text{м}}{\Phi} \cdot \frac{\Phi}{\text{м} \cdot \text{с}} \cdot \frac{\text{Кл}}{\text{м}^2} + \frac{\text{м}^5}{\text{Кл}^2 \cdot \Phi} \cdot \frac{\Phi}{\text{м} \cdot \text{с}} \cdot \left(\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2} \right)^3 + \frac{\text{м}^9}{\text{Кл}^4 \cdot \Phi} \cdot \frac{\Phi}{\text{м} \cdot \text{с}} \cdot \left(\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2} \right)^5 + \frac{\Phi}{\text{м} \cdot \text{с}} \cdot \frac{\text{В}}{\text{м}} \right].$$

Учитывая, что $1 \Phi = 1 \text{ Кл/1 В}$, получим, что левой и правой частям уравнения (2.22) соответствуют одинаковые единицы измерения – $\left[\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}} \right]$.

Изучению дробно-дифференциальных аналогов различных вариаций уравнения Ландау – Гинзбурга (TDLG уравнение) посвящен ряд работ современных авторов. Подобная модификация была впервые предложена Н. Weitzner [267], развита В.Е. Тарасовым [268] и др. В исследовании L. Li и соавторов [269] осуществлен теоретический анализ существования и единственности слабого решения TDLG уравнения, показано существования глобальных аттракторов. Теоретический анализ введенной нами модификации уравнения Ландау – Гинзбурга (2.22) – (2.24) представляет отдельную подзадачу и выходит за рамки настоящей работы.

Таким образом, математическая модель формулируется в постановке начально-граничной задачи для полулинейного уравнения с частными производными дробного порядка (2.22) – (2.24). Начально-граничная задача (2.22) – (2.24) также может быть решена с привлечением численных методов.

На основе дробно-дифференциальной модели переключения поляризации проведем формализацию математической модели кинетики доменной границы сегнетоэлектрика. Обратимся к наиболее изученному (с физической точки зрения) случаю реориентации поляризации – к 180° переключению поляризации, при котором внешнее поле \mathbf{E} прикладывается вдоль оси вектора спонтанной поляризации \mathbf{P}_s и его ориентация изменяется на 180° . Переключение поляризации на 180° может наблюдаться у одноосных сегнетоэлектриках – таких, как триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$, дигидрофосфат калия KH_2PO_4 , ниобат лития LiNbO_3 , танталат лития LiTaO_3 , а также, например, *c*-доменов титаната бария BaTiO_3 . Процесс переключения поляризации может быть реализован с помощью двух соответствующих механизмов: процесса зародышеобразования и роста 180° доменов со спонтанной поляризацией, параллельной приложенному полю, а также за счет бокового расширения противоположно ориентированных доменов.

Рассмотрим модель сегнетоэлектрического образца с двумя доменами, ориентированными «голова к голове» (векторы спонтанной поляризации направлены друг к другу), как показано на рисунке 2.5а. Предположим, что к образцу приложено внешнее постоянное или линейно возрастающее электрическое поле \mathbf{E} . Приложенное поле приводит к переключению поляризации в противоположно ориентированной области (с ориентацией \mathbf{P}_S «голова вниз»). В результате граница домена начинает двигаться с некоторой скоростью \mathbf{v} , а домен, ориентированный «голова вверх», расширяется. Будем считать, что домены разделены границей некоторой заданной толщины h . Для задания начального распределения поляризации P_0 при $t=0$ с учетом толщины доменной границы воспользуемся следующей зависимостью: $f(x) = \tanh(x/\xi)$, где ξ – некоторый параметр, отвечающий за толщину доменной стенки. Эта функция, масштабированная с помощью линейного преобразования, показана на рисунке 2.5 б (для примера – нормированный параметр принимает значение 0.05 отн. ед.).

Обобщенное уравнение Ландау – Халатникова, дополненное начальными и граничными условиями, позволяет описывать динамику доменной границы. Учитывая эрдитарность процесса, приходим к следующей начально-краевой задаче для дифференциального уравнения с частными производными и с дробной производной по времени:

$$\frac{\partial^\alpha P}{\partial \tau^\alpha} = \bar{D} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \bar{a}P + \bar{b}P^3 - \bar{c}P^5 + \bar{\sigma}E(\tau), \quad 0 < x < L, \quad 0 < \tau \leq \frac{\theta}{t^*}, \quad (2.25)$$

$$P|_{t=0} = P_0 \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (2.26)$$

$$P|_{x=0} = -P_0, \quad P|_{x=L} = P_0, \quad 0 \leq \tau \leq \frac{\theta}{t^*}. \quad (2.27)$$

Как и в случаях, описанных выше, для решения задачи (2.25) – (2.27) требуется привлечение численных методов.

Принципиально новым предлагаемым подходом (в отличие от известных работ в данном направлении [219-222], применяющих дробные производные) к моделированию поляризационных откликов сегнетоэлектриков является

использование дробно-дифференциальных уравнений как математического аппарата формализации динамических процессов в физической системе.

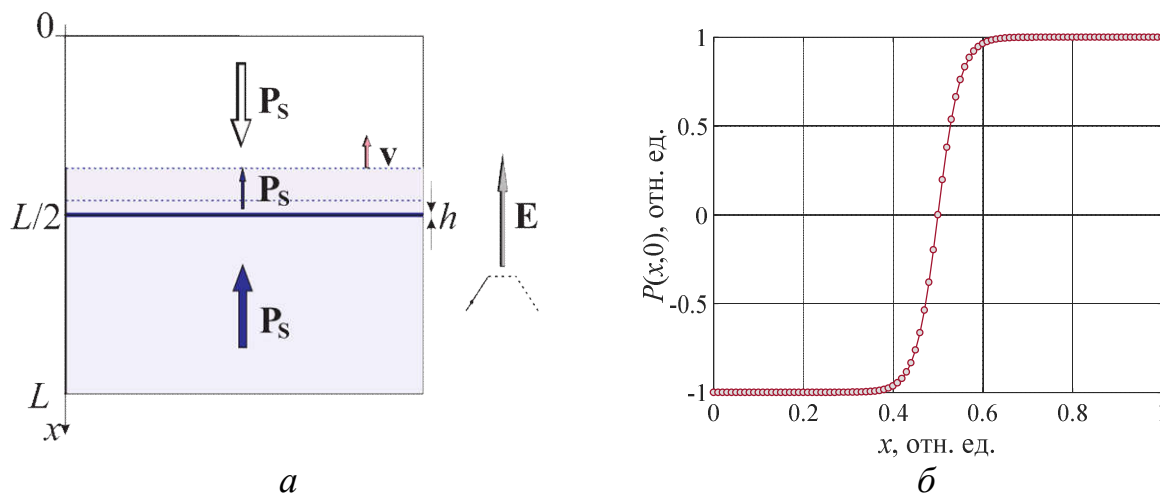


Рисунок 2.5 – Схема модельного образца – *а* и начальное распределение поляризации P_0 по толщине образца – *б*

2.3.3. Обобщенное описание формирования динамических откликов сегнетоэлектриков в концепции модели аномальной диффузии

Вид дробно-дифференциальных уравнений с частными производными, составляющих основу введенных в разделах 2.2 и 2.3 математических моделей, можно поставить в соответствие известному классу дробно-дифференциальных уравнений – уравнениям так называемой аномальной диффузии.

Уравнения аномальной диффузии используют для математической формализации нестандартных диффузионных процессов, явлений переноса в неоднородных, сложноструктурированных и эрдитарных системах. Как было отмечено в обзорной главе, в подобных случаях детерминированную модель нестационарного диффузионного процесса преобразуют к фрактальной модели аномальной диффузии на основе замены целых производных дробно-дифференциальными аналогами (1.11) [3, 5]. В нашем случае модели формирования поляризационных и тепловых динамических откликов сегнетоэлектриков будут соответствовать модели нелинейной (точнее, полулинейной) аномальной диффузии. Обобщим формальные представления для случая введения произ-

водных дробного порядка и по времени, и по координате. Тогда основное уравнение моделей в обобщенном виде можно записать:

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = d \frac{\partial^\beta u}{\partial x^\beta} + \varphi(u) + f(x, t), \quad (2.28)$$

где $u(x, t)$ – функция, подлежащая определению (концентрации вещества, температура, поляризация и др.); d – коэффициент диффузии; $\varphi(u)$ – реакционное слагаемое; $f(x, t)$ – функция источника или стока; $0 < \alpha \leq 1$ и $1 < \beta \leq 2$ – порядки дробного дифференцирования Капуто по времени и пространственной координате соответственно.

Порядки дробного дифференцирования по времени и пространству в задаче (2.34) допускают вариации, которые в полной мере отвечают физическому смыслу моделируемых явлений [10]. Если зафиксировать порядок производной по координате $\beta=2$, а порядок производной по времени α будет лежать в интервале $(0,1)$, то уравнение (2.28) опишет процесс субдиффузии (sub-diffusion). При $\alpha=1$ наблюдаем классическую диффузию, при варьировании α в диапазоне $(1,2)$ – выраженную диффузию (hyper-diffusion); при $\alpha=2$ имеем классическое волновое уравнение. Если же значение α зафиксировано как $\alpha=1$, а β изменяется в интервале $(1,2)$, то уравнение (2.28) – это уравнение супердиффузии (super-diffusion); при $\beta=1$ получим уравнение переноса, а $\beta=2$ вновь дает уравнение классической диффузии.

Как было неоднократно отмечено, построение точных решений для уравнений вида (2.28) вызывает серьезные затруднения, поэтому во многих ситуациях оправдано применение приближенных методов. Для дальнейшего обобщения используемого математического аппарата реализации моделей, приведенных в разделах 2.2 и 2.3, рассмотрим обобщенную математическую модель процесса аномальной диффузии, определяемую эволюционным полулинейным дробно-дифференциальным уравнением в некоторой одномерной области.

Ограничим класс рассматриваемых задач случаем, при котором $0 < \alpha < 1$ –

порядок дробного дифференцирования Капуто по времени; $1 < \beta < 2$ – порядок дробного дифференцирования Капуто по координате (будем рассматривать процессы, близкие по своей природе к диффузионным). Для обобщения граничных условий используем условия Шрода, которые в качестве частных случаев включают: условия I рода (Дирихле) (2.27), представленные в модели динамики доменной границы; условия II рода (Неймана) (2.10), присутствующие в модели теплопроводности; условия III рода (Робина) (2.24) в модели гистерезисной зависимости поляризации от приложенного поля.

Уравнение обобщенной модели имеет вид:

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = d \frac{\partial^\beta u}{\partial x^\beta} + \varphi(u) + f(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta. \quad (2.29)$$

Введем также начальное условие

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L \quad (2.30)$$

и граничные условия III рода (условия Робина):

$$-\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0} + qu|_{x=0} - g = 0, \quad \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=L} + qu|_{x=L} - g = 0, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (2.31)$$

где q и g – параметры модели.

Следует отметить, что для конкретных прикладных задач требуется дополнительная «настройка» параметров математической модели аномальной диффузии в связи с необходимостью соответствовать требованиям контроля размерностей. Так, «фрактальный» коэффициент диффузии в (2.29) имеет размерность $[l]^\beta \cdot [t]^{-\alpha}$, где $[l]$ – размерность пространственной координаты, $[t]$ – времени. Одним из способов работы с размерными величинами, позволяющих оставаться в рамках общеупотребимых систем измерения физических величин (например, СИ), является применение в модели нормированных переменных. В настоящей работе мы будем использовать следующий подход. Для решения задач вида (2.29) с конкретными физическими постановками осуществим переход к безразмерным координатам $\bar{x} = x/x^*$ и безразмерному времени $\bar{t} = t/t^*$, где x^* и t^* – характерные параметры расстояния и времени. Это позволит использовать другие справочные параметры (например, коэффициент диффузии, термо-

динамические параметры кристаллов) с определенной системой СИ единицами измерения. Далее, при анализе данных модельных экспериментов будет осуществлен обратный переход к размерным величинам расстояния и времени.

Теоретический анализ, а также поиск фундаментальных решений уравнений типа (1.11), (2.28) и (2.29) крайне затруднителен и представляет отдельную научную задачу, которая не рассматривается здесь на уровне получения собственных результатов автора. Тем не менее, отметим ряд работ, в которых поднимается вопрос о существовании и единственности решения уравнения аномальной диффузии, а также проведен поиск фундаментального решения. Построение аналитического решения и исследование задачи Коши для многомерного уравнения аномальной диффузии с дробной производной Римана – Лиувилля и Капуто при $n < \alpha < n-1$, $n \in \mathbb{N}$, $q=0$ можно найти в [270].

В работе [271] исследовался вопрос о существовании решения задачи Коши для уравнения дробной диффузии, а в [272-274] осуществлялся поиск решения краевых задач для уравнения аномальной диффузии.

Фундаментальное решение однородного уравнения (2.28) с дробной производной Рисса – Феллера по координате и дробной производной Капуто по времени ($0 < \alpha, \beta \leq 2$) получено в [86]. Существование и единственность решения задачи Коши для однородного уравнения (2.28) при $\beta=1$ доказаны в [275]. Результаты доказательства единственности и существования начально-краевых задач для обобщенного уравнения диффузии

$$D_t^\alpha u = -\operatorname{div}(p(x) \operatorname{grad} u) + q(x)u + F(x, t)$$

с дробной производной Римана – Лиувилля $0 < \alpha \leq 1$ представлены в [77]. Продолжение исследований в области начально-краевых задач для обобщенного многомерного уравнения дробной диффузии – в [73]. Доказательство существования и единственности решения для уравнения аномальной диффузии с дробной производной по времени и с граничными условиями Робина приведено в [75]. В целом надо отметить, что вопросы, касающиеся поиска фундаментального решения, доказательства существования и единственности решения на-

начально/ начально-краевых задач для линейных уравнений аномальной диффузии, более изучены, нежели для нелинейных. Решения нелинейных уравнений аномальной диффузии описаны в [90]. В некоторых из перечисленных работ показана связь с фрактальными размерностями.

Модифицированное уравнение Фишера – Колмогорова – Пискунова – Петровского, в основе которого лежит нелинейное уравнение аномальной диффузии, исследовано в [74]. В [91] выведено решение уравнения:

$$u_t + (-\Delta)^s (u^m) = f(u), \quad 0 < s < 1, \quad m > (N - 2s)_+ / N,$$

с однородными граничными условиями; кроме того, доказано существование и единственность решений. Заметим, что задачи, подобные (2.28), исследуются чаще всего численно. Например, на основе методов Кранка – Николсон и расширенного кубического сплайна получено приближенное решение начальной задачи для уравнения

$$D_t^{2\alpha} u + \gamma D_t^\alpha u - \Delta u + \gamma_1 u^3 + \gamma_2 u^2 + \gamma_3 u = g,$$

где $0 < \alpha < 1$ – порядок производной Капуто [276].

В статье [277], используя сплайны и формулу $L1$, решена начально-граничная задача для дробного по времени нелинейного уравнения Шредингера:

$$i \frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \lambda |u|^2 u = f(x, t),$$

с производной Капуто $0 < \alpha < 1$.

2.4. Выводы по главе

Таким образом, во второй главе приведен ряд концептуальных 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: инъекции электронов, нагрева, приложенного по-

ля. Модификации динамических моделей физических процессов введены на основе использования аппарата дробно-дифференциальных уравнений.

В первом разделе главы представлена дробно-дифференциальная модель электронно-индуцированной кинетики переключения сегнетоэлектриков как самоподобных физических систем с памятью. В отличие от предшествующих результатов предложена модель с производной Капуто, которая позволит перейти к реализации модели на основе построения схем более высокого порядка точности. Кроме того, предложена концептуально новая постановка задачи симуляции динамики доменной структуры (методом Монте-Карло) с учетом неодновременного стохастического характера прорастания доменов клинообразной формы в процессе переключения.

Во втором разделе предложены эредитарные модели тепловых процессов, возникающих при исследовании пироэлектрического отклика сегнетоэлектриков. Акцент сделан 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 пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика.

Третий раздел посвящен разработке дробно-дифференциальных моделей характеристик динамики изменения полярного состояния и кинетики доменной границы сегнетоэлектрика. Рассмотрена серия классических моделей, описывающих полярное состояние сегнетоэлектриков, на основе термодинамического подхода Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, в математической форме описываемых алгебраическим уравнением, задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, краевой задачей для обыкновенного дифференциального уравнения и начально-граничной задачей для уравнения с частными производными диффузионного типа.

Представлены эредитарные модификации нестационарных моделей Ландау – Халатникова, описывающих гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля. Показано, что сформулированные дробно-дифференциальные диффузионные задачи (теплопроводности и поляризации)

классификационно относятся к моделям аномальной диффузии. Сформулирована обобщенная постановка начально-граничной задачи для модели формирования динамических откликов сегнетоэлектриков в концепции и нотации полупроводниковой модели аномальной диффузии.

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

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СХЕМЫ И АЛГОРИТМЫ РЕАЛИЗАЦИИ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ ЭВОЛЮЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

Физико-математические постановки задач моделирования нестационарных откликов сегнетоэлектриков как фрактальных систем с памятью, представленные во второй главе, введены в рассмотрение как дробно-дифференциальные модификации их детерминированных аналогов. В общем смысле введенный подход отвечает идее генерализации – построения класса обобщенных моделей, в которой целочисленные прототипы моделей рассматриваются как предельные случаи.

Разработанные математические модели динамических откликов сегнетоэлектриков в режимах инжекции, теплового нагрева и воздействия внешнего поля, несмотря на различные по природе процессы, подлежащие формализации, классификационно принадлежат двум типам дифференциальных задач – задаче Коши для обыкновенных дробно-дифференциальных уравнений и начально-граничной задаче для уравнений с частными производными дробного порядка. Кроме того, все математические модели относятся к нелинейным по типу операторов, лежащих в основе математического описания, или форме дифференциальных уравнений.

Как уже было отмечено, реализация моделей указанных классов проводится преимущественно с использованием методов вычислительной математики, в том числе на основе конечно-разностных схем. Как показал литературный обзор (глава первая), архитектура вычислительных схем определяется в основном используемым определением производной дробного порядка. Во второй главе математические модели были формально «обезличены» в части используемых определений дробных производных, акцент был сделан на физической интерпретации вводимых операторов дробного дифференцирования. В настоящей главе всем математическим моделям будут поставлены в соответствие их обобщенные математические

формулировки и определения используемых производных дробного порядка. Глава включает описание вычислительных схем и алгоритмов, предназначенных для программной реализации разработанных модификаций моделей формирования нестационарных откликов сегнетоэлектриков в неравновесных внешних условиях. Также материал главы содержит вопросы конструирования вычислительных схем базовых детерминированных моделей (с производными целых порядков), которые в дальнейшем используются для верификации в предельных случаях их дробных аналогов. Результаты, представленные в данной главе, опубликованы в авторских работах [2, 68-70, 107, 118-128, 233, 234, 266].

3.1. Вычислительная схема решения начальной задачи для дробно-дифференциального уравнения модели формирования поляризационного тока

Обратимся к построению вычислительного алгоритма для задачи моделирования процесса переключения поляризации сегнетоэлектрика в режиме электронно-стимулированного воздействия. Алгоритм реализации модели можно разбить на два основных этапа: модельное описание динамики доменной границы на основе численного решения обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка; реализация алгоритма стохастического моделирования роста доменов клинообразной формы на основе метода Монте-Карло.

Рассмотрим подзадачу конструирования формул конечно-разностной аппроксимации для решения задачи (2.2) – (2.3), которая в обобщенном виде может быть записана следующим образом:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = f(t, u(t)), \quad u(t_0) = u_0, \quad (3.1)$$

где $f(t, u(t))$ – некоторая заданная функция, $t \in [t_0, \theta]$; α – порядок дробной

производной, $0 < \alpha < 1$.

В научной практике используют различные определения дробной производной. В числе наиболее известных – определения Римана – Лиувилля (1.1), Капуто (1.3) и Грюнвальда – Летникова (1.5). Определение Капуто позволяет рассматривать классы дифференциальных задач, включающих неоднородные начальные условия, в то время как определение Римана – Лиувилля может быть использовано для решения задач с однородными начальными условиями. Как было показано рядом авторов [10], определения (1.1), (1.3) и (1.5) эквивалентны для случая $u(t_0) = 0$. В случае неоднородных начальных условий операторы дробного дифференцирования Римана – Лиувилля, Грюнвальда – Летникова и Капуто будут согласованы посредством введения корректирующего слагаемого [65]:

$${}^C D_t^\alpha u(t) = {}^{RL} D_t^\alpha u(t) - p, \quad \text{при} \quad p = D_t^\alpha(u_0) = u_0 \cdot t^0 = u_0 \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}. \quad (3.2)$$

При построении вычислительных схем, предназначенных для решения дробно-дифференциальных задач в постановке (3.1), часто используют конечно-разностные методы, основанные на построении аппроксимаций производной дробного порядка. Рассмотрим несколько альтернативных подходов, представляющих данную идеологию.

Заменим дробную производную Римана – Лиувилля формулой Грюнвальда – Летникова (1.5). Как было отмечено в первой главе, все свойства, выполняемые для дробной производной в определении Римана – Лиувилля, действительны и для определения Грюнвальда – Летникова.

Используя (1.5'), можно записать явную конечно-разностную схему на сетке $\Omega_{\Delta t} = \{t_i = t_0 + i\Delta t, i = \overline{0, N}\}$ для решения задачи (3.1) с учетом корректирующего слагаемого [65]:

$$u_{GL}(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_i, u_{GL}(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}(t_{i-j+1}), \quad (3.3)$$

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

Модифицируем вычислительную схему (3.3), применив концепцию метода прогноза и коррекции при решении задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений целого порядка. В частности, воспользуемся идеей построения метода «предиктор-корректор» Адамса – Башфорта – Моултона. Суть этого метода состоит в совместном применении явного и неявного методов одинакового или смежного порядка. Таким образом, с учетом корректирующего слагаемого, на первом шаге рассчитаем «пробное» приближение $u_{GL}^p(t_{i+1})$, а при помощи неявной схемы уточним это значение, подставив его в правую часть:

$$u_{GL}^p(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_i, u_{GL}^c(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (3.4)$$

$$u_{GL}^c(t_{i+1}) = (\Delta t)^\alpha f(t_{i+1}, u_{GL}^p(t_{i+1})) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (3.5)$$

на сетке $\Omega_{\Delta t}$ при $i = \overline{0, N-1}$.

Кроме того, на основе определения Капуто (1.3) также можно построить схему прогноза и коррекции [63], аналогичную схеме Адамса – Башфорта – Моултона, которая предназначена для решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений целого порядка. Предиктор на конечно-разностной сетке $\Omega_{\Delta t}$ для $i = \overline{0, N-1}$ имеет вид:

$$u_C^p(t_{i+1}) = u_0 + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^i b_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)), \quad (3.6)$$

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

Соответственно корректор записывается в форме:

$$u_C^c(t_{i+1}) = u_0 + \frac{(\Delta t)^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \left(f(t_{i+1}, u_C^p(t_{i+1})) + \sum_{j=0}^i a_{j,i+1} f(t_j, u_C^c(t_j)) \right), \quad (3.7)$$

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

Вычислительные алгоритмы решения дробно-дифференциальных уравнений демонстрируют главный принцип моделирования физических процессов с долговременной памятью – установление характеристик модели системы в текущий момент времени с использованием всех значений переменной состояния в предыдущие моменты времени. По аналогии вводят модели динамических фрактальных систем с «частичной» памятью, ограничивая при аппроксимации дробной производной соответствующий временной диапазон. В связи с чем при моделировании систем с «полной памятью» приходится проводить достаточно ресурсоемкие вычисления. Некоторые авторы прибегают к использованию «частичной» памяти, ограничивая сумму в q предыдущими состояниями системы. Покажем схематически отличие в общих конструкциях конечно-разностных схем, используемых для реализации динамических систем (рисунок 3.1 а, прим. – для одношаговых методов), динамических систем с запаздыванием (рисунок 3.1 б), систем с «полной» памятью (рисунок 3.1 в) и систем с «частичной» памятью (рисунок 3.1 г).

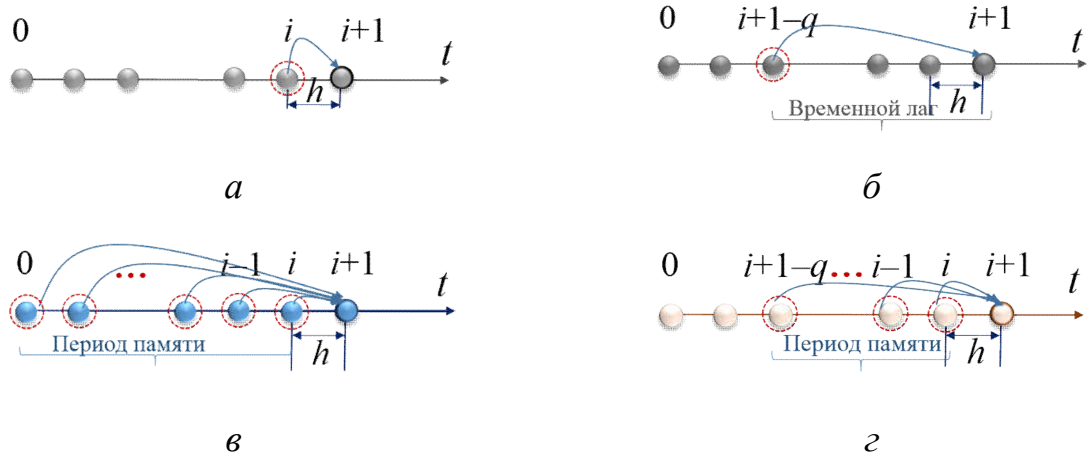


Рисунок 3.1 – Общая структура конечно-разностных схем для реализации моделей: динамических систем – а; систем с запаздыванием – б; систем с «полной» памятью – в; с «частичной» памятью – г

У явной схемы (3.3) и схемы (3.4) – (3.5) порядок аппроксимации $O(\Delta t)$. Метод (3.6) – (3.7) имеет порядок аппроксимации [59]:

$$\max_{i=0, N} |u(t_i) - u_{\Delta t}(t_i)| = O((\Delta t)^g), \quad g = \min(2, 1 + \alpha).$$

В нашем случае порядок аппроксимации соответствует $O((\Delta t)^{1+\alpha})$. В работах [67, 65] показано, что практическая оценка погрешностей конечно-разностных решений задач вида (3.1) демонстрирует различные результаты в зависимости от значения шага дискретизации по времени, используемого метода и конкретного вида функции правой части. В одних случаях более эффективными оказываются явные схемы, в других – схемы типа «предиктор-корректор». Детальный анализ проводится авторами, как правило, для определенных классов задач, для которых известны аналитические решения.

Очевидно, что на этапе верификации результатов численного моделирования определенный интерес будет представлять сравнение данных, полученных на основе дробно-дифференциальной модели при $\alpha=0.999$, и с помощью базовой модели, включающей производные целого порядка. Реализация базовой детерминированной модели может быть проведена с использованием, например, метода Рунге – Кутты IV порядка точности:

$$\begin{cases} \mathfrak{Y}_1^i = f(t_i, u_i), \\ \mathfrak{Y}_2^i = f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, u_i + \frac{\Delta t}{2} \mathfrak{Y}_1^i\right), \\ \mathfrak{Y}_3^i = f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, u_i + \frac{\Delta t}{2} \mathfrak{Y}_2^i\right), \\ \mathfrak{Y}_4^i = f(t_i + \Delta t, u_i + \Delta t \mathfrak{Y}_3^i), \\ u_{i+1} = u_i + \frac{\Delta t}{6} (\mathfrak{Y}_1^i + 2\mathfrak{Y}_2^i + 2\mathfrak{Y}_3^i + \mathfrak{Y}_4^i). \end{cases} \quad (3.8)$$

Одним из важнейших параметров модели (2.2) – (2.3) является глубина проникновения электронов в образец l . Для оценки этого параметра можно воспользоваться различными подходами. Геометрия области взаимодействия пучка электронов с облучаемой мишенью может быть описана на основе прямого моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло [278, 279]. Кроме того, можно воспользоваться формулами эмпирической аппроксимации – например, предложенной в работе [280]:

$$R = 93.4 \frac{E_0^{1.45}}{\rho^{0.91}}, \text{ нм}, \quad (3.9)$$

где ρ – плотность вещества, в мкг/см^3 ; E_0 – энергия электронов в кэВ.

Введенное соотношение и аналогичные им базируются на экспериментально наблюдаемой степенной зависимости значения глубины проникновения электронов в материал от энергии электронов.

Второй этап реализации данной модели предполагает вычисление тока переключения поляризации на основе модифицированной к геометрии задачи формулы Колмогорова – Авраами (2.1), которая далее трансформируется в соотношения (2.5) и (2.6). Переключение поляризации реализуется за счет роста доменов клинообразной формы, с одинаковой скоростью и с одинаковой шириной основания. Особенность предложенного алгоритма симуляции перестройки доменной структуры – организация «включения» отдельных подобластей в случайные моменты времени.

Основным методом реализации данной подзадачи является метод Монте-Карло. На сегодняшний день известен широкий спектр вариаций использования концепции метода Монте-Карло, но все они полагаются на генерацию псевдослучайных чисел для реализации случайных вариантов поведения модели, статистическая совокупность которых (математическое ожидание) дает информацию о поведении системы [279].

Итоговый алгоритм решения прикладной задачи можно формально описать следующей последовательностью шагов.

Шаг 1. Инициализация параметров модели (характерные времена: τ_1 , τ_2 , τ_3 , толщина кристалла L , глубина слоя инжекции электронного пучка l , значение спонтанной поляризации P_S , площадь грани кристалла, S и ее ширина $2y$), физических постоянных (электрическая постоянная ϵ_0) и параметров управления вычислительным процессом (значение порядка дробной производной, шаг по времени, диапазон времени наблюдения θ , диапазон времени, в течение которо-

го будут «включаться» области переключения поляризации – например, $\bar{t} = 0.4\theta$ и число таких подобластей P).

Шаг 2. Задание массива случайных моментов времени «включения» подобластей (первый момент времени – начальный). Задание η частей от объема кристалла (в долях от единицы – например, 0.5), в которых начинается переключение в стартовый момент времени, и расчет весовых коэффициентов для всех остальных подобластей $(1-\eta)/(P-1)$.

Шаг 3. Для каждой подобласти $p = \overline{1, P}$ проводится численное моделирование динамики движения доменной границы с определением ее координаты в каждый момент времени согласно вычислительным схемам, сконструированным по формулам Грюнвальда – Летникова (3.3), Грюнвальда – Летникова – предиктор-корректор (3.4) – (3.5), Капуто – предиктор-корректор (3.6) – (3.7) или Рунге – Кутты (3.8).

Шаг 4. Расчет тока переключения поляризация для каждого момента времени как суперпозиция токов, представляющих собой вклады от отдельных областей, с учетом весовых коэффициентов. Если доменная граница не пересекла границу кристалла, то вычисление проводится по первой формуле из (2.6) и (2.5) соответственно, иначе – по второй формуле.

Шаг 5. Переход к размерным переменным модели. Графический вывод результатов моделирования – изменения положения стенки, зависимость скорости от времени и форма тока переключения поляризации.

3.2. Вычислительные схемы для реализации эредитарных моделей динамических откликов сегнетоэлектриков на тепловые воздействия

Эредитарная модель формирования пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева предполагает решение задачи теплопроводности в дробно-дифференциальной постановке (2.8) – (2.11) и вычисление с использованием найденного распределении

пирозлектрического тока согласно (2.13).

Для построения вычислительной схемы решения уравнения с частными производными с дробной производной по времени будем считать, что в исходной задаче введена производная дробного порядка Грюнвальда – Летникова. Сконструируем конечно-разностную схему, представляющую дробно-дифференциальный аналог схемы Кранка – Николсон. С этой целью воспользуемся формулой Грюнвальда – Летникова (1.5) для определения производной дробного порядка и представлением конечно-разностных операторов (1.5'), соответствующих дробно-дифференциальным операторам, для случая функции многих переменных:

$${}^{GL}D_t^\alpha u(x,t) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{(\Delta t)^\alpha} \sum_{k=0}^{\left[\frac{t-t_0}{\Delta t} \right]} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u(x, t - k\Delta t), \quad (3.10)$$

где $t \geq t_0$; Δt – шаг по времени t .

Приближение второй производной запишем в виде стандартной симметричной конечно-разностной формулы второго порядка точности:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \approx \frac{u(x-\Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x+\Delta x, t)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2). \quad (3.11)$$

Формулу (3.11) можно записать как [44-46]:

$${}^{GL}D_t^\alpha u(x,t) \approx \frac{(\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u_i^{j-k} + O(\Delta t), \quad (3.12)$$

где $x \in [0, L]$, $u_i^j = u(x_i, t^j)$, $x_i = i(\Delta x)$, $t \geq t^0$, $t^j = t^0 + j(\Delta t)$, $j = \overline{0, N}$.

Сформулированная математическая постановка задачи включает неоднородное начальное условие (2.9). Чтобы избежать модификаций, связанных с введением корректирующего слагаемого в конечно-разностную схему, примем температуру окружающей среды $T_0=0$ и далее будем считать, что оценке подлежит температура перегрева материала. При визуализации результата выполним обратный переход.

В условиях начально-граничной задачи (2.8) – (2.11) для дробно-дифференциального уравнения с частными производными введем в

рассмотрение пространственно-временную сетку:

$$\Omega_{\Delta x}^{\Delta \tau} = \left\{ x_i = i(\Delta x), i = \overline{0, M}, \tau^j = \tau^0 + j(\Delta \tau), j = \overline{0, N} \right\},$$

где $\Delta x = \frac{L}{M}$ – шаг по координате x ; $\Delta \tau$ – шаг по времени τ .

Аппроксимация уравнения (2.8) может быть записана на основе модификации конечно-разностных схем, используемых для классических уравнений параболического типа. Введем аналог схемы Кранка – Николсон на основе формул (3.10) – (3.11) для $i = 1, \dots, M-1, j = \overline{0, N-1}$:

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta \tau)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} T_i^{j-k+1} &= \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}) + \\ &+ \frac{b_i^j}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j), \end{aligned} \quad (3.13)$$

где $b_i^j = \frac{k_T t^*}{\rho c (T_i^j)}$, температурная зависимость теплоемкости определяется

посредством прямой аппроксимации экспериментальных данных для конкретного материала с использованием кубического эрмитового сплайна (значение теплоемкости для $(j+1)$ -го временного слоя вычисляется через значение температуры на предыдущем временном слое).

Вычислительная схема (3.13) может быть преобразована к общепринятому виду:

$$\begin{aligned} -\frac{b_i^j (\Delta \tau)^\alpha}{2(\Delta x)^2} T_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{b_i^j (\Delta \tau)^\alpha}{(\Delta x)^2} + 1 \right) T_i^{j+1} - \frac{b_i^j (\Delta \tau)^\alpha}{2(\Delta x)^2} T_{i+1}^{j+1} &= \\ = \frac{b_i^j (\Delta \tau)^\alpha}{2(\Delta x)^2} (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j) - \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=1}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} T_i^{j-k+1}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

где $i = 1, \dots, M-1; j = \overline{0, N-1}$.

В некоторых случаях, чтобы указать, что память системы ограничена q -предшествующими состояниями (“short memory effect”), суммирование в последнем слагаемом (3.14) проводят для $k = \overline{0, q}$ [96]. Шаблон используемой

конечно-разностной схемы представлен на рисунке 3.2.

Система конечно-разностных уравнений (3.14), заданная для всех внутренних узлов сетки, дополняется начальным условием $T_i^0 = 0$ при $i = \overline{0, M}$ и граничными условиями. Учет условия Дирихле проводится для узлов, близлежащих к границе области $T_M^{j+1} = 0$ при $j = \overline{0, N-1}$, а граничное условие Неймана в конечно-разностном виде

$$\frac{T_1^{j+1} - T_{-1}^{j+1}}{2\Delta x} = -\frac{Q}{k_T} \text{ при } j = \overline{0, N-1} \quad (3.15)$$

учитывается в модифицированных уравнениях (3.14) на основе введения фиктивных узлов сетки при $i = -1$. Итоговая система линейных алгебраических уравнений эффективно решается методом прогонки для каждого текущего временного слоя.

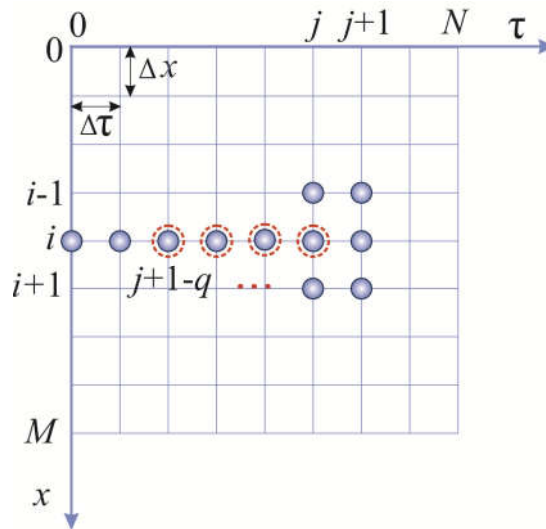


Рисунок 3.2 – Шаблон конечно-разностной явно-неявной схемы (пунктиром отмечены узлы, используемые при вариации модели с учетом кратковременной памяти)

Порядок аппроксимации всей схемы, представляющей аналог схемы Кранка – Николсон, соответствует $O(\Delta\tau + (\Delta x)^2)$. Кроме того, ранее было показано [95], что при $0 < \alpha \leq 1$ схема подобного вида абсолютно устойчива. В целом можно отметить, что неявная схема, описанная, например, в [96, 44], не уступает по порядку аппроксимации схеме Кранка – Николсон для дробно-

дифференциальных уравнений. Однако тестирование схем на предмет практической оценки погрешностей решений свидетельствует, что явно- неявная схема демонстрирует лучший по точности результат. При этом для прикладных задач, которым соответствуют значительные по величине коэффициенты диффузии (тепловой диффузии), дополнительного исследования потребует свойство монотонности конструируемых схем.

Вторая часть процедуры моделирования пирозлектрического отклика включает расчет электрического тока, индуцированного температурным воздействием на кристалл, по формуле (2.13). В этом случае для вычисления производной по времени используется формула численного дифференцирования (аппроксимация «правой разностью» с точностью $O(\Delta t)$). Для расчета интеграла использованы квадратурные формулы Симпсона (второй порядок точности по координате). Для аналитического задания температурной зависимости пироккоэффициента $\gamma(T)$ использована прямая аппроксимация экспериментальных данных кубическими эрмитовыми сплайнами.

Таким образом, алгоритм решения прикладной задачи (2.9) – (2.11), (2.13) можно сформулировать следующим образом.

Шаг 1. Инициализация параметров модели (толщина кристалла d , коэффициент теплопроводности k_T , плотность кристалла ρ , удельная мощность поверхностного тепловыделения Q , начальное значение температуры T_0 , линейный размер модельного объекта для решения тепловой задачи L) и параметров управления вычислительным процессом (диапазон времени моделирования θ , шаги по пространственной координате Δx и времени Δt , порядок дробной производной Грюнвальда – Летникова α).

Шаг 2. Аппроксимация экспериментальных данных температурных зависимостей теплоемкости $c(T)$ и пироккоэффициента $\gamma(T)$ с помощью кубических эрмитовых сплайнов.

Шаг 3. Формирование матрицы коэффициентов и решение системы линейных алгебраических уравнений методом прогонки на основе схемы решения задачи теплопроводности (3.14), с учетом (3.15).

Шаг 4. Переход к размерным величинам. Численное дифференцирование по времени найденного решения для каждого значения по координате (по толщине). Численное интегрирование по толщине кристалла – вычисление значений пиротока для каждого момента времени.

Шаг 5. Графический вывод результатов – температурных распределений и токовых кривых.

3.3. Вычислительные алгоритмы для реализации дробно-дифференциальной модели сегнетоэлектрического гистерезиса и динамики доменной границы

Во второй главе рассмотрены различные модификации уравнения Ландау – Халатникова, в том числе и с производными целого порядка. В частности, для поиска численного решения уравнения параболического типа (2.19) воспользуемся неявной пятиточечной трехслойной схемой [2]. На пространственно-временной сетке $\Omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \{x_i = i(\Delta x), i = \overline{0, M}, t^j = j(\Delta t), j = \overline{0, N}\}$, покрывающей расчетную область, где Δx – шаг по координате, Δt – шаг по времени, построим вычислительную схему, которая после некоторых преобразований может быть выражена следующим образом:

$$\frac{P_i^{j+1} - P_i^j}{\Delta t} = D \left(\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{2(\Delta x)^2} + \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{2(\Delta x)^2} \right) + \varphi(P_i^{j+1}) + \sigma E^{j+1},$$

$$i = \overline{1, M-1}, \quad j = 0;$$

$$\frac{3P_i^{j+1} - 4P_i^j + P_i^{j-1}}{2\Delta t} = D \left(\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \right) + \varphi(P_i^{j+1}) + \sigma E^{j+1},$$

$$i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1},$$

где $\varphi(P_i^{j+1}) = aP_i^{j+1} + b(P_i^{j+1})^3 - c(P_i^{j+1})^5$.

В данном случае также применялась итерационная схема, что связано с наличием нелинейных членов в уравнении реакция-диффузия. Более подробное

описание итерационной процедуры будет представлено ниже. Получившаяся схема сводится к системе линейных алгебраических уравнений. Отметим, что первое и последнее уравнение системы для каждого временного слоя следует модифицировать с учетом граничных условий. Неявная пятиточечная трехслойная схема абсолютно устойчива и обеспечивает второй порядок точности по временной и пространственной переменным $O((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2)$. Система линейных алгебраических уравнений эффективно решается методом прогонки.

Кроме того, во второй главе в рассмотрение введены следующие постановки задач моделирования: модификация модели Ландау – Халатникова в форме задачи Коши для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения (2.24); эредитарная модификация обобщенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова применительно к задачам исследования гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля (2.28) – (2.30) и движения доменной стенки (2.31) – (2.33) в форме начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными. Кроме того, рассмотрена обобщенная постановка для решения уравнения аномальной диффузии (2.35) – (2.37).

Поскольку построение точного решения уравнения Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова вызывает затруднения у исследователей, привлекательной альтернативой является поиск приближенного решения с помощью сеточных методов, методов взвешенных невязок, метода конечных элементов и др. Каждый из перечисленных методов имеет свои слабые и сильные стороны. Так, в [281] для решения кубического уравнения Гинзбурга – Ландау был применен спектральный метод, основанный на быстром преобразовании Фурье. Преимущество спектральных методов заключается в высокой точности. В то же время метод конечных разностей подходит для параллельной реализации (как это было выполнено, например, в [282] для кубическо-квинтического уравнения Гинзбурга – Ландау). Построение

конечно-разностных схем для нелинейных уравнений требует баланса между высокой точностью аппроксимации и обеспечением численной устойчивости. Использование приближения высокого порядка может привести только к соответствующей устойчивости численной схемы [282-284]. В частности, конечно-разностные методы широко применяются при решении дробно-дифференциальных уравнений.

Задача Коши для нелинейного дробно-дифференциального уравнения (2.18) соответствует обобщенной задаче (3.1). В качестве определения дробной производной рассмотрим формулу Капуто. Решение данной задачи строится на основе модифицированного метода «предиктор-корректор» Адамса – Башфорта – Моултона, аналогично процедуре, формализованной с помощью соотношений (3.6) – (3.7). Для построения численного решения исходной дифференциальной задачи с целой производной применен метод Рунге – Кутты IV порядка.

Для получения приближенного решения задач в постановке начально-граничных задач для одномерного уравнения с частными производными и с дробной производной по времени построена вычислительная схема, основанная на определении дробной производной Капуто (1.3), неявном методе конечных разностей и итерационной процедуре.

В качестве аппроксимации дробной производной Капуто (1.3) используем формулу (1.7), предложенную авторами в [41]. Вывод аппроксимации дробной производной Капуто основан на разложении подынтегральной функции в ряд Тейлора с последующей заменой производных конечно-разностными соотношениями. Для функции двух переменных формула (1.7) примет вид:

$${}^c D_t^\alpha u(t^{j+1}, x_i) = \mu \sum_{k=0}^j \left[w_{1,j-k+1} (u_i^{k+1} - u_i^{k-1}) + w_{2,j-k+1} (u_i^{k+1} - 2u_i^k + u_i^{k-1}) \right], \quad (3.16)$$

где $\mu = \frac{(\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}$; Δt – шаг по времени; $u_i^{j+1} = u(x_i, t^{j+1})$; $j = \overline{0, N-1}$; $0 < \alpha < 1$;

$i = \overline{0, M}$. Значения, которые принимают весовые функции $w_{1,j-k+1}$, $w_{2,j-k+1}$:

$$w_{1,j-k+1} = \frac{2-\alpha}{2} \left[(k-j+1)^{1-\alpha} - (k-j)^{1-\alpha} \right],$$

$$w_{2,k-j+1} = (k-j+1)^{2-\alpha} - (k-j)^{2-\alpha} - (2-\alpha)(k-j)^{1-\alpha},$$

при $j = \overline{0, N-1}$, $k = \overline{0, j}$.

Итоговая схема для решения рассматриваемой задачи будет иметь вид, включающий предикторную и корректорную части, аналогичные (3.6) и (3.7).

В работе [41] также найдено численное решение уравнения адвекции-диффузии с дробной производной по времени и исследована устойчивость и сходимость полученной разностной схемы. Порядок аппроксимации (3.16) по времени составляет $O((\Delta t)^{3-\alpha})$.

Используя идею построения неявной конечно-разностной схемы в сочетании с аппроксимацией дробной производной Капуто по времени (3.16) и конечно-разностной аппроксимацией пространственной производной второго порядка (3.11), можно сформулировать конечно-разностные аналоги дифференциальных уравнений (2.28) и (2.31) на пространственно-временной сетке:

$$\begin{aligned} \Omega_{\Delta x}^{\Delta \tau} &= \left\{ x_i = i\Delta x, \quad i = \overline{0, M}, \quad \tau^j = j\Delta \tau, \quad j = \overline{0, N} \right\}. \\ \frac{(\Delta \tau)^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^j &\left[w_{1,j-k+1} (P_i^{k+1} - P_i^{k-1}) + w_{2,j-k+1} (P_i^{k+1} - 2P_i^k + P_i^{k-1}) \right] = \\ &= \frac{\bar{D}}{(\Delta x)^2} (P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}) + \bar{a}P_i^{j+1} + \bar{b} (P_i^{j+1})^3 - \bar{c} (P_i^{j+1})^5 + \bar{\sigma}E^{j+1}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

где $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{0, N-1}$.

Поскольку (2.22) и (2.25) – нелинейные уравнения в частных производных, то в процессе решения придем к системе нелинейных разностных уравнений на каждом временном слое. Следовательно, рационально использовать итерационную процедуру, которая позволит решить систему линейных алгебраических уравнений. Таким образом, мы формируем последовательность приближений $P_i^{(s)}$, сходящуюся к P_i^{j+1} для каждого момента времени τ^{j+1} , $j = \overline{0, N-1}$.

В качестве первоначального приближения используем формулы:

$(P_i^{(s)})^3 \approx (P_i^{(s-1)})^2 P_i^{(s)}$, $(P_i^{(s)})^5 \approx (P_i^{(s-1)})^4 P_i^{(s)}$, где номер итерации $s=1,2,\dots$, начиная с $(P_i^{(0)}) \approx P_i^j$.

Согласно [41], при использовании (3.16) в вычислительной схеме (3.17) на каждом временном слое появляется фиктивный узел P^{-1} , их можно аппроксимировать следующим способом: $P^{-1} = P^0 + O(\Delta t)$. Если

$\frac{\partial P(x,0)}{\partial t} = \frac{\partial^2 P(x,0)}{\partial t^2} = 0$, то $P_i^{-1} = P_i^0$. Заметим, что полученная схема (называемая также формулой L1-2 [40, 41]) намного эффективнее и точнее, чем формула L1, которая выводится с использованием прямой конечной аппроксимации производной Капуто [285].

Итерационный алгоритм на временном шаге $j+1$ начинается с оценки начального значения поляризации с использованием значения из предыдущего временного шага, т.е. $P_i^{(0)} = P_i^j$. Комбинация схем конечных разностей с итерационной процедурой позволяет решать прикладные задачи без потери точности общей вычислительной схемы.

Дополним (3.17) начальным условием $P_i^0 = 0$, $i = \overline{0, M}$ и несимметричными конечно-разностными аппроксимациями для первых производных из граничных условий III рода (2.24) при $j = \overline{0, N-1}$:

$$\frac{-3P_0^{j+1} + 4P_1^{j+1} - P_2^{j+1}}{2\Delta x} = \frac{P_0^{j+1}}{\lambda}, \quad (3.18)$$

$$\frac{3P_M^{j+1} - 4P_{M-1}^{j+1} + P_{M-2}^{j+1}}{2\Delta x} = -\frac{P_0^{j+1}}{\lambda}. \quad (3.19)$$

Следовательно, при реализации математической модели динамики доменной границы (2.25) – (2.27) конструируемая вычислительная схема будет отличаться заданным соответствующим дискретным аналогом начального условия

$$P_i^0 = P_0 \tanh\left(\frac{x_i}{\xi}\right), \text{ для } i = \overline{0, M} \quad (3.20)$$

и граничных условий: $P_0^j = -P_0$, $P_M^j = P_0$, при $j = \overline{0, N}$. (3.21)

Общая система алгебраических уравнений решается методом Гаусса, что гарантирует решение с погрешностью, определяемой точностью вычислений. Разработанный вычислительный алгоритм подчеркивает связь между прикладной структурой дробных производных и формализованным физическим процессом с долговременной памятью. Значение поляризации в данный момент времени зависит не только от поведения поляризации в окрестности этой точки, но также от значений всего диапазона временной переменной. Модификация неявной итерационной конечно-разностной схемы основана на приближении дробной производной Капуто для решения нелинейного уравнения в частных производных с дробной производной по времени.

Таким образом, алгоритм решения задачи моделирования поляризационного отклика сегнетоэлектрика включает следующую совокупность шагов.

Шаг 1. Инициализация параметров моделирования (толщина кристалла/пленки L , амплитуда поля E_0 , частота колебаний электрического поля f), физических констант (термодинамические параметры кристалла A, B, C , термодинамическая постоянная ψ , кинетический коэффициент δ , характерный параметр (длина экстраполяции) λ) и параметров управления вычислительным процессом (температура T , время симуляции процесса θ , порядок дробной производной Капуто α , шаги по времени Δt и координате Δx).

Шаг 2. Решение дробно-дифференциальной задачи согласно описанной вычислительной схеме: для каждого момента времени организуется итерационный процесс решения систем линейных уравнений до достижения априорно заданной точности. Результатом является пространственно-временное распределение поляризации $P(x, t)$. Расчет значения поляризации в центральной точке области решения и/или усредненного значения по толщине кристалла.

Шаг 3. Визуализация параметрической зависимости поляризации от приложенного поля $P(E)$, поляризационного тока $I(t)$ как функций времени (для модели гистерезисной зависимости), визуализация изменения координаты и

скорости движения доменной границы (в модели динамики доменной структуры).

Далее рассмотрим построение вычислительных схем для реализации обобщенной модели аномальной диффузии, формализованной в виде нелинейной начально-граничной задачи (2.29) – (2.31). Рассмотрим два варианта конечно-разностных схем, построенных на основе определений Римана – Лиувилля (и, соответственно, Грюнвальда – Летникова) и Капуто.

В случае, когда дробные производные по времени и координате задаются как производные Римана – Лиувилля, для численной аппроксимации нецелых производных в уравнении (2.29) воспользуемся формулой Грюнвальда – Летникова (3.10).

В работах [44-46] предложена модификация неявной схемы для решения уравнения аномальной диффузии. Конечно-разностный оператор для производной по времени получен из формулы (3.12), а для производной по координате выведен путем смещения на один шаг вправо стандартной формулы Грюнвальда – Летникова:

$${}^{GL}D_x^\beta u(x,t) \approx \frac{(\Delta x)^{-\beta}}{\Gamma(-\beta)} \sum_{l=0}^{i+1} \frac{\Gamma(l-\beta)}{\Gamma(l+1)} u_{i-l+1}^j + O(\Delta x), \quad (3.22)$$

где $x \in [0, L]$, $u_i^j = u(x_i, t^j)$, $x_i = i(\Delta x)$, $i = 0, 1, \dots, M$, $t^j = t^0 + j(\Delta t)$, $j = 0, 1, \dots$

Неявная схема для решения уравнения (2.29), основанная на аппроксимациях нецелых производных на пространственно-временной сетке $\Omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \{x_i = i(\Delta x), i = \overline{0, M}, t^j = j(\Delta t), j = \overline{0, N}\}$, примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u_i^{j-k+1} = d_i \frac{(\Delta x)^{-\beta}}{\Gamma(-\beta)} \sum_{l=0}^{i+1} \frac{\Gamma(l-\beta)}{\Gamma(l+1)} u_{i-l+1}^{j+1} + \varphi(u_i^{j+1}) + \\ + f(x_i, t^{j+1}), \end{aligned} \quad (3.23)$$

где $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{0, N-1}$.

Шаблон неявной схемы (3.23) показан на рисунке 3.3. Доказана также [44] абсолютная устойчивость полученной неявной схемы для дробно-диффузионного уравнения. Точность вычислительной схемы (3.23) при

$\varphi(u(x,t))=0$ соответствует $O(\Delta x + \Delta t)$. В отличие от линейного уравнения аномальной диффузии, описанного в [44-46], условия наших задач (2.22) – (2.24) и (2.25) – (2.27) содержат нелинейную часть. Поэтому построение конечно-разностной схемы для численного моделирования включает дополнительно итерационную процедуру.

Рассмотрим конечно-разностную аппроксимацию нелинейного дробно-диффузионного уравнения в следующем общем виде:

$$\frac{(\Delta t)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \sum_{k=0}^{j+1} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} u_i^{j-k+1} = D \frac{(\Delta x)^{-\beta}}{\Gamma(-\beta)} \sum_{l=0}^{i+1} \frac{\Gamma(l-\beta)}{\Gamma(l+1)} u_{i-l+1}^{j+1} + \varphi(u_i^{j+1}) + f(x_i, t^{j+1}). \quad (3.24)$$

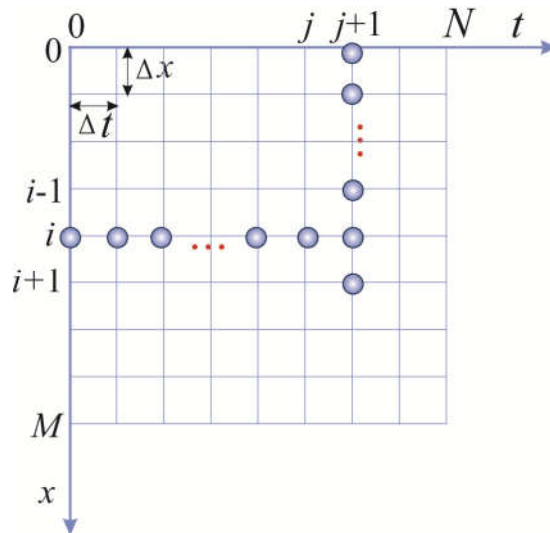


Рисунок 3.3 – Шаблон модифицированной неявной схемы

Поскольку уравнение представляет собой полулинейную модификацию аномального уравнения диффузии, возникает подзадача, связанная с аппроксимацией реакционных слагаемых. В нашем случае в вычислительный алгоритм для каждого временного слоя j была введена итерационная схема $(u_i^{(p)})^3 \approx (u_i^{(p-1)})^2 u_i^{(p)}$, $(u_i^{(p)})^5 \approx (u_i^{(p-1)})^4 u_i^{(p)}$, где $p=1,2,\dots$ – номер итерации, начиная с некоторого $u_i^{(p)} = u_i^j$. Как показал численный анализ, требуется 3-4 итерации для достижения точности, априори ограниченной точностью самого конечно-разностного метода.

В качестве второго варианта рассмотрим построение конечно-разностной схемы для решения уравнения (2.29), используя определение дробной производной Капуто. Схему будем строить на основе аппроксимаций, предложенных [41] для нецелой производной по времени $0 < \alpha < 1$ (3.13) и [42] для дробной производной по координате $1 < \beta \leq 2$. Вывод аппроксимации дробной производной Капуто по пространственной переменной основывался на формуле центральной разности и линейном сплайне [42].

Перепишем формулу (1.8) для функции от двух переменных:

$${}^c \tilde{D}_x^\beta u(x_i, t^{j+1}) = \frac{\Delta x^{-\beta}}{\Gamma(4-\beta)} \left\{ v_{i,0} \delta_0^2 u_0^{j+1} + \sum_{l=1}^i v_{i,l} (u_{l+1}^{j+1} - 2u_l^{j+1} + u_{l-1}^{j+1}) \right\}, \quad (3.25)$$

где $\delta_0^2 u_0^{j+1} = (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, t^{j+1})$.

На основе введенных аппроксимаций сконструируем неявную конечно-разностную схему для численной реализации математической модели аномальной диффузии. Пусть $\Omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \{x_i = i(\Delta x), i = \overline{0, M}, t^j = j(\Delta t), j = \overline{0, N}\}$ – пространственно-временная сетка, покрывающая расчетную область, где Δx – шаг по координате, Δt – шаг по времени. Для функции двух переменных $u(x, t)$ введем в рассмотрение дифференциальные операторы дробного порядка.

С использованием аппроксимаций поставим в соответствие непрерывной задаче (2.29) – (2.31) ее конечно-разностный аналог:

$$\begin{aligned} & \delta \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^j \left[w_{1,j-k+1} (u_i^{k+1} - u_i^{k-1}) + w_{2,j-k+1} (u_i^{k+1} - 2u_i^k + u_i^{k-1}) \right] = \\ & = D \frac{\Delta x^{-\beta}}{\Gamma(4-\beta)} \left\{ v_{i,0} \delta_0^2 u_0^{j+1} + \sum_{l=1}^i v_{i,l} (u_{l+1}^{j+1} - 2u_l^{j+1} + u_{l-1}^{j+1}) \right\} + \varphi(u_i^{j+1}) + f(x_i, t^{j+1}), \end{aligned} \quad (3.27)$$

где $u_i^0 = u(x_i, 0)$, $u_0^{j+1} = u(0, t^{j+1})$, $u_{M-1}^{j+1} = u(L, t^{j+1})$, $u_{M-1}^{j+1} = u(L, t^{j+1})$ при $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{0, N-1}$.

Используя приближение, запишем локальную ошибку усечения R_i^j разностной схемы (3.27) [41, 42]:

$$\begin{aligned}
R_i^{j+1} = & \delta \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sum_{k=0}^j \left[w_{1,j-k+1} (u_i^{k+1} - u_i^{k-1}) + w_{2,j-k+1} (u_i^{k+1} - 2u_i^k + u_i^{k-1}) \right] - \\
& - {}^C D_x^\alpha u(x_i, t^{j+1}) - D \frac{\Delta x^{-\beta}}{\Gamma(4-\beta)} \left\{ v_{i,0} \delta_0^2 u_0^{j+1} + \sum_{l=1}^i v_{i,l} (u_{l+1}^{j+1} - 2u_l^{j+1} + u_{l-1}^{j+1}) \right\} - \\
& - {}^C \tilde{D}_x^\beta u(x_i, t^{j+1}) = \delta O((\Delta t)^{3-\alpha}) - DO((\Delta x)^2) = O((\Delta t)^{3-\alpha} + (\Delta x)^2).
\end{aligned}$$

Итоговая неявная конечно-разностная схема будет иметь порядок аппроксимации $O((\Delta t)^{3-\alpha} + (\Delta x)^2)$. Решение на каждом новом временном слое находится через значения решений на всех предыдущих слоях. Конструкция неявной схемы, как и в случае ее целочисленного аналога, приводит к необходимости решения систем линейных алгебраических уравнений на каждом шаге по времени.

Численное решение систем линейных алгебраических уравнений проводилось методом Гаусса.

Таким образом, решение нелинейного уравнения аномальной диффузии требует выполнения следующих шагов алгоритма.

Шаг 1. Инициализация параметров модели и вычислительного процесса (размер расчетной области L , время моделирования процесса θ , характерные константы модели d, q, g , функции $\varphi(u), f(x, t)$, шаги по времени Δt и координате Δx , порядки дробного дифференцирования α и β).

Шаг 2. Для каждого момента времени формирование матрицы коэффициентов и столбца свободных членов согласно введенным аппроксимациям. Численное решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса.

Шаг 3. Вывод графических представлений результатов – пространственно-временного распределения искомой функции $u(x, t)$.

3.4. Основные результаты и выводы

Таким образом, в главе 3 предложен набор вычислительных схем, предназначенных для реализации математических моделей формирования динами-

ческих откликов сегнетоэлектриков, как фрактальных физических систем с памятью.

Разработана вычислительная схема, основанная на гибридном фрактально-стохастическом подходе к математическому моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков. Математическая модель динамической системы включает начальную задачу для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка. Приведено несколько вариантов вычислительных схем, построенных с помощью определения Грюнвальда – Летникова, концепции предиктор-корректорных схем в рамках вариации метода Адамса – Башфорта – Моултона на основе определений Грюнвальда – Летникова и Капуто. На базе метода Монте-Карло предложен стохастический алгоритм симуляции процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика. Особенностью предложенного алгоритма симуляции перестройки доменной структуры является «включение» отдельных подобластей в случайные моменты времени.

Сформулирован вычислительный алгоритм для решения прикладной задачи оценки пирозлектрического отклика сегнетоэлектрического кристалла при интенсивном по отношению к температуре фазового перехода тепловом нагреве. В основе алгоритма – процедура численного решения уравнения теплопроводности с дробной производной по времени с использованием формулы Грюнвальда – Летникова и схемы Кранка – Николсон.

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 строится с использованием определения Капуто. Также на основе определения Капуто построены конечно-разностные схемы для реализации моделей, включающих

дробно-дифференциальное уравнение Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова с производной по времени дробного порядка.

Для обобщенной нелинейной модели аномальной диффузии построены две альтернативные вычислительные схемы: на основе определения Грюнвальда – Летникова и на основе определения Капуто. Особенностью введенных схем является комбинация метода конечных разностей и итерационных процедур, позволяющих строить вычислительные алгоритмы для решения полулинейных дифференциальных задач.

4. КОМПЛЕКС ПРОГРАММ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Для проведения вычислительных экспериментов на основе разработанных математических моделей, представленных во второй и третьей главах диссертационной работы, и комплексного исследования динамических характеристик рассмотренных физических систем требуются проектирование и программная реализация прикладных программ специального назначения.

Дифференциальные задачи в классических постановках (на основе целочисленных производных) могут быть эффективно решены с использованием систем конечно-элементного инженерного анализа COMSOL Multiphysics, ANSYS, NASTRAN, которые в общем случае позволяют избежать трудоемких процедур программирования. Однако все рассмотренные прикладные задачи (ассоциированные с процессами формирования поляризационных откликов сегнетоэлектриков) в математической постановке включают дробно-дифференциальные уравнения. В настоящее время для реализации моделей, описываемых дробно-дифференциальными уравнениями, не существует специализированного программного обеспечения, позволяющего найти решение задач с использованием встроенного инструментария. Это обуславливает необходимость разработки авторского проблемно-ориентированного программного комплекса для компьютерного моделирования нестационарных процессов, протекающих во фрактальных физических средах.

В настоящей главе представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования динамических откликов сегнетоэлектриков (на основе дробно-дифференциального подхода), проведены проверка адекватности результатов, интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов. Представленные результаты опубликованы в работах автора [2, 68-70, 107, 118-128, 266]; разработанные прикладные программы подтверждены свидетельствами об официальных регистрациях программ для ЭВМ [286-288].

4.1. Описание, назначение и структура программного комплекса

Для программной реализации вычислительных алгоритмов, описанных в главе 3, выбран пакет прикладных программ Matlab. К основным достоинствам ППП Matlab можно отнести простоту в использовании благодаря присутствию командной строки и файловой структуре; независимость от платформы; наличие встроенной библиотеки функций для многих predefined задач; существование широкого набора средств для построения графиков и визуализации динамических процессов; быстрое выполнение операций с матрицами и возможность обработки больших наборов данных. Кроме того, ППП Matlab предоставляет удобный инструмент для разработки приложений на основе графического интерфейса пользователя.

Проектируемый в ППП Matlab программный комплекс имеет модульную структуру и предназначен для программного решения следующих задач: начальная задача для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка в постановке (3.1), начально-граничная задача для дробно-дифференциального уравнения с частными производными в постановке (2.29) – (2.31).

Для управления режимами работы разработан пользовательский интерфейс с возможностью настройки параметров вычислительных экспериментов и графического представления полученных данных (Приложение А). Интерфейс системы компьютерного моделирования ориентирован на расчет и визуализацию нестационарных характеристик поляризационных откликов сегнетоэлектриков в различных режимах:

- 1) кинетика переключения сегнетоэлектриков в режиме инжекции электронов;
- 2) распределение температурных полей в материалах с присутствием эффекта памяти;
- 3) характеристики сегнетоэлектриков как фрактальных физических сред с памятью.

Приведем описание программного обеспечения решаемых научных задач (согласно стандартной спецификации требований). Формализованное описание функций и ограничений разработанных программ представлено ниже.

1. *Название задачи и системные требования.* Название комплекса программ – «Комплекс программ моделирования динамических откликов сегнетоэлектрических материалов».

Наименование программных модулей:

1.1. «Программа моделирования электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе мелко-стохастического подхода» (рисунок А.1 в Приложении А);

1.2. «Программа численного моделирования процесса теплопроводности эрелитарных сред в нелинейных режимах» (рисунок А.2 в Приложении А);

1.3. «Программа расчета характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции мелко-дифференциального термодинамического подхода» (рисунок А.3 в Приложении А).

Рекомендуемые системные требования:

операционная система: Microsoft Windows XP/Vista/Server/7, 8;

процессор – любой процессор Intel или AMD, поддерживающий набор инструкций SSE;

оперативная память – не менее 2048 МБ;

видеокарта – рекомендуется с аппаратным ускорением, поддерживающая OpenGL 3.3 с 1 ГБ памяти графического процессора.

Свободное место на жестком диске: 1 ГБ только для Matlab, 3-4 ГБ для типовой установки.

Программное обеспечение – Matlab R 2014b. Право использования ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»: Academic classroom 25 по договору № 2013.199430/949 от 20.11.2013.

2. *Описание.* Комплекс имеет модульную структуру.

Программный модуль 1. Программа предназначена для компьютерного моделирования кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции

электронов. В основе программной реализации лежит схема «предиктор-корректор» для численного решения дробно-дифференциального уравнения, описывающего процесс динамики доменной границы. Симуляция процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика проведена с помощью метода Монте-Карло. Подробная математическая постановка задачи моделирования и алгоритм ее реализации описаны в разделах 2.1 и 3.1 соответственно.

Программный модуль 2. Программа предназначена для компьютерного моделирования распределения температурных полей в материалах, характеризующихся присутствием эффекта памяти. Вычислительный алгоритм решения задачи теплопроводности построен на основе аналога конечно-разностной схемы Кранка – Николсон, с использованием формулы Грюнвальда – Летникова для аппроксимации производной дробного порядка по времени. Параметры моделирования инициализированы для проведения вычислительного эксперимента по оценке температурного нагрева типичного сегнетоэлектрика с учетом нелинейных зависимостей теплофизических характеристик кристалла от температуры. Подробная математическая постановка задачи моделирования и алгоритм ее реализации описаны в разделах 2.2 и 3.2 соответственно.

Программный модуль 3. Программа предназначена для компьютерного моделирования поляризационных характеристик сегнетоэлектриков. В основе алгоритма лежит дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова. Вычислительная схема решения нелинейного уравнения аномальной реакции-диффузии построена как неявная итерационная конечно-разностная, с учетом аппроксимации производной дробного порядка по времени. Подробная математическая постановка задачи моделирования и алгоритм ее реализации описаны в разделах 2.3 и 3.3 соответственно.

3. *Управление режимами работы программы.* Для управления режимами работы программы разработан Windows интерфейс с использованием меню, диалоговых окон, полей ввода данных, функциональных кнопок.

4. Входные данные.

4.1. Входные данные для программного модуля «Моделирование электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе дробно-стохастического подхода»:

толщина кристалла, м;
 линейные размеры облучаемой области кристалла, м;
 глубина инъекции, м;
 характерные параметры времени, с;
 временной диапазон, с;
 диэлектрическая проницаемость образца;
 спонтанная поляризация, Кл/м²;
 порядок дробной производной.

4.2. Входные данные для программного модуля «Численное моделирование процесса теплопроводности эрдитарных сред в нелинейных режимах»:

коэффициент теплопроводности, Вт/(К·м);
 плотность материала, кг/м³;
 удельная теплоемкость;
 поверхностная мощность источника, Вт/м²;
 линейный размер расчетной области, м;
 толщина кристалла, м;
 аппроксимационные зависимости теплоемкости (Дж/(кг·К)) и пироккоэффициента (Кл/(м²·К)) от температуры;
 промежуток времени наблюдения, с.

4.3. Входные данные для программного модуля «Расчет характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции дробно-дифференциального термодинамического подхода»:

толщина кристалла; толщина пленки, м; нм;
 термодинамические параметры (A , м/Ф; B , м⁵/(Кл²·Ф); C , м⁹/(Кл⁴·Ф));
 амплитуда поля, В/м;
 частота поля, Гц;

начальное значение поляризации, Кл/м²;

кинетический коэффициент, м·с/Φ;

градиентный коэффициент, м³/Φ;

термодинамический параметр (длина экстраполяции), м.

5. Выходные данные

5.1. Для программного модуля «Моделирование электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе дробно-стохастического подхода»: двумерные визуализации зависимости координаты от времени при движении доменной стенки и тока переключения поляризации.

5.2. Для программного модуля «Численное моделирование процесса теплопроводности эрелитарных сред в нелинейных режимах»: двумерные визуализации распределения температуры и пироотклика кристалла ТГС на воздействие теплового источника.

5.3. Для программного модуля «Расчет характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции дробно-дифференциального термодинамического подхода»: двумерные и трехмерные визуализации пространственно-временного распределения поляризации, движения доменной стенки и петель сегнетоэлектрического гистерезиса.

6. Структура и режимы работы программного комплекса

Исходя из задач, предъявляемых к программному комплексу, его структуру можно представить в виде модульной архитектуры, показанной на рисунке 4.1. Функциональные элементы комплекса можно разделить на три основные части: «Моделирование электронно-индуцированного переключения» – блок, отвечающий за расчет кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инжекции электронов; «Моделирование процесса теплопроводности» – блок расчета распределения температурных полей в сегнетоэлектриках; «Моделирование переключения поляризации» – блок расчета распределения поляризационных характеристик сегнетоэлектриков.

Комплекс программ обладает дружественным интерфейсом, возможно-

стью гибкой настройки режимов вычислительного эксперимента и необходимым функционалом для решения рассматриваемого класса задач.



Рисунок 4.1 – Общая схема структуры программного комплекса

Отметим, что разработанные программы можно использовать 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, гибкого управления вычислительным процессом и надстройки решателей при модификации математических моделей или вычислительных алгоритмов.

4.2. Верификация программных решений с использованием тестовых задач

Для верификации найденных результатов и валидации разработанных программ проведем сравнение результатов, полученных с помощью построен-

ных конечно-разностных схем (глава 3), с аналитическими решениями тест-задач. Кроме того, в данном разделе представим результаты численного анализа сконструированных схем.

4.2.1. Проверка адекватности работы вычислительных алгоритмов решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений дробного порядка

Уравнение динамики доменной границы и уравнение Ландау – Халатникова в общем виде сводятся к задаче Коши для дифференциального уравнения дробного порядка. С целью проверить адекватность работы прикладной программы проведем верификацию вычислительных алгоритмов на основе сравнения численных и аналитических решений, полученных для тестовых задач.

Тест-пример 1. Рассмотрим обыкновенное дробно-дифференциальное уравнение с однородным начальным условием

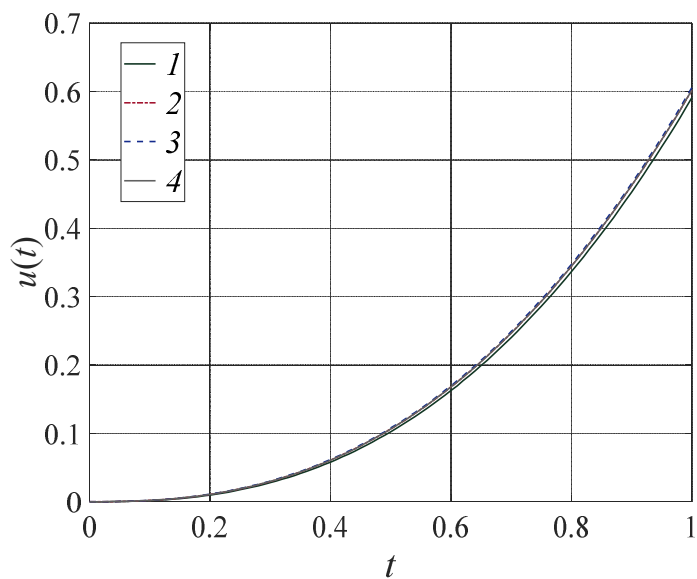
$$\frac{d^{0.5}u(t)}{dt^{0.5}} = t^2, \quad u(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (4.1)$$

Аналитическое решение задачи (4.1) имеет вид: $u_{ex}(t) = 16t^{3/2} / (15\sqrt{\pi})$. Ее численные решения, полученные на основе сеточных методов, в сравнении с аналитическим решением приведены на рисунке 4.2 а, при значении шага дискретизации по времени $\Delta t = 0.01$.

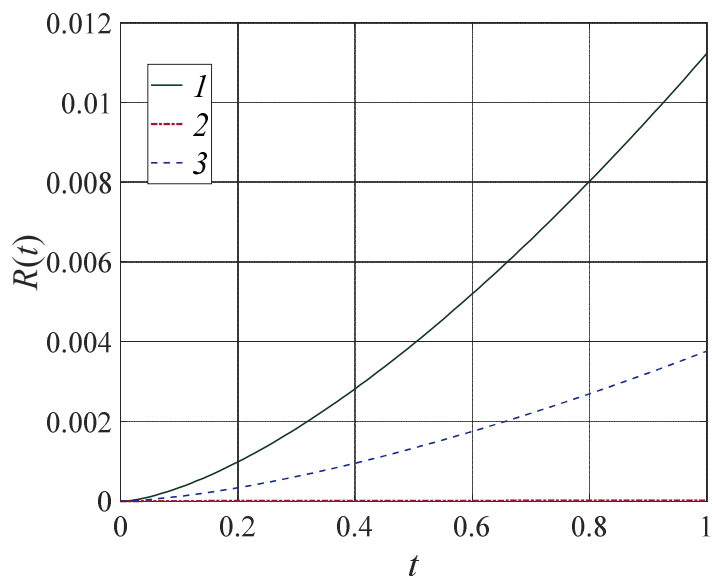
Рисунок 4.2 б визуализирует абсолютные величины невязок найденных решений $|R(t)| = |u_{\Delta}(t) - u_{ex}(t)|$. Оценка абсолютной погрешности с помощью нормы Евклида для каждого метода дает следующий результат: явная схема – 0.057 (на основе формулы Грюнвальда – Летникова); схема «предиктор-корректор» (на основе определения Капуто) – 0.00013; схема «предиктор-корректор» (на основе формулы Грюнвальда – Летникова) – 0.019.

Уменьшение шага по времени дает меньшую погрешность результатов, сохраняя соотношение между точностью методов в пользу схемы «предиктор-корректор», построенную на основе определения Капуто. Модифицированная схема прогноза и коррекции (на основе формулы Грюнвальда – Летникова) дает

лучший результат по сравнению с явной схемой, она более проста в алгоритмическом плане по сравнению со схемой «предиктор-корректор» на основе определения Капуто.



a



б

Рисунок 4.2 – Сравнение численных решений задачи с аналитическим (*a*) и динамика невязки численного решения (*б*): 1 – по явной схеме (на основе формулы Грюнвальда – Летникова); 2 – по схеме «предиктор-корректор» (на основе определения Капуто); 3 – по схеме «предиктор-корректор» (на основе формулы Грюнвальда – Летникова); 4 – аналитическое решение

4.2.2. Проверка адекватности работы вычислительных алгоритмов моделирования процесса аномальной диффузии

Обобщенная постановка начально-граничной задачи для математической модели формирования динамических откликов может быть представлена в концепции модели аномальной диффузии. Для верификации вычислительных схем для уравнений, описывающих процессы распределения поляризации, движения доменной стенки и температурного распределения в сегнетоэлектриках, рассмотрим следующие тест-примеры.

Тест-пример 2. Рассмотрим следующее уравнение в частных производных с дробной производной по времени и целой по координате:

$$\frac{\partial^{0.85} u(x,t)}{\partial t^{0.85}} = 0.5 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3.15)} x^3 t^{2.15} - 3xt^3, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \quad (4.2)$$

$$\text{с начальным условием: } c(x,0) = 0 \text{ при } 0 \leq x \leq 1 \quad (4.3)$$

$$\text{и граничными условиями: } u(0,t) = 0, u(1,t) = t^3, \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (4.4)$$

Точным решением (4.2) – (4.4) является функция $u(x,t) = x^3 t^3$. На рисунке 4.3 показаны результаты численного решения задачи (4.2) – (4.4) с использованием определения Капуто (неявная схема (3.17)) и определения Грюнвальда – Летникова (3.12), в сравнении с аналитическим решением.

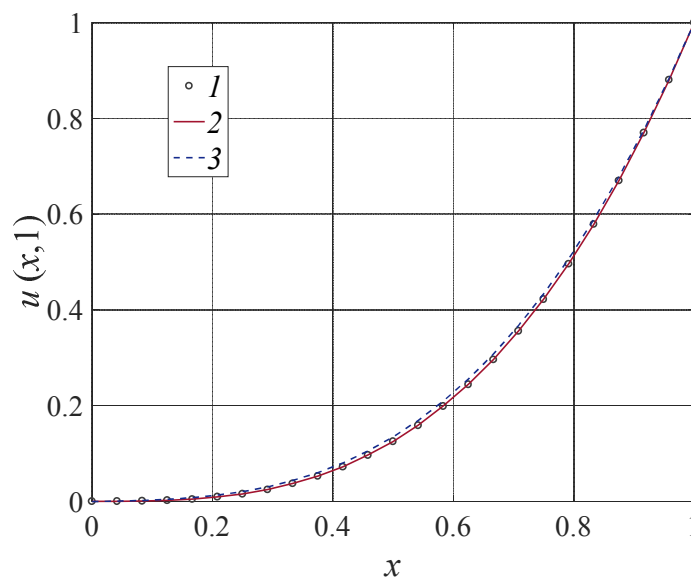


Рисунок 4.3 – Точное – 1 и приближенные решения задачи (4.2) – (4.4) на основе определений: Капуто – 2; Грюнвальда – Летникова – 3

Графики визуализируются как координатные профили функции $u(x,t)$, рассчитанные при $\Delta x = \Delta t = 0.125$ в последний момент времени наблюдения.

Кроме того, был проведен численный анализ решений задачи (4.2) – (4.4). Точность результатов оценивалась с использованием равномерной нормы $\delta = \|u - \tilde{u}\|_{\infty} / \|u\|_{\infty}$, где \tilde{u} – численное решение, u – точное решение, рассчитанное для последнего момента времени $t=1$. Относительная погрешность δ в двойном логарифмическом масштабе при изменении количества узлов M, N по осям x и t соответственно представлена на рисунке 4.4.

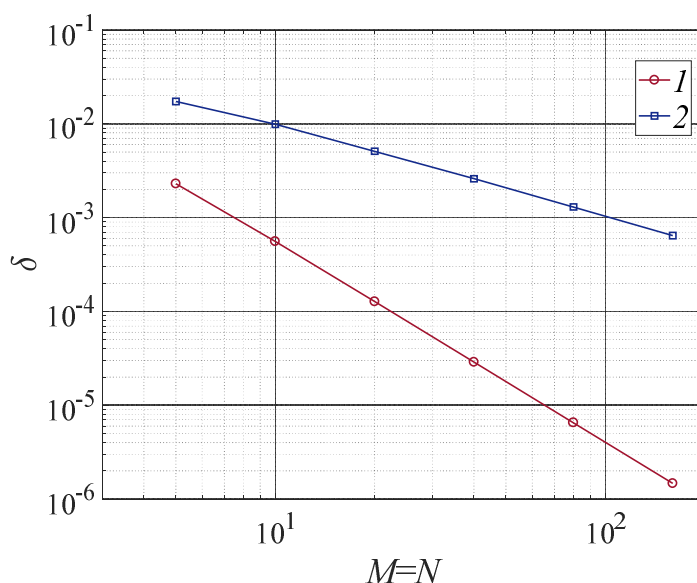


Рисунок 4.4 – Зависимость погрешности δ от числа разбиений сетки в двойном логарифмическом масштабе для численных решений, полученных на основе определений Капуто – 1; Грюнвальда – Летникова – 2

Сравнительный анализ ошибок дает возможность предположить, что вычислительная схема (3.17), основанная на аппроксимации производной Капуто, обеспечивает приемлемую точность в расчетах и соответствует теоретической оценке погрешности $O((\Delta t)^{3-\alpha} + (\Delta x)^2)$. Эти наблюдения позволяют сделать вывод, что неявную схему (3.17) можно применить для получения достаточно точного численного решения подобного класса задач. Надо отметить, что алгоритм следует охарактеризовать как ресурсоемкий. Например, для числа узлов

$N = M = 160$ точность соответствует $\delta \approx 10^{-6}$, а время расчета занимает около 2000 с.

Более детальный анализ проведем для уравнения аномальной диффузии, содержащей дробные производные по времени и по координате в концепции нецелых производных Капуто и Грюнвальда – Летникова.

Тест-пример 3. Рассмотрим следующее уравнение аномальной диффузии:

$$\frac{\partial^{0.8} c(x,t)}{\partial t^{0.8}} = \frac{\Gamma(1.2)}{\Gamma(3)} x^{1.8} \frac{\partial^{1.8} c(x,t)}{\partial x^{1.8}} + \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3.2)} x^2 t^{2.2} - x^2 t^3, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \quad (4.5)$$

$$\text{с начальным условием: } c(x,0) = 0 \text{ при } 0 \leq x \leq 1 \quad (4.6)$$

$$\text{и заданными граничными условиями: } c(0,t) = 0, c(1,t) = t^3, \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (4.7)$$

На рисунке 4.5 представлены численные решения задачи (4.5) – (4.7) с использованием вычислительной схемы (3.23) на основе формулы Грюнвальда – Летникова и сконструированной схемы (3.26) на основе определения Капуто при $\Delta x = \Delta t = 0.1$ в сравнении с аналитическим решением $c(x,t) = x^2 t^3$.

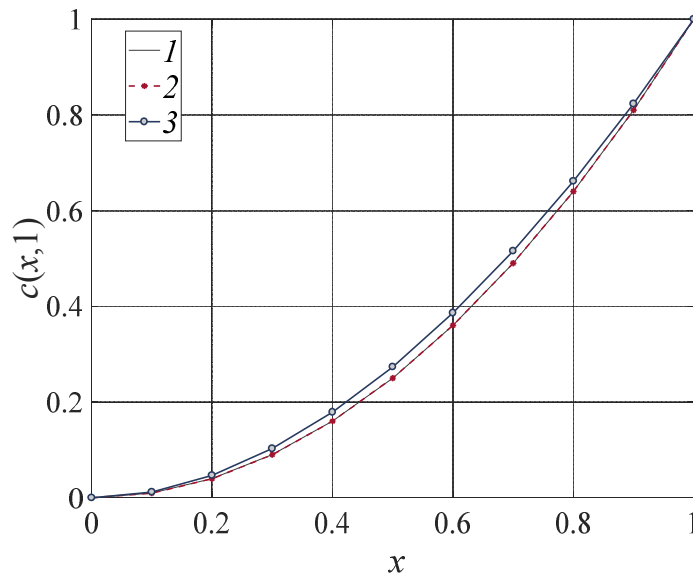


Рисунок 4.5 – Аналитическое – 1 и численные решения задачи (4.5) – (4.7), полученные с использованием неявных схем (3.23) – 2 и (3.26) – 3 (профили по координате в последний момент времени).

В таблице 4.1 продемонстрированы значения относительных погрешностей $\delta = \|c - \tilde{c}\|_{\infty} / \|c\|_{\infty}$ при варьировании значений шагов Δx и Δt пространственно-

временной сетки. 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.

В дополнение проведен анализ практической сходимости схемы с использованием правила Рунге. Для этого вычислены скорость сходимости вычислительного процесса

$$v(\Delta x, \Delta t) = \log_2 \left(\frac{\bar{E}_\infty(2\Delta x, 2\Delta t)}{\bar{E}_\infty(\Delta x, \Delta t)} \right)$$

и проведена оценка время вычислений.

Таблица 4.1 – Оценка относительной погрешности численных решений, найденных с использованием различных конечно-разностных схем

№	$\Delta x = \Delta t$	Оценка относительной погрешности δ численных решений, полученных с использованием формул:	
		Грюнвальда – Летникова	Капуто
0	0.2	$5.04 \cdot 10^{-2}$	$4.73 \cdot 10^{-3}$
1	0.1	$2.61 \cdot 10^{-2}$	$1.03 \cdot 10^{-3}$
2	0.05	$1.34 \cdot 10^{-2}$	$3.74 \cdot 10^{-4}$
3	0.025	$6.77 \cdot 10^{-3}$	$2.79 \cdot 10^{-4}$
4	0.0125	$3.40 \cdot 10^{-3}$	$1.60 \cdot 10^{-4}$
5	0.00625	$1.70 \cdot 10^{-3}$	$8.44 \cdot 10^{-5}$

Результат, представленный в таблице 4.2, свидетельствует, что скорость сходимости в процессе дробления шага изменяется.

В начальном периоде, при переходе от больших значений шагов во времени и координате к более мелким, сходимость «ускоряется», затем происходит некоторое замедление и на достаточно подробной сетке ($\Delta x = \Delta t \approx 0.005$) наблюдается тенденция к установлению скорости к единичному уровню. Последнее означает, что при делении шага пополам погрешность уменьшается вдвое.

Таблица 4.2 – Численные характеристики сходимости приближений, определенных с помощью вычислительной схемы (3.26)

№	Δx	Δt	$\bar{E}_\infty(\Delta x, \Delta t)$	$\nu(\Delta x, \Delta t)$	t_{calc}, c
0	1/4	1/4	$7.23 \cdot 10^{-3}$	1.677	0.308
1	1/8	1/8	$1.73 \cdot 10^{-3}$	2.063	0.069
2	1/16	1/16	$3.59 \cdot 10^{-4}$	2.207	0.084
3	1/32	1/32	$3.22 \cdot 10^{-4}$	0.160	0.101
4	1/64	1/64	$1.94 \cdot 10^{-4}$	0.729	0.226
5	1/128	1/128	$1.04 \cdot 10^{-4}$	0.896	0.555
6	1/256	1/256	$5.37 \cdot 10^{-5}$	0.956	2.428
7	1/512	1/512	$2.72 \cdot 10^{-5}$	0.982	29.29
8	1/1024	1/1024	$1.37 \cdot 10^{-5}$	0.992	388
9	1/2048	1/2048	$6.85 \cdot 10^{-6}$	0.997	5233

Контроль времени расчета свидетельствует, что моделирование процесса аномальной диффузии довольно ресурсоемкая процедура с точки зрения вычислительных затрат. Отметим, что время вычислений соизмеримо со временем решения задач по схеме, использующей формулу Грюнвальда – Летникова. Это обусловлено участием всех предшествующих пространственных узлов сетки и всей временной предыстории в расчете текущего состояния при конечно-разностном решении дробно-дифференциальных задач, т.е. происходит учет «полной» памяти процесса. При использовании математических моделей с «кратковременной» или частичной «памятью» нагрузка на вычислительную систему значительно снижается.

4.3. Вычислительные эксперименты и анализ результатов расчета нестационарных характеристик полярного состояния сегнетоэлектриков

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

Приведено сравнение результатов решения прикладных задач с данными

экспериментов (в частных случаях). Проверка адекватности результатов моделирования при решении нелинейных прикладных задач осуществлена также на основе сравнения результатов численного моделирования с данными целочисленных аналогов, полученных в предельных режимах ($\alpha=0.99$) на основе схем, изложенных в главе 3 диссертации.

4.3.1. Компьютерное моделирование тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в инжекционном режиме

Результаты компьютерного моделирования электронно-стимулированного переключения поляризации продемонстрируем на примере типичного сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3\text{H}_2\text{SO}_4$ (ТГС) с использованием параметров, соответствующих условиям физического эксперимента [217]. Основные переменные состояния: x – координата доменной границы, м (s – ее безразмерный аналог); t – время, с (w – безразмерное время); I – ток переключения поляризации, А. Параметры управления вычислительным процессом: h – шаг дискретизации по времени, с (варьировался в диапазоне 0.05 – 0.5).

Параметры и константы математической модели: $L=10^{-3}$ м – толщина кристалла; $d=2y=0.5 \cdot 10^{-3}$ м – линейные размеры облучаемой области кристалла; $\tau_1=13.2$ с, $\tau_2=40$ с, $\tau_3=10$ с – характерные параметры времени; $[10^{-4} \text{ } 40.5]$ с – временной диапазон; $\varepsilon=50$ – диэлектрическая проницаемость образца; $\varepsilon_0=8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная; $P_S=2 \cdot 10^{-2}$ Кл/м² – спонтанная поляризация кристалла ТГС. Глубина инжекции l оценивалась по эмпирическому соотношению (3.9) – формуле Фиттинга [280]:

$$l = R = 93.4 \frac{E_0^{1.45}}{\rho^{0.91}} \approx 3.09 \cdot 10^3 \text{ нм},$$

где $\rho=1.6$ мкг/см³ – плотность ТГС; $E_0=15$ кэВ – энергия электронов.

Моделирование проведено в предположении, что в стартовый момент времени начинается переключение 50 % объема кристалла, стохастический процесс образования новых зародышей продолжается в течение 16 с, что составляет 40 % от общего времени наблюдения процесса переключения.

В качестве алгоритмов численной реализации выбрана схема «предиктор-корректор» в концепции Капуто, которая, как было показано выше, дает приемлемый уровень точности. Верификация проводилась на основе сравнения решения аналогичной задачи с целой производной полученного методом Рунге – Кутты IV порядка с решением дробно-дифференциальной задачи в предельном случае, при $\alpha=0.999$.

На рисунке 4.6 показаны результаты моделирования динамики доменной границы – зависимости координаты от времени в рамках реализации дробно-дифференциальной модели в сравнении с ее целочисленным аналогом. Фрактальность и эффект долговременной памяти в данном случае выражаются увеличением скорости и изменением характера движения доменной стенки, начиная с некоторого момента времени (~ 8 с), необходимого для накопления стартового заряда, создающего в необлученной части кристалла коэрцитивное поле.

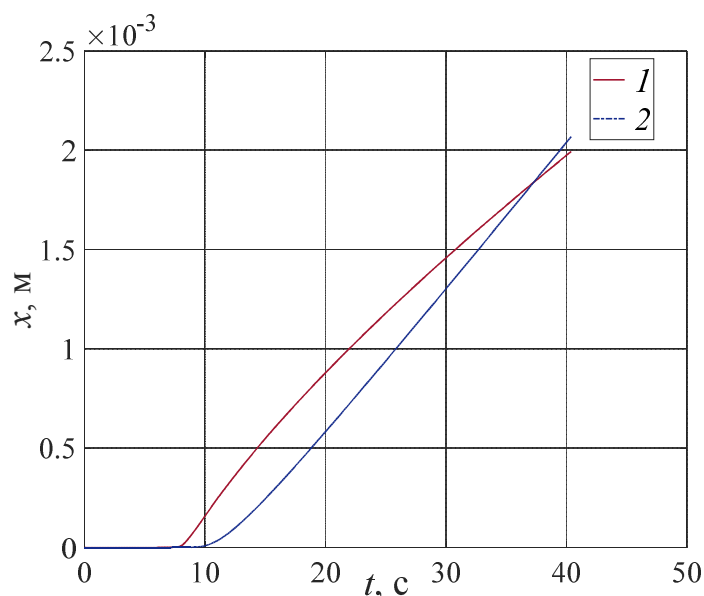


Рисунок 4.6 – Зависимость координаты от времени при движении доменной стенки по данным: дробно-дифференциально-стохастической модели – 1; целочисленного аналога – 2

На рисунке 4.7 представлены результаты моделирования импульса тока переключения поляризации кристалла триглицинсульфата (ТГС) в сравнении с данными эксперимента [217], а также при реализации модели с целой производной

водной и дробной производной (без использования схемы Монте-Карло). Величина среднеквадратичного отклонения для результата, полученного с помощью модели с целочисленной производной, составила $9.22 \cdot 10^{-11}$, с помощью дробно-дифференциальной модели – $8.5 \cdot 10^{-11}$, с помощью дробно-дифференциальной стохастической модели – $5.5 \cdot 10^{-11}$.

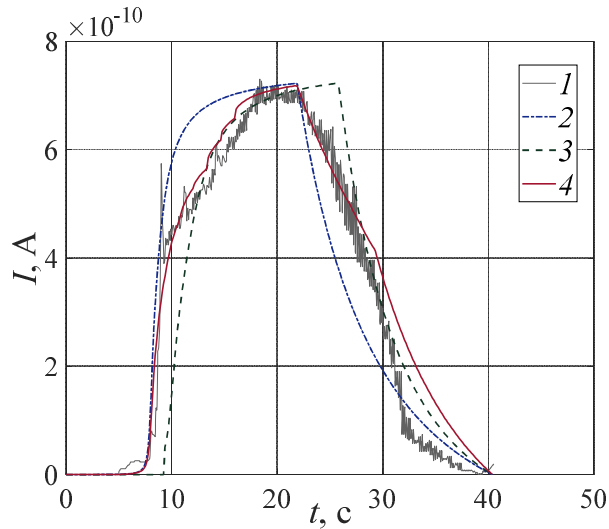


Рисунок 4.7 – Результаты моделирования тока переключения поляризации кристалла ТГС в сравнении с данными эксперимента – 1 по данным: дробно-дифференциальной модели – 2; модели с целочисленной производной – 3; дробно-дифференциальной стохастической модели – 4.

Кривая тока переключения, рассчитанная на основе стохастической дробно-дифференциальной модели (кривая 4 на рисунке 4.7), воспроизводит основные особенности экспериментальных импульсов токов переключения в режиме токов электронно-стимулированной поляризации: фаза стагнации (накопление стартового заряда), резкое возрастание тока (за счет дрейфа границы) и последовательного «включения» зародышей новой фазы, достижение максимума и фаза релаксации к нулевому уровню.

Таким образом, введение стохастического алгоритма процесса зародышеобразования и использование концепций дробно-дифференциального исчисления позволяют теоретически интерпретировать механизмы самоподобного процесса переключения сегнетоэлектриков в инжекционном режиме, а также проводить математическое моделирование основной интегральной характеристики

этого процесса – тока переключения поляризации. Результаты, описанные в данном разделе, представлены в работах [70, 68] автора.

4.3.2. Компьютерное моделирование формирования пироотклика сегнетоэлектрика в режиме интенсивного нагрева

Результаты компьютерной реализации математической модели в постановке (2.8) – (2.11) представим на примере оценки температурного распределения в образце сегнетоэлектрика триглицинсульфата. Кристалл ТГС является «модельным» сегнетоэлектриком с температурой Кюри $T_C \sim 48.5^\circ\text{C}$, для которого известны и хорошо изучены многие теплофизические и пироэлектрические характеристики [168]. Выбор объекта вычислительного эксперимента также обусловлен применением данных материалов в пиротехнических устройствах и приемниках, поэтому исследование их тепловых свойств является достаточно актуальным. В физическом эксперименте особое внимание уделяется исследованию пироэлектрических откликов либо оценке распределения пироэлектрических характеристик по объему кристалла [240].

Проведем инициализацию параметров вычислительного эксперимента. Параметры физико-математической модели установим в соответствии с выбранным объектом и данными экспериментальной оценки пироэлектрических токов [289] кристаллов ТГС в режиме нагрева кристалла световым потоком большой мощности. Коэффициент теплопроводности $k_T = 0.8 \text{ Вт/(К}\cdot\text{м)}$, плотность материала $\rho = 1.6 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, аналитические зависимости теплоемкости $c(T)$ и пирокоэффициента $\gamma(T)$ получены на основе аппроксимации экспериментальных данных [244] кубическими эрмитовыми сплайнами (как показано на рисунке 4.8), внутренние тепловые источники отсутствуют, поверхностная мощность источника $Q = 2.3 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$.

Линейный размер расчетной области принят равным $L = 25 \text{ мм}$, реальное значение толщины кристалла составляет 30 мм. В некотором приближении такое допущение и задание граничного условия I рода в форме (2.11) можно считать оправданными ввиду использования в физическом эксперименте «толстой» подложки, обладающей схожими с основным объектом теплофизически-

ми характеристиками.

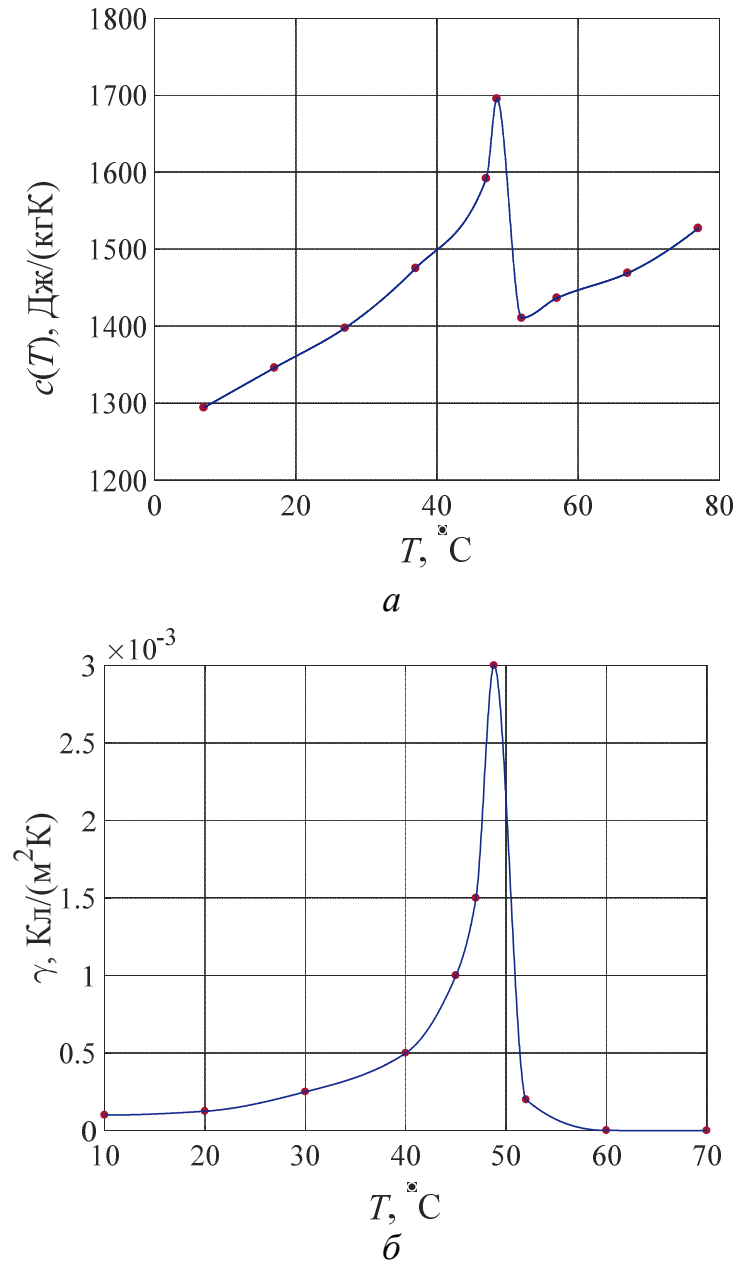


Рисунок 4.8 – Модельные представления температурной зависимости теплоемкости (а) и пирокоэффициента ТГС (б) в широком интервале температур (сплайн-аппроксимация данных физического эксперимента [244, 240])

В эксперименте [289] использована эбонитовая подложка с теплофизическими характеристиками: $k_T=0.2$ Вт/(К·м), $\rho=1.5 \cdot 10^3$ кг/м³, $c=1430$ Дж/(кг·К). В данном случае мы предполагаем наличие идеального теплового контакта, более детальный расчет потребует учета условий, возникающих на границе сопряжения двух сред.

В силу особенности математической постановки задачи температура сре-

ды и начальная температура объекта в модели приняты $T_0=0^\circ\text{C}$, с последующим сдвигом на 22°C при визуализации результатов. Такой подход позволяет использовать аппроксимацию дробных производных по формуле Грюнвальда – Летникова без поправочного слагаемого.

Для сравнения приведем результаты реализации модели в линейном режиме (без учета температурных зависимостей теплоемкости при значении коэффициента тепловой диффузии $a^2=3.125\cdot 10^{-7}\text{ м}^2/\text{с}$). Параметры управления вычислительным процессом: $\Delta x=0.25$ мм, $\Delta \tau=0.1$ с, значение порядка дробного дифференцирования α варьировалось, $0<\alpha<1$, $t^*=1$ с, промежуток времени наблюдения определен в соответствии с $\theta=5$ с.

Результаты моделирования температурного распределения приведены на рисунке 4.9 при значении порядка дробного дифференцирования $\alpha=0.7$.

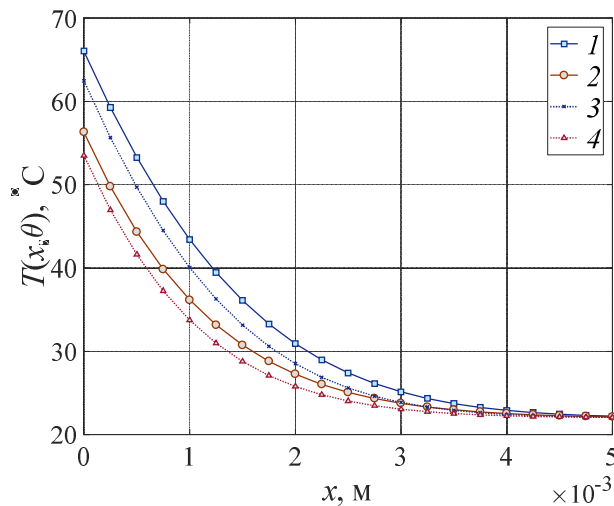


Рисунок 4.9 – Результат моделирования распределения температуры в образце кристалла ТГС: координатное профиль температуры в последний момент времени наблюдения (зависимости 1 и 2 отвечают реализации нелинейных моделей теплопроводности с целой и дробной производной при $\alpha=0.7$ соответственно, а 3 и 4 – их линейным аналогам)

Для сравнения представлены данные реализации классической модели теплопроводности, а также дробно-дифференциальной и классической моделей в условиях линейного температурного режима (при постоянных значениях теплофизических характеристик кристалла). Результаты вычислительных экспери-

ментов свидетельствуют, что в рассмотренном интервале при данной мощности теплового источника происходит перегрев кристалла за температуру Кюри. В целом это соответствует данным эксперимента, описанным в серии работ [241]. Также можно отметить, что учет нелинейной зависимости удельной теплоемкости от температуры влияет на ход температурных кривых: линейная модель теплопроводности дает несколько завышенный уровень перегрева материала – до 10 % (рисунок 4.10).

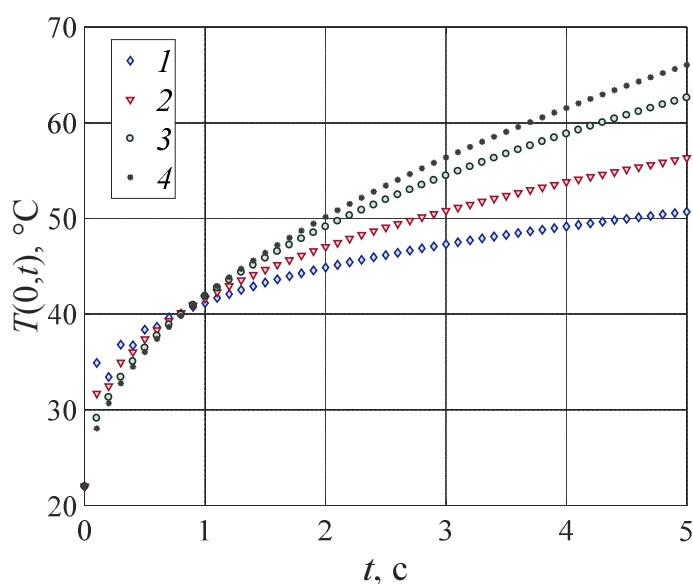


Рисунок 4.10 – Температурная динамика $T(x^*, t)$ в точке действия источника $x^*=0$ (зависимость 1 – $\alpha_1=0.5$; 2 – $\alpha_2=0.7$; 3 – $\alpha_3=0.9$; 4 – классическая модель)

Детальное сравнение значения уровня перегрева, полученного с использованием классической модели теплопроводности и ее дробно-дифференциального аналога, с экспериментом возможно на основе анализа «времени Кюри», при котором в эксперименте исчезала петля гистерезиса, и кристалл, соответственно, прогревался до температуры Кюри ($T_C \sim 48.5^\circ\text{C}$). Для данной мощности источника и толщины кристалла это время соответствует 3 с. Рисунок 4.10 дает информацию о температурной динамике при реализации дробно-дифференциальной модели с различными значениями порядка дробного дифференцирования. Наиболее адекватной, отвечающей этим данным является нелинейная дробно-дифференциальная модель теплопроводности, с порядком

дробного дифференцирования $\alpha \approx 0.7$, что свидетельствует о необходимости использования модифицированных моделей при анализе полевых эффектов, возникающих в эрдитарных средах. Результаты моделирования формы пиротока при $\alpha \approx 0.7$ представлены на рисунке 4.11.

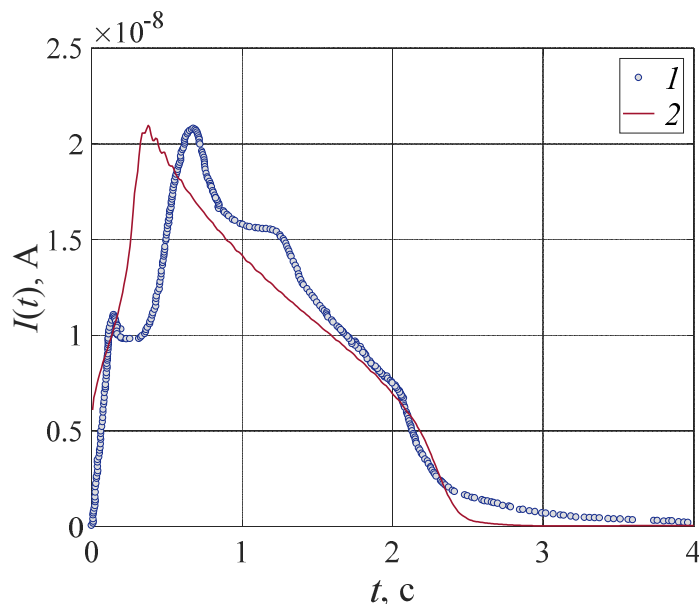


Рисунок 4.11 – Модельное представление формы пирозлектрического отклика кристалла ТГС на воздействие теплового источника – 2
в сравнении с данными эксперимента – 1

Построенный на основе расчетов пирозлектрический ток демонстрирует основные закономерности, наблюдаемые экспериментально. Пирозлектрический ток постепенно возрастает, достигая характерного максимума, после чего следует падение до нулевого уровня из-за утечки тепла через нижний электрод. Максимальный уровень, а также соответствующий момент времени зависят от источника питания. Значение максимума увеличивается, когда мощность источника нарастает, и, наоборот, время максимума уменьшается. В линейном режиме можно наблюдать только уменьшение ступенчатого пирозлектрического сигнала до нулевого уровня.

Таким образом, дробно-дифференциальная модель теплопроводности позволяет перейти к более адекватному представлению теплового поля в объекте, отвечающего за формирование пирозлектрического отклика сегнетоэлектрика в

условиях интенсивного нагрева. Результаты, описанные в данном разделе, представлены в работах [107, 119] автора.

4.3.3. Компьютерное моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории

Первую серию вычислительных экспериментов проведем для случая компьютерного моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории. Представим численное исследование и сравнительный анализ базовых моделей (Ландау – Халатникова (2.18), обобщенной модели Ландау – Халатникова (2.19) и квазидинамического аналога (2.20)) на примере расчета гистерезисной зависимости поляризации от поля для сегнетоэлектрика с фазовым переходом I рода – титаната бария BaTiO_3 (для объемного кристалла и тонкой пленки).

Наиболее изученным случаем переключения поляризации является 180° инверсия поляризации, при которой внешнее поле прикладывается вдоль оси спонтанной поляризации и его ориентация изменяется непосредственно на 180° . Например, 180° переключение поляризации наблюдается практически для всех одноосных сегнетоэлектрических кристаллов – таких как триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$, дигидрофосфат калия KH_2PO_4 , ниобат лития LiNbO_3 и др. Хотя обобщенная модель Ландау – Халатникова (2.19) наиболее подходит для одноосных кристаллов, ее также можно применять для описания переключения поляризации в многоосных кристаллах. Примером может служить титанат бария (BaTiO_3), обладающий как 90° (a -ориентация), так и 180° (c -ориентация) типами доменных структур в тетрагональной фазе при комнатной температуре. Используя соответствующее внешнее поле, приложенное вдоль c -ориентированных доменов BaTiO_3 , можно наблюдать 180° переключение поляризации [168, 172, 173].

На примере объемного кристалла и тонкой пленки титаната бария рассмотрим и сравним результаты реализации трех приведенных в главе 2 математических моделей на базе: классического уравнения Ландау – Халатникова (2.18) – задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения, обоб-

щенного уравнения Ландау – Халатникова (2.19) – начально-граничная задача для уравнения с частными производными параболического типа и квазидинамического аналога (2.20) – краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. В таблице 4.3 приведены значения термодинамических параметров для титаната бария при температуре T (в К) [172, 290], используемых в настоящем и следующем разделах.

Таблица 4.3 – Коэффициенты разложения термодинамического потенциала для титаната бария

Параметр модели	Значение, ед. измерения
$A/2$	$-3.34 \cdot (T-381) \cdot 10^5 \text{ м/Ф}$
$B/4$	$-(3.6 \cdot (T-448) - 202) \cdot 10^6 \text{ м}^5 / (\text{Кл}^2 \cdot \text{Ф})$
$C/6$	$(5.52 \cdot (T-120) + 276) \cdot 10^7 \text{ м}^9 / (\text{Кл}^4 \cdot \text{Ф})$

Алгоритм реализации классической модели Ландау – Халатникова основан на применении метода Рунге – Кутты IV порядка точности для решения начальной задачи для обыкновенного дифференциального уравнения. Программная реализация обобщенной модели Ландау – Халатникова базируется на применении комбинированного подхода, сочетающего двухслойную неявную конечно-разностную схему и итерационную процедуру (глава 3). Алгоритм реализации квазидинамического аналога модели строится на методе конечных разностей. В двух последних случаях использованы граничные условия III рода (2.24), длина экстраполяции принята равной $\lambda = 88 \text{ нм}$ согласно [179].

Рассмотрим переключение в периодическом поле $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$. Параметры вычислительного эксперимента: амплитуда поля $E_0 = 2.5 \cdot 10^5 \text{ В/м}$, частота поля $f = 50 \text{ Гц}$ ($\omega = 2\pi f$), время наблюдения процесса $\theta = 0.03 \text{ с}$, градиентный коэффициент $\psi = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}^3 / \text{Ф}$ [291], кинетический коэффициент (определяет скорость движения доменных стенок) $\delta = 2 \cdot 10^5 \text{ м} \cdot \text{с} / \text{Ф}$ [291]. Масштабирующий параметр для нестационарных моделей $\nu = 400$, для квазистационарной модели – $\nu = 100$. Термодинамические параметры соответствуют комнатной темпера-

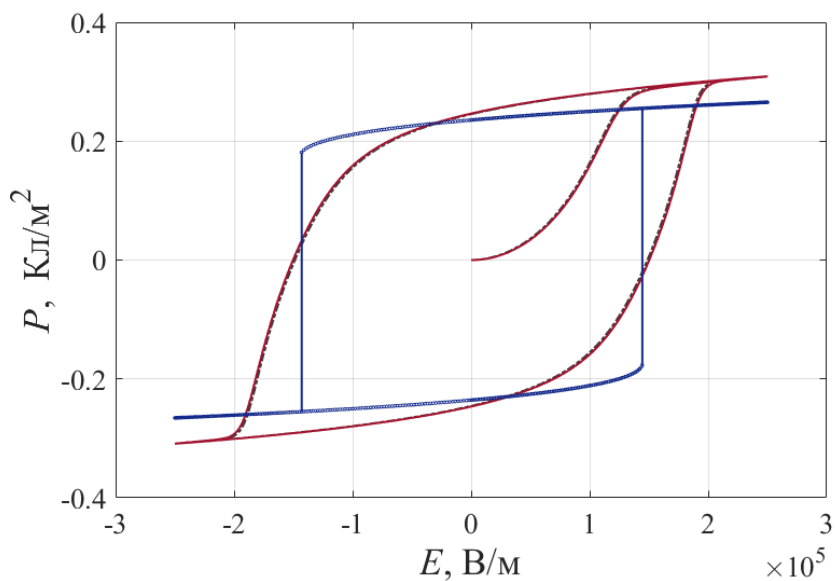
туре 293 К. При построении зависимостей $P(t)$ от $E(t)$ для каждого момента времени было вычислено усредненное значение поляризации по толщине кристалла $P(t) = \frac{1}{L} \int_0^L P(x, t) dx$. Альтернативный подход состоит в вычислении значений поляризации для центральной точки кристалла: $x=L/2$.

На рисунке 4.12 представлены результаты вычислительных экспериментов (на основе трех рассмотренных математических моделей) по оценке гистерезисной зависимости поляризации P от приложенного поля E в титанате бария для различных значений толщины образца – 2 мкм и 10 нм (рисунки 4.12 а и 4.12 б соответственно).

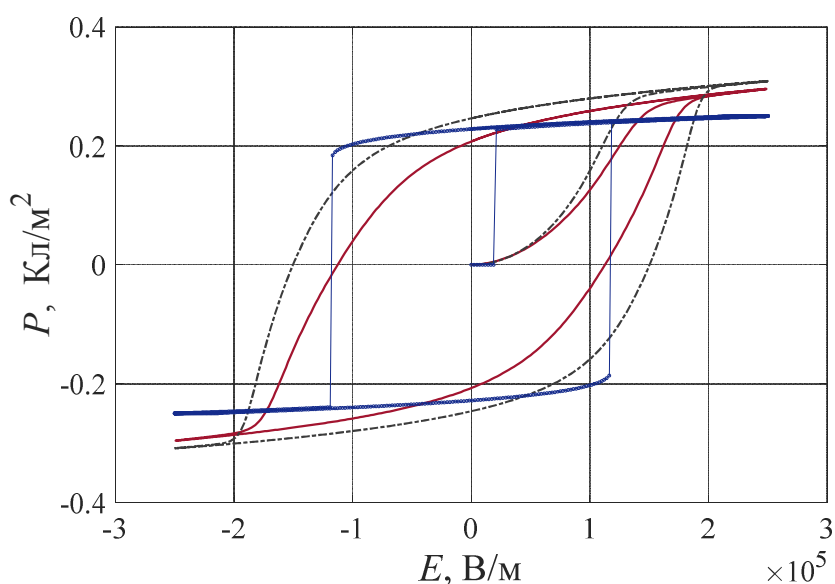
Гистерезисная зависимость поляризация от приложенного электрического поля дает возможность оценить: коэрцитивное поле E_c , при котором поляризация обращается в ноль; значение спонтанной поляризации P_s , при котором может происходить перестройка домена; остаточную поляризацию P_r , соответствующую нулевому электрическому полю. Результаты, полученные на основе всех трех моделей для объемного кристалла, качественно согласуются с данными экспериментальных наблюдений, представленными в литературных источниках [172, 292, 293] и модельных расчетов [178, 179, 290, 291], в том числе на основе решеточных моделей [294]: остаточная поляризация $P_r=0.22\div 0.35$ Кл/м² и коэрцитивное поле $E_c=0.75\div 1.45 \cdot 10^5$ В/м. Квазистационарная модель дает более «насыщенный» вид петель сегнетоэлектрического гистерезиса по сравнению с нестационарных подходов, результаты моделирования на основе которых в большей степени (по форме петли) соответствуют экспериментальным данным.

В общем случае наличие диффузионного члена в обобщенном уравнении Ландау – Халатникова (2.19) позволяет учесть пространственные флуктуации поляризации. Однако для образца толщиной 2 мкм, как показано на рисунке 4.12а, значение коэффициента диффузии титаната бария довольно мало по отношению к масштабу расстояний. Как следствие, численное моделирование с использованием классического уравнения Ландау – Халатникова (2.17) приво-

дит в этом случае к схожему результату, полученному с помощью обобщенной модели Ландау – Халатникова (2.19).



а



б

Рисунок 4.12 – Модельные зависимости поляризации от поля BaTiO_3 , вычисленные на основе: обобщенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова (сплошная кривая); модели Ландау – Халатникова (штрих-пунктирная кривая); квазидинамической модели (точечный массив) для $L = 2$ мкм (а) и $L = 10$ нм (б).

Неоднородное распределение поляризации может быть весьма существ-

венным фактором для низкоразмерных сегнетоэлектриков – таких как тонкие пленки, нанотрубки, нанопроволоки и т. п. Более того, для низкоразмерных структур эта теория часто дает лучшие результаты, чем для объемных материалов [172]. Рисунок 4.12 б демонстрирует результат моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса для тонкой пленки титаната бария с толщиной $L = 10$ нм и наблюдаемый размерный эффект – уменьшение толщины пленки приводит к изменению (в данном случае – к сужению) петли гистерезиса. Данный эффект был диагностирован неоднократно независимыми авторами (например, [179, 293]).

Анализируя рассмотренные подходы с математической точки зрения, можно отметить, что все модели позволяют качественно приемлемо описать сегнетоэлектрический гистерезис. Все модели включают аппроксимационный параметр – масштабирующий коэффициент для приложенного поля v . Нестационарные модели (в постановке задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения и начально-граничной задачи уравнения с частными производными) дают более адекватное представление геометрии петли гистерезиса.

Для объемных объектов (кристаллов) введение градиентного слагаемого не играет существенной роли – классическая модель Ландау – Халатникова (2.18) дает такой же результат, как и обобщенная модель (2.19); результат реализации квазистатической модели (2.20) совпадает с результатом реализации простейшей алгебраической модели (2.15). Присутствие диффузионного слагаемого в обобщенной модели Ландау – Халатникова оказывается принципиально важным для адекватного описания процесса переключения поляризации низкоразмерных сегнетоэлектрических структур.

4.3.4. Реализация дробно-дифференциальной модели сегнетоэлектрического гистерезиса

Представим результаты реализации дробно-дифференциальной модели Ландау – Халатникова, описывающей распределение поляризации и сегнетоэлектрический гистерезис. В математической постановке модель формулирует-

ся как начально-граничная задача для уравнения с частными производными дробного порядка. В рамках главы 2 диссертации введены в рассмотрение две математические постановки на базе этой модели – модель гистерезиса (2.22) – (2.24) и модель динамики доменной границы (2.25) – (2.27). В главе 3 построены вычислительные схемы реализации моделей в ассоциированных постановках. Проведем вычислительные эксперименты, используя программную реализацию алгоритма решения дробно-дифференциальной задачи на основе конечно-разностной схемы повышенного порядка точности, сконструированной в концепции определения Капуто (раздел 3.3).

Вычислительные эксперименты проведем на примере моделирования характеристик процесса переключения поляризации титаната бария BaTiO_3 . Поскольку рассматривается одномерный случай, соответствующий процесс реориентации доменной структуры можно также отнести к переключению c -доменов.

Физические параметры кристалла соответствуют вычислительному эксперименту, описанному в предыдущем разделе. Время наблюдения составляет $\theta = 0.03$ с, характерное время процесса (параметр согласования размерностей) $t^* = 1$ с, толщина образца – $L = 1$ мкм. Параметры, отвечающие условиям модельного эксперимента, соответствуют режиму экспериментального наблюдения, описанному в [293].

Результат моделирования пространственно-временного распределения поляризации $P(x,t)$ (значение динамической фрактальной размерности установлено для определенности $\alpha = 0.85$) приведен на рисунке 4.13.

На рисунке 4.14 визуализированы результаты моделирования динамики изменения усредненного значения поляризации по толщине кристалла $P(t)$ и петли сегнетоэлектрического гистерезиса, как функциональной зависимости $P(E)$, для титаната бария при варьировании порядков дробного дифференцирования α по времени.

На рисунке 4.14 б гистерезисная зависимость представлена в сравнении с данными эксперимента [293].

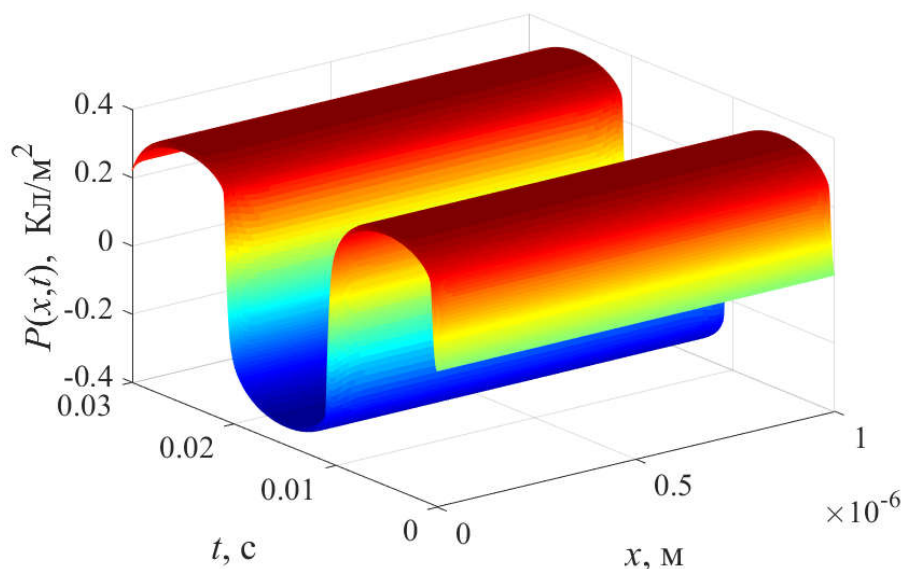


Рисунок 4.13 – Результат моделирования распределения поляризации $P(x,t)$ в кристалле BaTiO_3 (при переключении в периодическом поле)

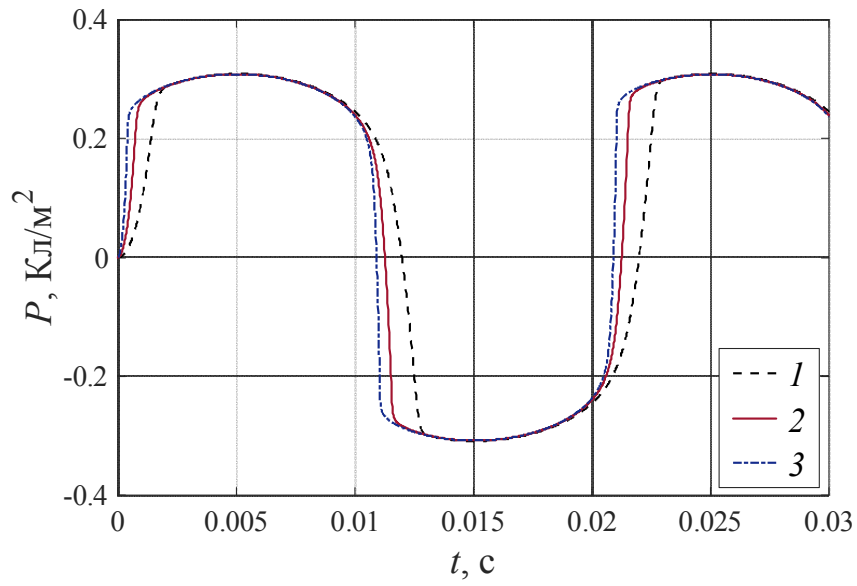
Кроме того, основные характеристики петли гистерезиса – коэрцитивное поле $E_c = 0.95 \cdot 10^5$ В/м (поле в отсутствие поляризации) и остаточная поляризация $P_r = 0.24$ Кл/м² (поляризация при нулевом поле) совпадают с данными, описанными в литературе [172, 290, 291-294]. На рисунке 4.15 показан результат расчета токовой петли гистерезиса для случая $\alpha = 0.85$, поляризационный ток рассчитан численно согласно соотношению:

$$I(t) = \frac{S}{L_0} \int_0^L \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} dx,$$

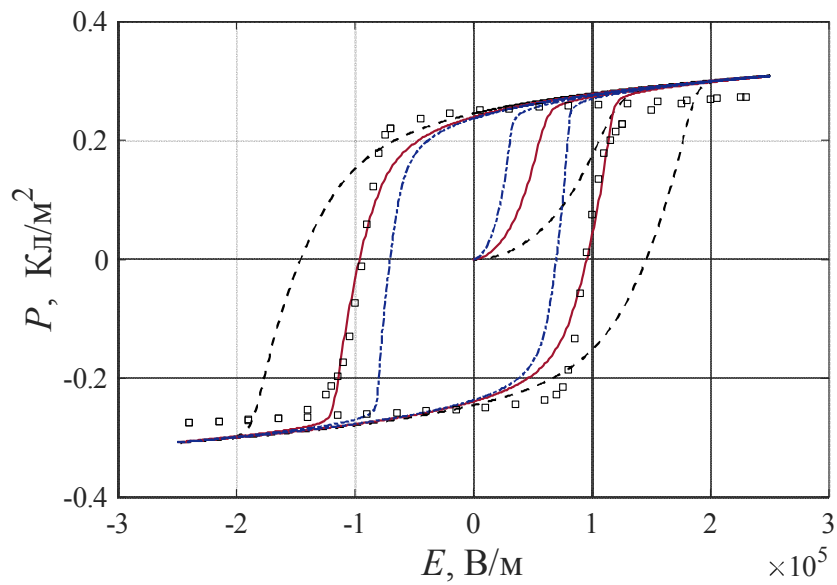
где S – площадь поверхности кристалла, м².

Для определенности в модельном эксперименте значение S принято равным L^2 .

В проведенной серии вычислительных экспериментов значение порядка дробного дифференцирования α варьировалось от 0.75 до 1 с шагом 0.05. Из полученных результатов можно заключить, что уменьшение значения порядка дробной производной по времени соответствует сужению петли диэлектрического гистерезиса при сохранении ее формы. Наилучшее согласование с экспериментальными данными соответствует порядку дробного дифференцирования $\alpha=0.85$ (с величиной среднеквадратичного отклонения 0.027).



a



б

Рисунок 4.14 – Изменение среднего значения поляризации с течением времени

$P(t)$ (*a*) и гистерезисная зависимость $P(E)$ (*б*) для кристалла BaTiO_3 при $\alpha=1$ – целочисленный аналог модели (пунктирная кривая 1), $\alpha=0.85$ (сплошная кривая 2), $\alpha=0.75$ (штрих-пунктирная кривая 3) в сравнении с данными эксперимента (точечный массив) [293].

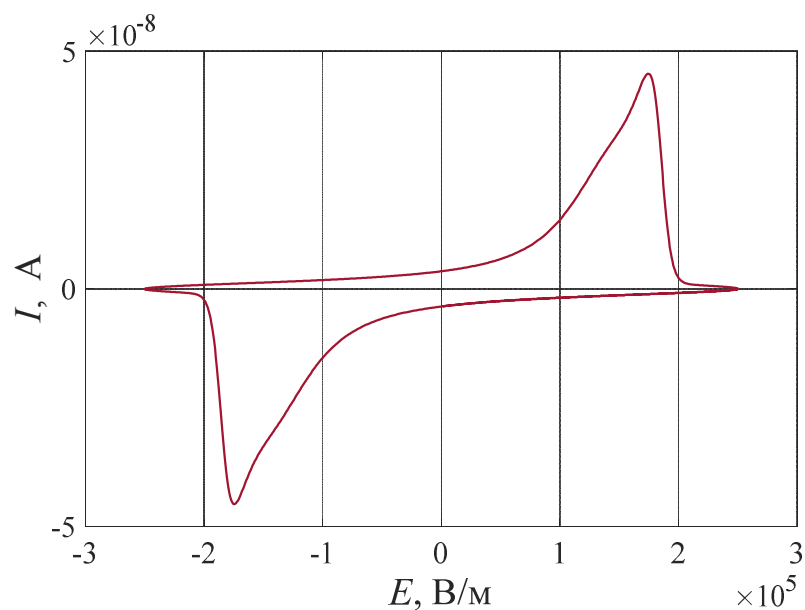


Рисунок 4.15 – Пример расчета токовой петли сегнетоэлектрического гистерезиса

Можно отметить, что важным эмпирическим параметром является поправочный коэффициент для поля ν , его задание оказывается необходимым при моделировании гистерезисных зависимостей при исследовании сегнетоэлектриков в высокочастотных полях. Увеличение этого коэффициента приводит к сужению петли и ее растяжению вдоль оси ординат. Таким образом, порядок дробного дифференцирования или фрактальная динамическая размерность α , как численная характеристика эффекта памяти, является дополнительным управляющим параметром нестационарной модели переключения поляризации, который может быть «настроен» для обеспечения лучшего согласования с данными эксперимента.

В аспекте исследования влияния значений управляющих параметров на поведение моделируемых характеристик дополнительный научный интерес представлен вопрос анализа размерных эффектов – зависимости характеристик сегнетоэлектрического гистерезиса от толщины образца (пленки).

На рисунке 4.16 показаны петли гистерезиса, полученные с помощью обобщенной модели Ландау – Халатникова при варьировании толщины объекта: $L = 1$ мкм, $L = 10$ нм и $L = 5$ нм.

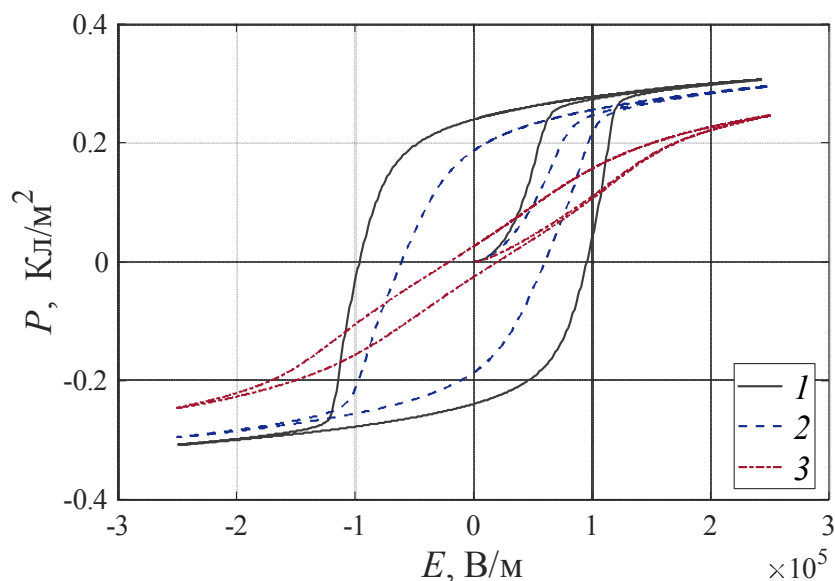


Рисунок 4.16 – Гистерезисная зависимость $P(E)$ для BaTiO_3 при толщине образца: $L = 1$ мкм (сплошная кривая 1), $L = 10$ нм (пунктирная кривая 2), $L = 5$ нм (штрих-пунктирная кривая 3)

Численные эксперименты свидетельствуют, что для объемных материалов, форма петли гистерезиса не зависит от толщины кристалла L . Как было показано выше, обобщенная модель Ландау – Халатникова в этом случае может быть редуцирована к случаю классической модели, описываемой задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения. Градиентное слагаемое нивелируется для объемных объектов. В то время как для низкоразмерных структур (нанопроволок, тонких пленок, островковых покрытий и др.), учет слагаемого Гинзбурга и введение граничных условий типа Робина оказываются существенными. При уменьшении толщины пленки мы можем наблюдать существенное искажение ее формы: деформацию, сужение петли, тенденцию к приобретению формы «двойной петли». Значение толщины пленки 3 нм в наших экспериментах оказалось критическим, при этой толщине петля гистерезиса исчезает. Эти результаты согласуются с данными других авторов, полученными для нанопроволок и тонких пленок титаната бария [179], [295].

При численном исследовании практической сходимости данного класса задач мы ограничились (раздел 4.1) рассмотрением модельных задач, которые

имеют аналитическое решение. Однако в контексте данного исследования представляет самостоятельный научный интерес исследование практической сходимости решения данной прикладной задачи – задачи о моделировании распределения поляризации с использованием модели Ландау – Гинзбурга – Де-Воншира – Халатникова.

С этой целью применим правило Рунге или схему двойного пересчета в двух вариантах. В первом случае проведем расчет распределения поляризации $\bar{P}(x,t)$ для сетки с числом разбиений на M узлов и далее повторяем вычисления поляризации $\tilde{P}(x,t)$ удваивая число разбиений. Результат зафиксируем для последнего временного слоя с одним и тем же числом разбиений $N = 500$ временного диапазона $t_{ob}=0.03$ с (значения поляризации устанавливались в точках более крупной сетки). Относительную погрешность вычислим с помощью формулы: $\delta_x = \frac{\|\bar{P} - \tilde{P}\|}{\|\tilde{P}\|}$, используя норму Евклида. Результат тестирования приведен на рисунке 4.17 (порядок дробной производной зафиксирован как $\alpha=0.9$).

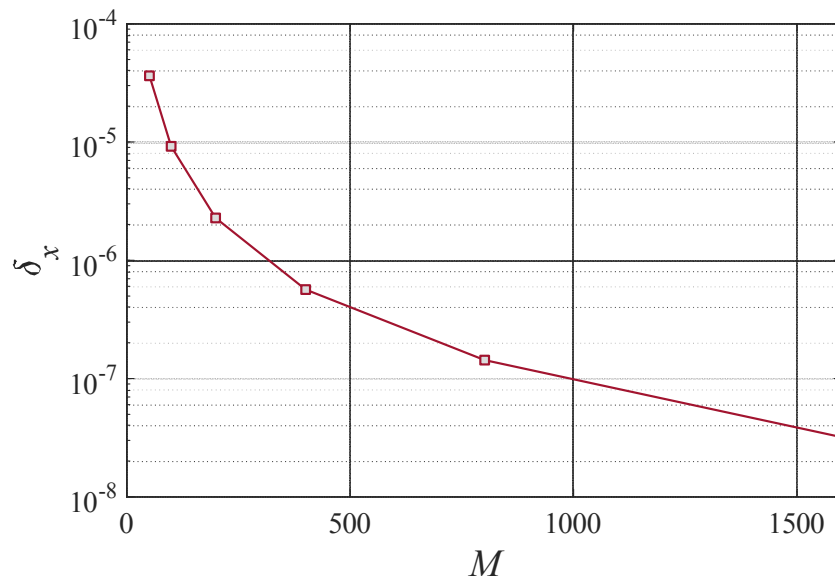


Рисунок 4.17 – Зависимость относительной погрешности (в логарифмическом масштабе) от числа разбиений по координате

Можно сделать вывод, что при измельчении шага сетки происходит бы-

строе уменьшение погрешности. Достаточно приемлемую точность (порядка 0.001 %) можно получить, используя сетку с числом разбиений $M=100 - 200$.

В следующем варианте анализа практической сходимости решения задачи расчет относительной погрешности проведем для сетки с фиксированным значением числа разбиений $M = 200$ при варьировании шага по времени, при этом период наблюдения также устанавливался постоянным $t_{ob}=0.03$ с.

Относительная погрешность рассчитывалась по формуле: $\delta_t = \frac{\|\bar{P} - \tilde{P}\|}{\|\tilde{P}\|}$, где

$\bar{P}(x,t)$ – решение, полученное при числе разбиений N по времени, $\tilde{P}(x,t)$ – решение при удвоенном значении числа разбиений (значения поляризации фиксировались в центральной точке образца при $x=L/2$ в моменты времени, соответствующие более крупной сетке). Результат приведен на рисунке 4.18.

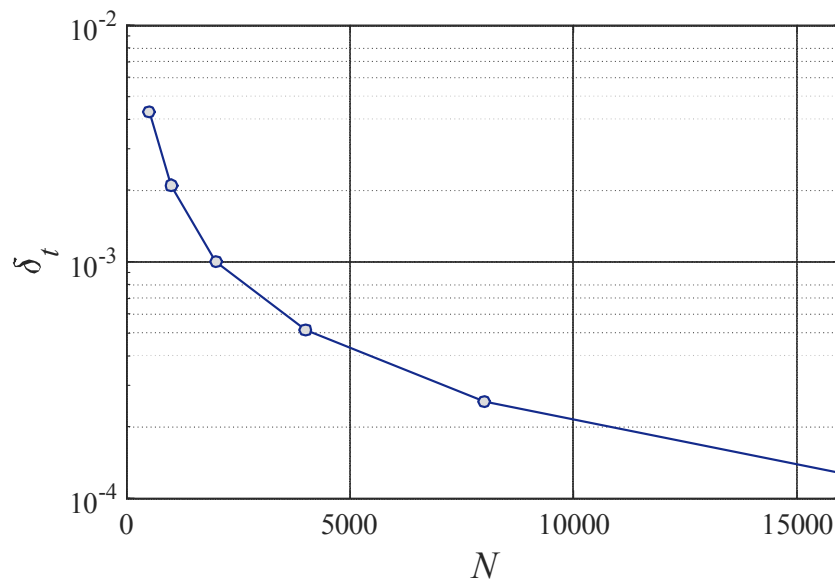


Рисунок 4.18 – Зависимость относительной погрешности (в логарифмическом масштабе) от числа разбиений по времени

В данном случае можно отметить, что уменьшение шага по времени также приводит к уменьшению погрешности. Результат численного решения задачи по точности оказывается более чувствительным к изменению шага по времени по сравнению с шагом по координате. Так, при числе разбиений $N=4000$ относительная погрешность составляет 0.05 %.

В итоге можно сделать вывод, что применение очень подробной сетки (например, с числом разбиений $M = 1600$) хотя и соответствует погрешности порядка 10^{-6} %, но уже не дает выигрыша в плане точности, потому что итоговая погрешность будет ограничена погрешностью, обусловленной дискретизацией по времени. Поскольку измельчение сетки всегда сопряжено с увеличением времени решения и без того ресурсоемкой дробно-дифференциальной задачи, имеет смысл при контроле погрешности (например, ~ 0.1 %) в вычислительных экспериментах принять оптимальное соотношение шагов по координате и времени: $N = 1000$, $M = 200$.

4.3.5. Реализация модели движения доменной границы в процессе переключения поляризации

Оставаясь в рамках дробно-дифференциальной модификации модели Ландау – Халатникова, решим следующую прикладную задачу о моделировании динамики доменной стенки в линейно-нарастающем поле. Моделирование проведем в обобщенном виде для следующей задачи:

$$\frac{\partial^\alpha P}{\partial t^\alpha} = 0.01 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + P + P^3 - P^5 + E(t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq 1,$$

$$P|_{t=0} = \tanh\left(\frac{x}{0.05}\right), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

$$P|_{x=0} = -1, \quad P|_{x=1} = 1, \quad 0 \leq t \leq 1,$$

где $E(t) = 0.1 + 5t$, $0 < \alpha < 1$.

Для численной реализации воспользуемся также конечно-разностной схемой, построенной на основе определения Капуто. Выполним анимированное представление и приведем двумерные визуализации последовательных стадий движения доменной границы в линейно-нарастающем поле. Для графического представления одномерную модель приведем к квазидвумерному случаю, что позволит визуализировать перемещение плоской границы, разделяющей домены с различной ориентацией поляризации.

На рисунке 4.19 показано распределение поляризации в виде координатных функций в различные моменты времени последовательного

переключения поляризации. Профиль изменения поляризации дает информацию о положении доменной границы. Таким образом, доменная граница перемещается от уровня $L/2$ до начального значения координаты $x = 0$. Численная оценка положения границы позволяет рассчитать скорость движения этой границы в процессе переключения.

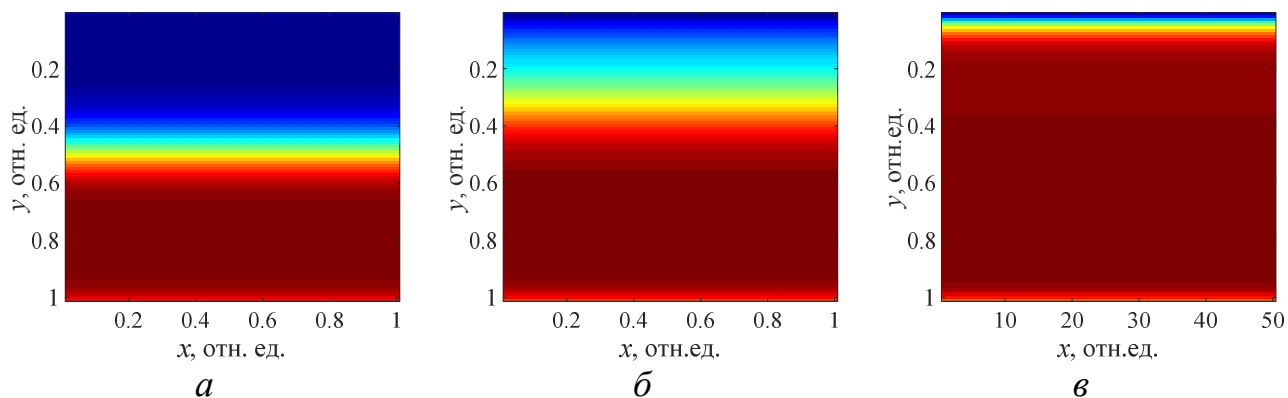


Рисунок 4.19 – Графическое представление координатной проекции поляризации в фиксированные моменты времени $t = 0$ отн. ед. – a ; $t = 0.5$ отн. ед. – b ; $t = 1$ отн. ед. – v при $\alpha = 0.9$

Проведем численное исследование зависимости характеристик динамики доменных границ от значения порядка дробной производной. Рисунок 4.20 демонстрирует динамику доменной границы при переключении поляризации с условиях реализации модели при варьировании порядка α дробного дифференцирования. Рисунок 4.21 отображает зависимость скорости движения границы $v(t)$ при варьировании значения дробной производной.

Зависимость характера движения доменной границы от порядка дробной производной по времени может быть сформулирована следующим образом: уменьшение параметра α и учет долговременной памяти в динамической системе ведут к замедлению движения стенки на начальных этапах переключения и ее ускорению в заключительной стадии, в терминах модели аномальной диффузии – соответствующих «замедленному блужданию». Варьирование значений порядка дробного дифференцирования α , отвечающего за эффект памяти при реализации процесса переключения, позволяет «управлять характером»

динамики доменной границы в модельном представлении.

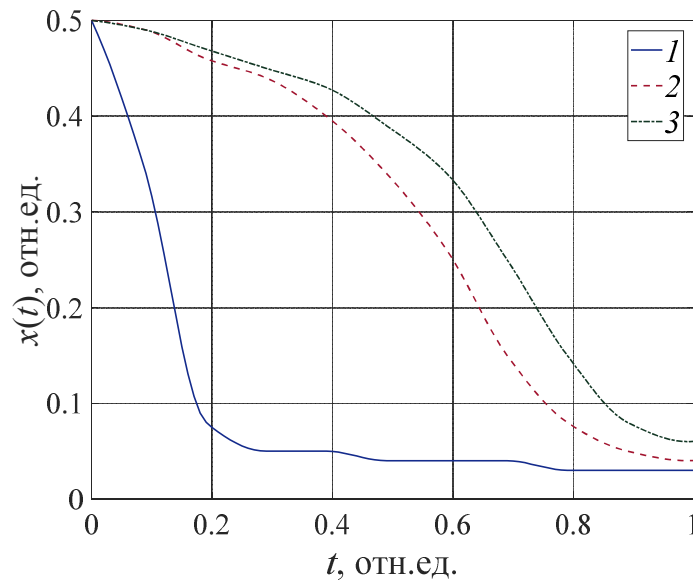


Рисунок 4.20 – Зависимость координаты доменной границы $x(t)$ при варьировании порядка дробной производной

$$1 - \alpha = 0.99, 2 - \alpha = 0.85, 3 - \alpha = 0.7$$

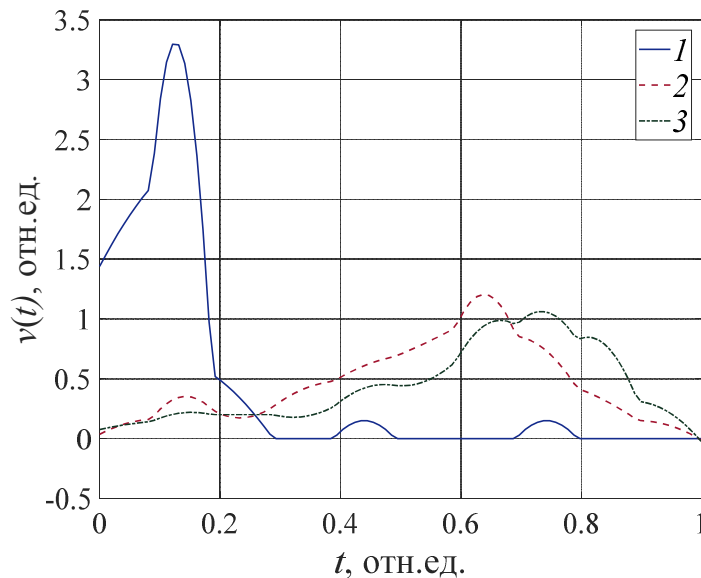


Рисунок 4.21 – Скорость движения доменной границы $v(t)$ при варьировании порядка дробной производной $1 - \alpha = 0.99, 2 - \alpha = 0.85, 3 - \alpha = 0.7$

Представим качественное сопоставление результатов моделирования с данными экспериментов, описанных в литературных источниках. На рисунке 4.22 приведены экспериментальные данные. Зависимость положения 180° доменной границы BaTiO_3 от времени (полное время переключения 0.7 с) по дан-

ным литературного источника [296]. Можно отметить, что в большей степени такое поведение соответствует реализации модели при $\alpha \rightarrow 1$. На рисунке 4.25 показана зависимость скорости движения доменных границ ТГС от времени (полное время переключения 0.16 с, рисунок 4.25 б). Данная зависимость построена при обработке видеоматериала по визуализации процесса переключения кристаллов ТГС в режиме инжекции пучка электронов из личного архива профессора Александра Анатольевича Согра (1948 – 2006) – автора ряда уникальных методик исследования полярных материалов. Фрагмент приведен на рисунке 4.25 а [297].

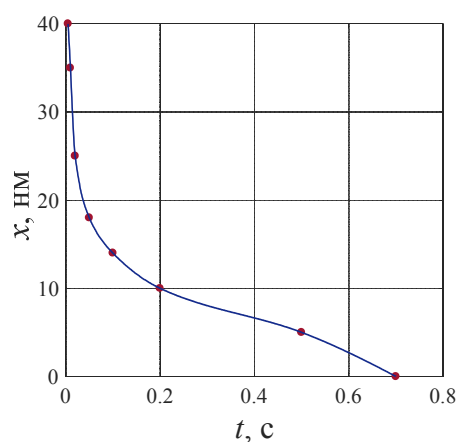
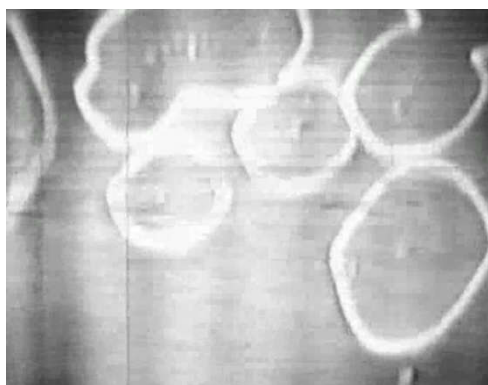
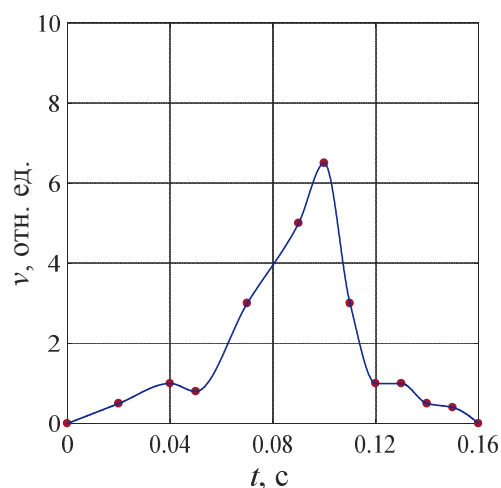


Рисунок 4.22 – Зависимость положения 180° доменной границы BaTiO_3 от времени [296]



a



б

Рисунок 4.23 – Фрагмент динамики доменных границ ТГС в процессе переключения поляризации в режиме инжекции [297] (*a*) и рассчитанная зависимость скорости движения границы (в фиксированной позиции) (*б*)

В последнем случае оценка скорости движения границы свидетельствует, что перестройка доменной структуры в процессе переключения поляризации имеет характер замедленного блуждания и в модельном отношении характеризуется порядком дробного дифференцирования $\alpha < 1$. Конечно, подобный анализ носит лишь качественный характер, а данная задача представляет самостоятельный научный интерес и требует дальнейших исследований. Тем не менее, можно заключить, что дробно-дифференциальный подход позволяет ввести в некотором смысле классификацию «характера» динамики доменных границ в зависимости от значения порядка дробной производной. Используя термины модели аномальной диффузии, движение границы может иметь ускоренный, классический или замедленный характер, а значение порядка дробной производной дает численную оценку степени проявления в таком процессе эффектов памяти.

4.4. Основные результаты и выводы

Таким образом, содержание данной главы можно обобщить в виде следующих выводов. В соответствии со спецификацией требований к программному обеспечению решаемых научных задач разработан модульный программный комплекс, интегрирующий возможности приложений по моделированию и исследованию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем с памятью: в режиме инъекции, в условиях интенсивного нагрева, при переключении поляризации во внешнем поле. Описаны структура и режимы работы комплекса программ. Отмечено, что 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.

Проведена проверка адекватности результатов моделирования на основе

сравнения результатов, полученных численно, с аналитическими решениями для тестовых примеров. Верификация результатов моделирования при решении нелинейных задач также основана на сравнении результатов моделирования с данными целочисленных аналогов в предельных режимах ($\alpha=0.99$).

Представлена серия вычислительных экспериментов по исследованию закономерностей, характеризующих динамические отклики типичных сегнетоэлектриков в условиях электронного облучения, нагрева и переключения поляризации.

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

Приведены данные компьютерного моделирования тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в режиме инжекции пучка электронов. С использованием технологии вычислительного эксперимента установлено, что дробно-дифференциальная модель и стохастический алгоритм, имитирующий процесс зародышеобразования, позволяют описать ток переключения поляризации адекватно данным экспериментальных наблюдений.

Представлены результаты моделирования пироотклика кристалла ТГС в окрестности температуры фазового перехода. Установлено, что возможность вариации параметра дробного дифференцирования по времени в модели теплопроводности позволяет строить уточненную аппроксимацию распределения температуры при анализе пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика.

Представлены данные компьютерного моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории. Проведено численное исследование базовых моделей (Ландау – Халатникова, обобщенной модели Ландау – Халатникова и квазидинамического аналога) на примере расчета гистерезисной зависимости поляризации от поля для титаната бария (для объемного кристалла и тонкой пленки). Проведено сравнение результатов моделирования с данными физических экспериментов (на примере титаната бария BaTiO_3). Показано, что обобщенная модель Ландау – Халатни-

кова и классическая модель Ландау – Халатникова приводят к одинаковым результатам для объемных кристаллов. Для тонких пленок важен учет слагаемого Гинзбурга (переход к уравнению с частными производными). И для объемных материалов, и для тонких пленок важен учет динамики процесса – квазидинамическая модель уступает в качестве аппроксимации нестационарным моделям.

Показаны результаты реализации дробно-дифференциальной модификации обобщенной модели Ландау – Халатникова для описания сегнетоэлектрического гистерезиса. Установлено, что уменьшение значения порядка дробной производной по времени приводит к сужению петли гистерезиса при сохранении ее формы. Представлены результаты моделирования зависимости поляризации от поля для тонкой пленки титаната бария BaTiO_3 (переключение c -доменов). Приемлемое согласование с экспериментальными данными соответствует порядку дробного дифференцирования $\alpha=0.85$. Показано, что параметр α , как численная характеристика эффекта памяти, является дополнительным управляющим параметром динамической модели, который может быть «настроен» для обеспечения лучшего согласования с данными эксперимента.

Представлены результаты моделирования движения доменной границы в процессе переключения поляризации на основе дробно-дифференциального аналога обобщенной модели Ландау – Халатникова. Приведены двумерные визуализации последовательных стадий движения доменной границы в линейно нарастающем поле. Проведен анализ закономерностей динамики доменной границы и скорости движения границы при варьировании значения порядка дробной производной. Сделан вывод, что дробно-дифференциальный подход позволяет ввести классификацию «характера» динамики доменных границ в зависимости от значения порядка дробной производной. Используя термины модели аномальной диффузии, движение границы может носить ускоренный, классический или замедленный характер, а значение порядка дробной производной дает численную оценку степени проявления в таком процессе эффектов памяти.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертационной работе изложены результаты применения дробно-дифференциального подхода для развития математических моделей формирования динамических откликов сегнетоэлектрических материалов. Основные итоги можно сформулировать в следующих выводах по работе в целом.

1. Приведен ряд концептуальных 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 – инъекции 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 решения начально-граничной задачи для дифференциального уравнения с частными производными, включающего дробную производную по времени.

8. Для решения полулинейного уравнения аномальной диффузии (в постановке начально-граничной задачи) 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 осуществлена 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 α – 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. Перспективы дальнейшей разработки тематики исследований заключаются в развитии вычислительного дробно-дифференциального аппарата для диагностики, контроля и прогнозирования поведения фрактальных систем различной природы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биссенова, К.В. Использование аппарата дробного дифференцирования для численного моделирования динамических систем / К.В. Биссенова, Л.И. Мороз // Математическое и компьютерное моделирование: сб. материалов VI Междунар. науч. конф. – Омск: Изд-во Омского гос. ун-та, 2018. – С. 36-39.
2. Maslovskaya, A.G. Theoretical and numerical analysis of the Landau – Khalatnikov model of ferroelectric hysteresis / A.G. Maslovskaya, L.I. Moroz, A.Yu. Chebotarev, A.E. Kovtanyuk // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2021. – V. 93. – P. 105524 (13).
3. Самко, С.Г. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения / С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.
4. Oldham, K. B. The fractional calculus. Theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order / K. B. Oldham, J. Spanier. – San Diego: Academic press, 1974. – 240 p.
5. Учайкин, В.В. Метод дробных производных / В.В. Учайкин. – Ульяновск: Изд-во «Артишок», 2008. – 512 с.
6. Miller, K.S. An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations / K.S. Miller, B. Ross. – New York: John Wiley and sons, 1993. – 376 p.
7. Petráš, I. Fractional-order nonlinear systems: modeling, analysis and simulation / I. Petráš. – Dordrecht: Springer, 2010. – 218 p.
8. Васильев, В.В. Дробное исчисление и аппроксимационные методы в моделировании динамических систем / В.В. Васильев, Л.А. Симак. – Киев: НАН Украины, 2008. – 256 с.
9. Kilbas, A.A. Theory and applications of fractional differential equations / A.A. Kilbas, H.M. Srivastava, J.J. Trujillo. – Amsterdam: Elsevier, 2006. – 523 p.
10. Podlubny, I. Fractional differential equations / I. Podlubny. – San Diego: Academic press, 1999. – 240 p.

11. Abdeljawad, T. On Riemann and Caputo fractional differences / T. Abdeljawad // *Computers & Mathematics with Applications*, 2011. – V. 62. – No. 3. – P. 1602 – 1611.
12. Бутковский, А.Г. Дробное интегро-дифференциальное исчисление и его приложения в теории управления. I. Математические основы и проблема интерпретации / А.Г. Бутковский, С.С. Постнов, Е.А. Постнова // *Автоматика и телемеханика*, 2013. – № 4. – С. 3 – 42.
13. Almeida, R. Fractional Euler-Lagrange differential equations via Caputo derivatives / R. Almeida, A.B. Malinowska, D. Torres // *Fractional Dynamics and Control*, 2012. – P. 109 – 118.
14. Pooseh, S. Discrete direct methods in the fractional calculus of variations / S. Pooseh, R. Almeida, F. M. Delfim // *Computers & Mathematics with Applications*, 2013. – V. 66. – No. 5. – P. 668 – 676.
15. Нахушев, А.М. Дробное исчисление и его применение / А.М. Нахушев. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 272 с.
16. Jumarie, G. Modified Riemann-Liouville derivative and fractional Taylor series of nondifferentiable functions further results / G. Jumarie // *Computers & Mathematics with Applications*, 2006. – V. 51. – No. 9. – P. 1367 – 1376.
17. Caputo, M. Linear models of dissipation whose Q is almost frequency independent, part II / M. Caputo // *Geophysical Journal International*, 1967. – V. 13. – No. 5. – P. 529 – 539.
18. Atangana, A. A note on fractional order derivatives and table of fractional derivatives of some special functions / A. Atangana, A. Secer // *Abstract and Applied Analysis*, 2013. – V. 2013. – P. 279681 (8).
19. Almeida, R. A numerical method to solve higher-order fractional differential equations / R. Almeida, N.R. Bastos // *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2016. – V. 13. – P.1339 – 1352.
20. Tarasov, V.E. Partial fractional derivatives of Riesz type and nonlinear fractional differential equations / V.E. Tarasov // *Nonlinear Dynamics*, 2016. – V. 86. – P.1745 – 1759.

21. Zavada, P. Operator of fractional derivative in the complex plane/ P. Zavada // *Communications in Mathematical Physics*, 1998. – V. 192. – P. 261 – 285.
22. Magin, R. On the fractional signals and systems / R. Magin, M.D. Ortigueira, I. Podlubny, J. Trujillo // *Signal processing*, 2011. – V. 91. – P. 350 –371.
23. Valerio, D. Variable-order fractional derivatives and their numerical approximations / D. Valerio, J.S. Costa // *Signal processing*, 2011. – V. 91. – P. 470 – 483.
24. Sun, H. Time fractional differential equation model with random derivative order / H. Sun, Y. Chen, W. Chen // *7th International Conference on Multibody Systems, Nonlinear Dynamics, and Control*, 2009. – P. 1301 – 1306.
25. Bourdin, L. First-and second-order necessary optimality conditions for Bolza functionals with Caputo fractional derivatives and general mixed initial/final constraints / L. Bourdin, R. Ferreira // *HAL*, 2020. – P. 1 – 29.
26. Abdeljawad, T. On Riemann and Caputo fractional differences / T. Abdeljawad // *Computers & Mathematics with Applications*, 2011. – V. 62. – No. 3. – P. 1602 – 1611.
27. Shi, X.-C. Analytical solutions of fractional differential equations using the convenient adomian series / X.-C. Shi, L.-L. Huang, Z.-G. Deng, D. Liu // *Abstract and Applied Analysis*, 2014. – V. 2014. – P. 284967 (4).
28. Khani, A. Analytical method for solving fractional order generalized KdV equation by beta-fractional derivative / A. Khani, M. Bagheri // *Advances in Mathematical Physics*, 2020. – V. 2020. – 8819183 (18).
29. Das, S. Analytical solution of a fractional diffusion equation by variational iteration method / S. Das // *Computers & Mathematics with Applications*, 2009. – V. 57. – No. 3. – P. 483 – 487.
30. Golbabai, A. Analytical treatment of differential equations with fractional coordinate derivatives / A. Golbabai, K. Sayevand // *Computers & Mathematics with Applications*, 2011. – V. 62. – No. 3. – P. 1003 – 1012.
31. Diethelm, K. Algorithms for the fractional calculus: a selection of nu-

merical method / K. Diethelm, N.J. Ford, A.D. Freed, Yu. Luchko // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2005. – V. 194. – P. 743 – 773.

32. Li, C. *Numerical methods for fractional calculus* / C. Li, F. Zeng. – New York Chapman and Hall/CRC, 2015. – 300 с.

33. Cui, M. Compact finite difference method for the fractional diffusion equation / M. Cui // *Journal of Computational Physics*, 2009. – V. 228. – No. 20. – P. 7792 – 7804.

34. Гордиевских, Д.М. Численное решение некоторых вырожденных дифференциальных уравнений с дробной производной по времени / Д.М. Гордиевских, П.Н. Давыдов // Интернет-журнал «НАУКОВЕДЕНИЕ», 2015. – Т. 7. – № 2. – С. 1 – 11.

35. Sontakke, B.R. Approximate scheme for time fractional diffusion equation and its applications / B.R. Sontakke, A.S. Shelke // *Global J. of Pure and Applied Mathematics*, 2017. – V. 13. – No. 8. – P. 4333 – 4345.

36. Dimitrov, Y. Three-point compact approximation for the Caputo fractional derivative / Y. Dimitrov // *Communications on Applied Mathematics and Computation*, 2015. – V.31. – No. 4. – P. 413 – 442.

37. Wei, Y. Infinite series representation of fractional calculus: theory and applications / Y. Wei, Y. Chen, Q. Gao, Y. Wang // *arXiv e-prints*, 2019. – P. 1901.11134.

38. Cai, M. Numerical Approaches to fractional Integrals and derivatives: a review / M. Cai, C. Li // *Mathematics*, 2020. – V.8. – No. 1. – P. 1 – 53.

39. Baleanu, D. *Fractional calculus: models and numerical methods* / D. Baleanu, K. Diethelm, E. Scalas, J.J. Trujillo // Singapore: World Scientific, 2012. – 400 p.

40. Gao, G. A new fractional numerical differentiation formula to approximate the Caputo fractional derivative and its applications / G. Gao, Z. Sun, H. Zhang // *Journal of Computational Physics*, 2014. – V. 259. – P. 33 – 50.

41. Li, C. High-order approximation to Caputo derivative and Caputo-type advection-diffusion equations / C. Li, R. Wu, H. Ding // *Communications in Applied*

and Industrial Mathematics, 2015. – V. 6. – No. 2. – P. 1 – 33.

42. Sousa, E. How to approximate the fractional derivative of order $1 < \alpha \leq 2$ / E. Sousa // International journal of bifurcation and chaos, 2012. – V.22. – No. 4. – P. 1 – 6.

43. Cao, J. High-order approximation to Caputo derivatives and Caputo-type advection-diffusion equations (II) / J. Cao, C. Li, Y.-Q. Chen // Fractional calculus and Applied analysis, 2015. – V. 18. – No 3. – P. 735 – 761.

44. Петухов, А.А. Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений / А.А. Петухов, Д.Л. Ревизников // Вестник МАИ, 2009. – Т. 16. – С. 228 – 234.

45. Meerschaert, M.M. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations / M.M. Meerschaert, C. Tadjeran // Journal of Computational and Applied Mathematics, 2004. – V. 172. – No. 1. – P. 65 – 77.

46. Meerschaert, M.M. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations / M.M. Meerschaert, C. Tadjeran // Applied Numerical Mathematics, 2006. – V. 56. – No. 1. – P. 80 – 90.

47. Cui, M. Compact alternating direction implicit method for two-dimensional time fractional diffusion equation / M. Cui // J. Comput. Phys., 2012. – V. 231. – P. 2621 – 2633.

48. Barrett, J.H. Differential equation of non-integer / J.H. Barrett // Canad. J. Math., 1954. – V. 6 – No.4. – P. 529 – 541.

49. Lakshmikantham, V. Theory of Fractional Functional Differential Equations / V. Lakshmikantham // Nonlinear Analysis, 2008. – V. 69. – P. 3337 – 3343.

50. Ahmad, B. Existence of solutions for irregular boundary value problems of nonlinear fractional differential equations / B. Ahmad // Appl. Math. Lett., 2010. – V. 23. – P. 390 – 394.

51. Deng, J. Existence and uniqueness of solutions of initial value problems for nonlinear fractional differential equations / J. Deng, L. Ma // Appl. Math. Lett., 2010. – V. 23. – P. 676 – 680.

52. Kosmatov, N. Integral equations and initial value problems for nonlinear

differential equations of fractional order / N. Kosmatov // *Nonlin. Anal.*, 2009. – V. 70. – P. 2521 – 2529.

53. Tatar, N. The Existence of mild and classical solutions for a second-order abstract fractional problem / N. Tatar // *Nonlin. Anal.* 2010. – V. 73. – P. 3130 – 3139.

54. Kou, C. Existence of solutions of initial value problems for nonlinear fractional differential equations on the half-axis / C. Kou, H. Zhou, Y. Ye // *Nonlin. Anal.*, 2011. – V. – 74. –P. 5975 – 5986.

55. Allison, J. Multi-point boundary value problems of fractional order / J. Allison, N. Kosmatov // *Commun. Appl. Anal.*, 2008. –V. 12. – No. 4. – P. 451 – 458.

56. Огородников, Е.Н. Постановка и решение задач типа Коши для дифференциальных уравнений второго порядка с дробными производными Римана–Лиувилля / Е.Н. Огородников, Н.С. Яшагин // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2010. – № 1. – С. 24 – 36.

57. Чадаев, В.А. Задача Коши в локально-нелокальной постановке для нелинейного уравнения дробного порядка в определённом классе / В.А. Чадаев // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2010. – № 1. – С. 214 – 217.

58. Heymans, N. Physical interpretation of initial conditions for fractional differential equations with Riemann-Liouville fractional derivatives / N. Heymans, I. Podlubny // *Rheologica Acta*, 2006. – V. 45. – P. 765 – 771.

59. Edwards, J.T. The numerical solution of linear multi-term fractional differential equations: systems of equations / J.T. Edwards, N.J. Ford, A.C. Simpson // *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2002. – V. 148. – P. 401 – 418.

60. Saadatmandi, A. New operational matrix for solving fractional order differential equations / A. Saadatmandi, M.A. Dehghan // *Comput. Math. Appl.*, 2010. – V. 59. – P. 1326 – 1336.

61. Lakestani, M. The construction of operational matrix of fractional derivatives using B-spline functions / M. Lakestani, M. Dehghan, S. Irandoust-pakchin // *Commun. Nonlin. Sci.Numer. Simulat.*, 2012. – V. 17. – P. 1149 – 1162.

62. Li, Y. Solving a nonlinear fractional differential equation using Chebyshev wavelets / Y. Li // Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simulat., 2010. – V. 15. – P. 2284 – 2292.
63. Deng, W. Stability analysis of linear fractional differential system with multiple time delays / W. Deng, C. Li, J. Lu // Nonlinear Dynamics, 2007. – V. 48. – P. 409 – 416.
64. Deng, W. Numerical algorithm for the time fractional Fokker-Planck equation / W. Deng W. // Journal of Computational Physics, 2007b. – V. 227. – P. 1510 – 1522.
65. Scherer, R. The Grünwald – Letnikov method for fractional differential equations / R. Scherer, S. L. Kalla, Y. Tang, J. Huang // Computers & Mathematics with Applications, 2011. – V. 62. – No. 3. – P. 902 – 917.
66. Polat, R. Finite difference solution to the time-fractional differential-difference / R. Polat // Burgers equation journal of science and technology, 2019. – V. 12. – P. 258 – 262.
67. Garrappa, R. Numerical solution of fractional differential equations: a survey and a software tutorial / R. Garrappa // Mathematics, 2018. – V. 6. – No. 2. – P. 1 – 16.
68. Мороз, Л.И. Реализация дробно-дифференциальной модели динамики самоподобных физических систем на основе предикт-корректорной схемы / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // В кн.: Сборник трудов VIII Международной молодежной научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем», Ч. 3. – Уфа, 2018. – С. 56 – 61.
69. Мороз, Л.И. Метод прогноза и коррекции в задаче численного моделирования фрактальной динамики доменных границ сегнетоэлектриков / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2018. – Вып.83. – С. 3 – 8.
70. Мороз, Л.И. Гибридный фрактально-стохастический подход к моделированию кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции /

Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // Математическое моделирование, 2019. – Т. 31. – № 9. – С. 131 – 144.

71. Luchko, Y. F. Scale-invariant solutions of a partial differential equation of fractional order / Y. F. Luchko, R. Gorenflo // *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 1998. – V. – No. 1. – P. 63 – 78.

72. Килбас, А.А. Аналог задачи Бицадзе – Самарского для уравнения смешанного типа с дробной производной / А.А. Килбас, О.А. Репин // *Дифференц. уравнения*, 2003. – Т. 39. – № 5. – С. 638 – 644.

73. Luchko, Yu. Maximum principle and its application for the time-fractional diffusion equations / Yu. Luchko // *Frac. Calc. Appl. Anal.*, 2011. – V. 14. – No. 1. – P. 110 – 124.

74. Stan, D. The Fisher–KPP equation with nonlinear fractional diffusion / D. Stan, J. L. Vazquez // *SIAM J. Math. Anal.*, 2014. – V. 46. – No. 5. – P. 3241 – 3276.

75. Kemppainen, J. Existence and uniqueness of the solution for a time-fractional diffusion equation with Robin boundary condition / J. Kemppainen // *Abstract and Applied Analysis*, 2011. – V. 1. – 321903(11).

76. Псху, А.В. Уравнения в частных производных дробного порядка / А.В. Псху. – М.: Наука, 2005. – 199 с.

77. Luchko, Yu. Some uniqueness and existence results for the initial-boundary-value problems for the generalized time-fractional diffusion equation / Yu. Luchko // *Comput. Math. Appl.* – 2010. – V. 59. – No. 5. – P. 1766-1772.

78. Chen, W. Anomalous diffusion modeling by fractal and fractional derivatives / W. Chen, H. Sun, X. Zhang, D. Korošak // *Computers & Mathematics with Applications*, 2010. – V. 59. – № 5. – P. 1754 – 1758.

79. Ревизников, Д.Л. Численное моделирование аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале / Д.Л. Ревизников, Ю.В. Сластуженский // *Матем. моделирование*, 2013. – V.25. – No.5. – P. 3 – 14.

80. Ворошилов, А.А. Задача Коши для диффузионно-волнового уравнения с частной производной Капуто / А.А. Ворошилов, А.А. Килбас // *Диффе-*

ренциальные уравнения, 2006. – Т. 42. – № 5. – С. 599 – 609.

81. Мамчуев, М.О. Фундаментальное решение нагруженного параболического уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами / М.О. Мамчуев // Дифференциальные уравнения, 2015. – Т. 51. – № 5. – С. 611 – 620.

82. Kilbas, A.A. Cauchy-type problem for diffusion-wave equation with the Riemann–Liouville partial derivative / A.A. Kilbas, J.J. Trujillo, A.A. Voroshilov // Fract. Calc. Appl. Anal., 2005. – V. 9. – No. 2. – P. 225 – 239.

83. Kochubei, A.N. The fundamental solutions for the fractional diffusion-wave equation / A.N. Kochubei, S.D. Eidelman // J. Differential Equations, 2004. – V. 199. – No. 2. – P. 211 – 255.,

84. Luchko, Yu. Some uniqueness and existence results for the initial-boundary-value problems for the generalized time-fractional diffusion equation / Yu. Luchko // Comput. Math. Appl., 2010. – V. 59. – No. 5. – P. 1766 – 1772.

85. Luchko, Yu. Propagation speed of the maximum of the fundamental solution to the fractional diffusion–wave equation / Yu. Luchko, F. Mainardi, Yu. Povstenko // Comput. Math. Appl., 2013. – V. 66. – No. 5. – P. 774 – 784.

86. Mainardi, F. The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation / F. Mainardi, Yu. Luchko, G. Pagnini // Fract. Calc. Appl. Anal., 2001. – V. 4. – No. 2. – P. 153 – 192.

87. Pedro, T. Nonlinear anomalous diffusion equation and fractal dimension: Exact generalized gaussian solution, Exact solutions for nonlinear fractional anomalous diffusion equations / T. Pedro, R. S. Mendes, L.C. Malacarne, E.K. Lenzi, J. Liang, F. Ren, W. Qiu, J. Xiao // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2007. – V. 385. – No. 1. – P. 80 – 94.

88. Bologna, M. Anomalous diffusion associated with nonlinear fractional derivative Fokker–Planck-like equation: exact time-dependent solutions / M. Bologna, C. Tsallis, P. Grigolini // Phys. Rev. E., 2000. – V. 62. – No. 2. – P. 2213 – 2218.

89. Lenzi, E.K. Solutions of some nonlinear diffusion equations and generalized entropy framework / E.K. Lenzi, M.A.F. dos Santos, F.S. Michels // Entropy,

2013. – V. 15. – No. 9. – P. 3931 – 3940.

90. Malacarne, L.C. Nonlinear equation for anomalous diffusion: unified power-law and stretched exponential exact solution / L.C. Malacarne, R.S. Mendes, I.T. Pedron, E.K. Lenzi // *Phys. Rev. E*, 2001. – V. 63. – No. 3. – P. 030101 (11).

91. Bonforte, M. Fractional nonlinear degenerate diffusion equations on bounded domains. Part I. Existence, uniqueness and upper bounds / M. Bonforte, J.L. Vazquez // *Nonlin. Anal.: Theory, Methods & Appl.*, 2016. – V. 131. – P. 363 – 398.

92. Xiaoting, L. A scale-dependent finite difference approximation for time fractional differential equation / L. Xiaoting, H. Sun, Y. Zhang, Z-J. Fu. // *Computational Mechanics*, 2019. – V. 63. – P. 429 – 442.

93. Ali, U. Crank-Nicolson finite difference method for two-dimensional fractional sub-diffusion equation / U. Ali, F.A. Abdullah, A.I. Ismail. // *J. of Interpolation and Approximation in Sci. Comp.*, 2017. – V. 2017. – № 2. – P. 18 – 29.

94. Sontakke, B.R. Approximate scheme for time fractional diffusion equation and its applications / B.R. Sontakke, A.S. Shelke // *Global J. of Pure and Applied Math.*, 2017. – V. 13. – № 8. – P. 4333 – 4345.

95. Mahdy, A. Crank-Nicolson finite difference method for solving time-fractional diffusion equation/ A. Mahdy, N. Sweilam, M. Khader // *Journal of Fractional Calculus and Applications*, 2012. – V.2. – № 2. – P. 1 – 9.

96. Žecová, M. Heat conduction modeling by using fractional-order derivatives/ M. Žecová, J. Terpák // *Applied Mathematics and Computation*, 2015. – V. 257. – P. 365 – 373.

97. Podlubny, I. Matrix approach to discrete fractional calculus II: partial differential equations / I. Podlubny // *Journal of Computational Physics*, 2000. – V. 3. – P. 359 – 386.

98. Szekeres; B.J. A finite difference method for fractional diffusion equations with Neumann boundary conditions / B.J. Szekeres; F. Izsák // *Open Mathematics*, 2015. – V. 13. – № 1. – P. 553 – 561.

99. Tadjeran, C. A second-order accurate numerical method for the two-dimensional fractional diffusion equation / C. Tadjeran, M.M. Meerschaert // *Journal*

of Computational Physics, 2007. – V. 220. – No. 2. – P. 813 – 823.

100. Zhuang, P. Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation / P. Zhuang, F. Liu // J. Appl. Math. Comput., 2006. – V. 22. – P. 87 – 99.

101. Chen, S. Finite difference approximations for the fractional Fokker–Planck equation / S. Chen, F. Liu, P. Zhuang, V. Anh. // Appl. Math. Model., 2009. – V. 33. – P. 256 – 273.

102. Al-Shibani, F.S. Compact finite difference methods for the solution of one dimensional anomalous sub-diffusion equation / F.S. Al-Shibani, A.I.Md. Ismail, F.A. Abdullah // Gen. Math. Notes., 2013. – V. 18. – P. 104 – 119.

103. Cao, X. The implicit midpoint method for the modified anomalous sub-diffusion equation with a nonlinear source term / X. Cao, X. Cao, L. Wen // Journal of Computational and Applied Mathematics, 2017. – V. 318. – P. 199 – 210.

104. Li, C. Numerical approximation of nonlinear fractional differential equations with subdiffusion and superdiffusion / C. Li, Z. Zhaoa, Y.Q. Chen // Computers & Mathematics with Applications, 2011. – V. 62. – P. 855 – 875.

105. Бейбалаев, В.Д. Численный метод решения начально-граничной задачи для двумерного уравнения теплопроводности с производными дробного порядка / В.Д. Бейбалаев, М.Р. Шабанова // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2010. – В. 5. – С. 244 – 251.

106. Langlands, T.A. The Accuracy and Stability of an implicit solution method for the fractional diffusion equation / T.A. Langlands, B.I. Henry // J. Comput. Phys., 2005. – V. 205. – P. 719 – 736.

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

108. Gao, G. Two alternating direction implicit difference schemes with the extrapolation method for the two-dimensional distributed-order differential equations / G. Gao, Z. Sun // Computers and Mathematics with Applications, 2015. – V. 69. –

No.9. – P. 926 – 948.

109. Nasrollahzadeh, F. An implicit difference-ADI Method for the two-dimensional space-time fractional diffusion equation / F. Nasrollahzadeh, S.M. Hosseini // Iranian Journal of Mathematical Sciences and Informatics, 2016. – V. 11. – No. 2. – P. 71 – 86.

110. Kuttler, C. Hybrid stochastic fractional-based approach to modeling bacterial quorum sensing / C. Kuttler, A. Maslovskaya // Applied Mathematical Modelling, 2020. – V. 93. – P. 360 – 375.

111. Пименов, В.Г. Численный метод для дробных уравнений адвекции-диффузии с наследственностью / В.Г. Пименов // Итоги науки и техн. Сер. Современ. мат. и ее прил., 2017. – Т. 132. – С. 86 –90.

112. Pimenov, V.G. Numerical method for fractional advection-diffusion equation with heredity / V.G. Pimenov // J. Math. Sci. (N.Y.), 2018. – V. 230. – No. 5. – P. 737 – 741.

113. Пименов, В.Г. Неявный численный метод решения дробного уравнения адвекции-диффузии с запаздыванием / В.Г. Пименов, А.С. Хенди // Тр. ИММ УрО РАН, 2016. – Т. 22. – № 2. – С. 218 – 226.

114. Pimenov, V.G. Fractional analog of Crank – Nicholson method for the two sided space fractional partial equation with functional delay / V.G. Pimenov, A.S. Hendy // Ural Math. J., 2016. – V. 2. – С. 48 – 57.

115. Priya, S.G. Higher-Order Numerical Scheme for the Fractional Heat Equation with Dirichlet and Neumann Boundary Conditions / G. Sudha Priya, P. Prakash, J.J. Nieto, Z. Kayar // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2013. – P. 540 – 559.

116. Ding, H. A high-order numerical algorithm for two-dimensional time-space tempered fractional diffusion-wave equation / H. Ding // Applied Numerical Mathematics, 2019. – V. 135. – P. 30 – 46.

117. Gu, X.M. Fast iterative method with a second-order implicit difference scheme for time-space fractional convection–diffusion equation / X.M. Gu, T.Z. Huang, C.C. Ji // J. Sci. Comput., 2017. – V. 72. – P. 957 – 985.

118. Мороз, Л.И. Численное моделирование процесса аномальной диффузии на основе схемы повышенного порядка точности / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // Математическое моделирование, 2020. – Т. 32. – № 10. – С. 62 – 76.

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

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

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

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

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

124. Мороз, Л.И. Приложение дробно-дифференциального исчисления к задачам моделирования процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических материалов / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // 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.

125. Мороз, Л.И. Дробно-дифференциальная модель аномальной диффузии: приложение к описанию процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // Лобачевские чтения: материалы

XVIII Всеросс. молодежной науч. школы-конференции. – Казань: Изд-во Академии наук РТ, 2019. – Т. 58. – С. 98-101.

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

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

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

129. Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы / Б. Мандельброт – М.: Институт компьютерных исследований, 2002. – 656 с.

130. Божокин, С.В. Фракталы и мультифракталы / С.В. Божокин, Д.А. Паршин – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 128 с.

131. Cattani, C. Fractal and Fractional / C. Cattani // Fractal Fract., 2017. – V. 1. – P. 1 – 3.

132. Butera, S. A physically based connection between fractional calculus and fractal geometry / S. Butera, M. Paola // Annals of Physics, 2014. – V. 350. – P. 146 – 158.

133. Jafari, F.K. The fractal calculus for fractal materials / F.K. Jafari, M.S. Asgari, A. Pishkoo // Fractal and Fractional, 2019. – V. 3. – P. 8 – 16.

134. Podlubny, I. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation / I. Podlubny // Fractional Calculus and Applied Analysis, 2004. – V. 5. – No. 4. – P. 367 – 386.

135. Tarasov, V.E. Geometric interpretation of fractional-order derivative /

V.E. Tarasov // *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 2016. – V.19. – No. 5. – P. 1200 – 1221.

136. Failla, G. Advanced materials modelling via fractional calculus: challenges and perspectives / G. Failla, M. Zingales // *Phil. Trans. R. Soc. A.*, 2020. – V. 378. – P. 20200050 (13).

137. Нигматуллин, Р.Р. Дробный интеграл и его физическая интерпретация / Р.Р. Нигматуллин // *Теор. матем. физ.*, 1992. – Т. 90. – № 3. – С. 354 – 368.

138. Yu, Z.-G. Fractional integral associated to generalized cookie cutter set and its physical interpretation / Z.-G. Yu, F.-Y. Ren, J. Zhou // *J. Phys. A.: Math. Gen.*, 1997. – V. 30. – No. 15. – P. 5569 – 5578.

139. Ren, F.-Y. Integrals and Derivatives on Net Fractals / F.-Y. Ren, J.-R. Liang, X.-T. Wang, W.-Y. Qiu // *Chaos, Solitons and Fractals*, 2003. – V. 16. – P. 107 – 117.

140. Parvate, A. Calculus on fractal subsets of real line – I: formulation / A. Parvate, A.D. Gangal // *Fractals*, 2009. – V. 17. – No. 1. – P. 53 – 81.

141. Parvate, A. Calculus on fractal curves in R^n / A. Parvate, S. Satin, A.D. Gangal // *Fractals*, 2011. – V. 19. – No. 1. – P. 15 – 27.

142. Tatom, F.B. The relationship between fractional calculus and fractals / F.B. Tatom // *Fractals*, 1995. – V. 3. – No. 1. – P. 217 – 229.

143. Yao, K. Zhou On the connection between the order of fractional calculus and the dimensions of a fractal function / K. Yao, W.Y. SuS., P. Zhou // *Chaos Solitons & Fractals*, 2005. – V. 23. – No. 2. – P. 621 – 629.

144. Тарасов, В.Е. Модели теоретической физики с интегро-дифференцированием дробного порядка / В.Е. Тарасов. – Ижевск: РХД, 2011. – 570 с.

145. West, B.J. Physics of fractal operators / B.J. West, M. Bologna, P. Grigolini. – New York: Springer-Verlag, 2003. – 490 p.

146. Mainardi, F. Fractional Calculus and waves in linear viscoelasticity / F. Mainardi – London: Imperial College Press, 2010. – 368 p.

147. Atangana, A. Fractal-fractional differentiation and integration: Connecting fractal calculus and fractional calculus to predict complex system / A. Atangana // *Chaos, Solitons & Fractals*, 2017. – V. 102. – P. 396 – 406.
148. He, J.-H. Fractal calculus and its geometrical explanation / J.-H. He // *Results in Physics*, 2018. – V. 10. – P. 272 – 276.
149. Nigmatullin, R.R. Theory of dielectric relaxation in non-crystalline solids: from a set of micromotions to the averaged collective motion in the mesoscale region / R.R. Nigmatullin // *Physica B.*, 2005. – V. 358. – P. 201 – 215.
150. Учайкин, В.В. Дробно-дифференциальная кинетика дисперсионного переноса как следствие его автомодельности / В.В. Учайкин, Р.Т. Сибатов // *Письма в ЖЭТФ*, 2007. – Т. 86. – В. 8. – С. 584 – 588.
151. Zhang, Y. Time and Space nonlocalities underlying fractional-derivative models: distinction and literature review of field applications / Y. Zhang, D.A. Benson, D.M. Reeves // *Adv. Water Res.*, 2009. – V. 32. – P. 561 – 581.
152. Бабенко, Ю.И. Метод дробного дифференцирования в прикладных задачах теории тепломассообмена / Ю.И. Бабенко. – СПб.: НПО Профессионал, 2009. – 584 с.
153. Sabatier, J. Advances in fractional calculus. Theoretical developments and applications in physics and engineering / J. Sabatier, O.P. Agrawal, J.A.T. Machado. – Dordrecht: Springer, 2007. – 568 p.
154. Petras, I. Fractional-order nonlinear systems: modeling, analysis and simulation / I. Petras. – *Nonlinear Physical Science*, 2011. – 235 p.
155. Almeida, R. Modelling some real phenomena by fractional differential equations / R. Almeida, N.R. Bastos, M.T. Monteiro // *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 2015. – P. 1– 12.
156. Rihan, F.A. Numerical modeling of fractional-order biological systems/ F.A. Rihan // *Abstract and Applied Analysis*, 2013. – V. 2013. – P. 816803 (11).
157. Yue, Y. Modeling and application of a new nonlinear fractional financial model / Y. Yue, L. He, G. Liu // *Journal of Applied Mathematics*, 2013. – V. 2013. – P. 325050 (9).

158. Hilfer, R. Applications of fractional calculus in physics / R. Hilfer. – Singapore: WSPC, 2000. – 465 p.
159. Боброва, И.А. О применимости дробных производных в физических моделях / И.А. Боброва, А.Л. Бугримов, В.С. Кузнецов // Вестник МГОУ. Серия: Физика-математика, 2017. – № 3. – С. 12 – 22.
160. Tarasov, V.E. Fractional vector calculus and fractional Maxwell's equations / V.E. Tarasov // Annals of Physics, 2008. – V. 323. – P. 2756 – 2778.
161. Мержиевски, Л.А. Численное моделирование распространения теплового импульса во фрактальной среде / Л.А. Мержиевский, А.Н. Корчагина // Международная конференция «Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика», Новосибирск, 30 мая – 4 июня 2011 г. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38636/46433/Корчагина-Расширенные%20тезисы.pdf>.
162. Боголюбов, А.Н. Математическое моделирование сред с временной дисперсией при помощи дробного дифференцирования / А.Н. Боголюбов, А.А. Кобликов, Д.Д. Смирнова, Н.Е. Шапкина // Математическое моделирование, 2013. – Т. 25. – № 12. – С. 50 – 64.
163. Учайкин, В.В. Дробно-дифференциальные модели в гидромеханике / В. В. Учайкин // Известия вузов, ПНД, 2019. – Т. 27. – В. 1. – С. 5 – 40.
164. Shlesinger, M.F. Strange Kinetics / M.F. Shlesinger, G.M. Zaslavsky, J. Klafter // Nature, 1993. – V. 363. – No.6424. – P. 31 – 37.
165. Turski, A.J. Application of fractional derivative operators to anomalous diffusion and propagation problems / A.J. Turski, B. Atamaniuk, E. Turska // Mathematical Physics, 2007. – P. 1 – 11.
166. Головизнин, В.М. Аномальная диффузия радионуклидов в сильно-неоднородных геологических формациях / В.М. Головизнин, П.С. Кондратенко, Л.В. Матвеев. – М.: Наука, 2010. – 342 с.
167. Галяирова, Н.М. Диэлектрическая спектроскопия сегнетоэлектриков, фрактальность и механизмы движения доменных и межфазных границ:

- дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07 / Н.М. Галиярова. – Воронеж, 2006. – 399 с.
168. Лайнс, М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / М. Лайнс, А. Гласс. – М.: Мир, 1981. – 736 с.
169. Whatmore, R. Ferroelectric Materials/ R. Whatmore // Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 2007. – P. 597 – 623.
170. Ham, I. Ferroelectric polarization aided low voltage operation of 3D NAND flash memories / I. Ham, Y. Jeong, S.J. Baik, M. Kang // Electronics, 2021. – V. 10. – No. 1. – P. 1 – 6.
171. Cui, C. Two-dimensional materials with piezoelectric and ferroelectric functionalities / C. Cui, F. Xue, W.-J. Hu, L.-J. Li // Materials and Applications, 2018. – V. 2. – No. 18. – P. 1 – 15.
172. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд / под ред. К.М. Рабе, Ч.Г. Анна, Ж.-М. Трискона; пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 440 с.
173. Смоленский, Г.А. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. – М: Наука, 1971. – 465 с.
174. Ishibashi, Y. Note on ferroelectric domain switching / Y. Ishibashi, Y. Takagi // J. Phys. Soc. Jpn., 1971. – V. 31. – No. 2. – P. 506 – 510.
175. Шур, В.Я. Кинетика доменной структуры и токи переключения в монокристаллах конгруэнтного и стехиометрического танталата лития / В.Я. Шур, Е.В. Николаева, Е.И. Шишкин, В.Л.Кожевников, А.П. Черных // Физика твердого тела, 2002. – Т. 44. – Вып. 11. – С. 2055 – 2060.
176. Scott, J.F. Switching kinetics of lead zirconate titanate submicron thin-film memories / J.F. Scott, L. Kammerdiner, M. Parris, S. Traynor, V. Ottenbacher, A. Sha-Wabkeh, W.F. Oliver // J. Appl. Phys., 1998. – V. 64. – No. 2. – P. 787 – 792.
177. Барабаш, Т.К. Фрактальные закономерности и модельные представления процессов переключения поляризации сегнетоэлектриков при диагностике методами растровой электронной микроскопии / Т.К. Барабаш, А.Г. Масловская – Благовещенск: Изд-во Амур. гос. ун-та, 2016. – 149 с.

178. Song, T.K. Landau–Khalatnikov simulations for ferroelectric switching in ferroelectric random access memory application / T.K. Song // *J. Korean Phys. Soc.*, 2005. – V. 46. – No. 1. – P. 5 – 9.
179. Hong, J. Size-dependent ferroelectric behaviors of BaTiO₃ nanowires / J. Hong, D. Fanga // *Appl Phys Lett.*, 2008. – V. 92. – P. 012906.
180. Morozovska, A.N. Modelling of pyroelectric response in inhomogeneous ferroelectric-semiconductor films / A.N. Morozovska, E.A. Eliseev, D. Remiens, C. Soyer // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2006. – V. 9. – No. 1. – P. 14 – 21.
181. Diouf, A.A. How to model an Ising ferroelectric system: case of the investigation of the dielectrics properties of a nano-octahedral ferroelectric system / A.A. Diouf, B. Lo, A.N. Dione, C.B. Ndao, A. Chedikh // *Communications*, 2017. – V. 5 (5). – P. 51 – 57.
182. Grunebohm, A. Optimizing the magnetocaloric effect in Ni-Mn-Sn by substitution: A first-principles study / A. Grunebohm, D. Comtesse, A. Maslovskaya, P. Entel // *IEEE Transactions on Magnetics*, 2014. – V. 5(11). – P. 6971662 – 6971668.
183. Нефедев, К.В. Коллективные явления в магнитных наносистемах: дис.... д-ра. физ.-мат. наук: 01.04.02 / К.В. Нефедев. – Владивосток, 2013. – 113 с.
184. Fatuzzo, E. Theoretical considerations on the switching transient in ferroelectrics / E. Fatuzzo // *Physical Review*, 1962. – V. 127. – P. 1999 – 2005.
185. Orihara, H. A theory of D-E hysteresis loop based on the Avrami model / H. Orihara, S. Hashimoto, Y. Ishibashi // *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1994. – V. 63. – P. 1031 – 1035.
186. Tagantsev, A.K. Non-Kolmogorov-Avrami switching kinetics in ferroelectric thin films / A. K. Tagantsev, I. Stolichnov, N. Setter, J. S. Cross, M. Tsukada // *Phys. Rev.*, 2002. – V. 66. – P. 214109.
187. Shur, V.Ya. Kinetics of polarization reversal in normal and relaxor ferroelectrics: relaxation effects / V.Ya. Shur // *Phase Transitions*, 1998. – V. 65. – P. 49

– 72.

188. Maslovskaya, A.G. Analysis of polarization switching in ferroelectric crystals in the injection mode / A.G. Maslovskaya, I.B. Kopylova // J. Exp. Theor. Phys., 2009. – V. 109. – P. 90 – 94.

189. Roy, M.K. Domain dynamics and fractal growth analysis in thin ferroelectric films / M.K. Roy, J. Paul, S. Dattagupta // IEEE Xplore, 2010. – V. 109. – P. 014108(4).

190. Aravind, V.R. Correlated polarization switching in the proximity of a 180° domain wall / V.R. Aravind, A.N. Morozovska, S. Bhattacharyya and et al. // Physical review, 2010. – V. 82. – P. 024111.

191. Roy, M.K. Dynamics of ferroelectric domains: PhD thesis / M.K. Roy. – India: West Bengal University of Tehcnology, 2013 – 80 p.

192. Hlinka, J. Mobility of ferroelastic domain walls in barium titanate / J. Hlinka // Ferroelectrics, 2007. – V. 349. – No. 1. – P. 49 – 54.

193. Zhou, Z. D. Domain structures of ferroelectric films under different electrical boundary conditions / Z. D. Zhou, D. Y. Wu // AIP Advances, 2015. – V. 5. – P. 107206.

194. Uchino, K. Fractal phenomena in ferroelectrics / K. Uchino// Journal of Nanotechnology and Materials Science, 2014. – V. 1. – P. 12 – 26.

195. Ozaki, T. Fractal aspects of lamellar ferroelectric domain structures formed under the influence of depolarization fields in CsH_2PO_4 and $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3\text{H}_2\text{SO}_4$ / T. Ozaki, K. Fujii, J. Ohgami // Journal of the physical Society of Japan, 1995. – V. 64. – No. 7. – P. 2282 – 2285.

196. Пелегов, Д.В. Использование фрактального формализма для описания кинетики фазовых превращений в конечных системах: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Д.В. Пелегов. – Екатеринбург, 2000. – 133 с.

197. Galiyarova, N.M. Fractal dimensionalities and microstructural parameters of piezoceramics PZTNB-1 / N.M. Galiyarova, A.B. Bey, E.A. Kuznetsov, Y.I. Korchmariyuk // Ferroelectrics, 2004. – V. 307. – P. 205 – 211.

198. Li, X. Computer simulation of fatigue in ferroelectric thin films by a

modified diffusion limited aggregation model with drift / X. Li, J. Liu, D. Lu, J. Zhao, L. Huang, J. Xuan // *Jpn. Appl. Phys.*, 1995. – V. 34. – P. L51 – L53.

199. Wu, Z. Self-organization nanodomain structure in ferroelectric ultrathin films / Z. Wu, W. Duan, J. Wu, B-L. Gu // *Nanotechnology*, 2007. – V. 18. – P. 325703 – 325707.

200. Kim, S. Time-resolved fractal dimension analysis in ferroelectric copolymer thin films using R-based image processing / S. Kim, K.-W. Park, H. Woo, J. Hong // *Material Letters*, 2018. – V. 230. – P. 195 – 198.

201. Mitic, V.V. The nano-scale modified BaTiO₃ morphology influence on electronic properties and ceramics fractal nature frontiers / V.V. Mitic, G. Lazovic, C.-A. Lu, V. Paunovic, I. Radovic, A. Stajcic, B. Vlahovic // *Appl. Sci.* 2020. – V.10. – P. 3485 (14).

202. Casals, B. Avalanche criticality during ferroelectric ferroelastic switching / B. Casals, G.F. Nataf, E.K. Salje // *Nat. Commun.*, 2021. – V.12. – P. 345.

203. Jeng, Y-R. Nanomeasurement and fractal analysis of PZT ferroelectric thin films by atomic force microscopy / Y-R. Jeng, P-C. Tsai, T-H Fang // *Microelectronic Engineering*, 2003. – V. 65. – P. 406 – 415.

204. Catalan, G. Fractal dimension and size scaling of domains in thin films of multiferroic BiFeO₃ / G. Catalan, H. Béa, S. Fusil, M. Bibes, P. Paruch, A. Barthélémy, J.F. Scott // *Phys. Rev. Lett.*, 2008. – V. 100. – P. 027602.

205. Titov, V.V. Evolution of fractal grain structures in NaNbO₃-Ca₂Nb₂O₇ and NaNbO₃-Sr₂Nb₂O₇ systems / V.V. Titov, V.V. Akhnazarova, L.A. Reznitchenko, S.V. Titov, V.D. Komarov // *Ferroelectrics*, 2004. – V. 298. – P. 335 – 339.

206. Maslovskaya, A.G. Fractal model of polarization switching kinetics in ferroelectrics under nonequilibrium conditions of electron irradiation / A.G. Maslovskaya, T.K. Barabash // *Proc. of IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*, 2018. – V. 973. – P. 012038 (11).

207. Масловская, А.Г. Алгоритмы мультифрактального вейвлет-анализа в задачах спецификации растровых изображений самоподобных структур / А.Г. Масловская, Л.С. Афанасов // *Вестник Томского государственного университе-*

та. Управление, вычислительная техника и информатика, 2020. – Т. 53. – С. 61 – 70.

208. Tsukada, S. Relation between fractal inhomogeneity and In/Nb-arrangement in $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ / S. Tsukada, K. Ohwada, H. Ohwa, S. Mori, S. Kojima, N. Yasuda, H. Terauch, Y. Akishige // *Scientific Reports*, 2017. – V. 7. – P. 17508 (8).

209. Koreeda, A. Fractal dynamics in a single crystal of a relaxor ferroelectric / A. Koreeda, H. Taniguchi, S. Saikan, M. Itoh // *Physical review letters*, 2012. – V. 109. – P. 197601.

210. Tadic, B. Switching current noise and relaxation of ferroelectric domains / B. Tadic // *Eur. Phys. J. B.*, 2002. – V. 28. – P. 81 – 89.

211. Масловская, А.Г. Исследование фрактальных закономерностей процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме / А.Г. Масловская, Т.К. Барабаш // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2012. – № 1. – С. 42 – 49.

212. Maslovskaya, A. Fractal parameterization analysis of ferroelectric domain structure evolution induced by electron beam irradiation / A. Maslovskaya, T. Barabash // *In: Proc. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2017. – V. 168. – P. 012028 (6).

213. Shur, V.Ya. Formation of self-similar surface nano-domain structures in lithium niobate under highly nonequilibrium conditions / V.Ya. Shur, D.K. Kuznetsov, A.I. Lobov, E.V. Nikolaeva, M.A. Dolbilov, A.N. Orlov, V.V. Osipov // *Ferroelectrics*, 2006. – V. 341. – P. 85 – 93.

214. Bohannan, G.W. Application of fractional calculus to polarization dynamics in solid dielectric materials: dis....PhD of physic. – Montana State University, 2020. – 203 p.

215. Мейланов, Р.П. Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках / Р.П. Мейланов, С.А. Садыков // *Журнал технической физики*, 1999. – Т. 69. – № 5. – С. 128 – 129.

216. Садыков, С.А. Процессы переключения поляризации в сегнетоэлек-

триках в самосогласованном электрическом поле: автореф. дис..... д-ра физ.-мат. наук / С.А. Садыков. – Махачкала, 2001. – 20 с.

217. Масловская, А.Г. Исследование процесса переполяризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме / А.Г. Масловская, И.Б. Копылова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т. 136. – №. 1. – С. 105 – 109.

218. Maslovskaya, A.G. Dynamic simulation of polarization reversal processes in ferroelectric crystals under electron beam irradiation / A.G. Maslovskaya, T.K. Barabash // *Ferroelectrics*, 2013. – V. 442. – P. 18 – 26.

219. Guyomar, D. Time fractional derivatives for voltage creep in ferroelectric materials: theory and experiment / D. Guyomar, B. Ducharne, G. Sébald // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2008. – V. 41. – P. 125410.

220. Ducharne, B. Time fractional derivative for frequency effect in ferroelectrics / B. Ducharne, G. Sebald, D. Guyomar // 18th IEEE International Symposium on the Applications of Ferroelectrics, Xian., 2009. – P. 1 – 4.

221. Ducharne, B. Unique fractional derivative operator to simulate all dynamic piezoceramic dielectric manifestations: from aging to frequency-dependent hysteresis / B. Ducharne, B. Newell, G. Sebald // *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 2020. – V. 67. – No. 1. – P. 197 – 206.

222. Zhang, B. Model for coupled ferroelectric hysteresis using time fractional operators: Application to innovative energy harvesting: diss....doctor of science / B. Zhang. – Lyon, 2014. – 95 p.

223. Согр, А.А. Исследование кинетики накопления и релаксации инжектированных зарядов в кристаллах ТГС / А.А. Согр, И.Б. Копылова // *Изв. РАН. Сер. физич.*, 2000. – Т. 64. – № 6. – С. 1199 – 1202.

224. Коханчик, Л.С. Формирование регулярных доменных структур и особенности переключения спонтанной поляризации в кристаллах танталата лития при дискретном облучении электронами / Л.С. Коханчик, Д.В. Иржак // *ФТТ*, 2010. – Т. 52. – № 2. – С. 285 – 289.

225. Li, D.B. Polarization reorientation in ferroelectric lead zirconatetitanate

thin films with electron beams / D.B. Li, J.H. Ferris, R. Strachan Douglas, A. Bonnell Dawn // J. Mater. Res., 2006. – V. 21. – P. 935 – 941.

226. Molina, P. Effect of electron beam writing parameters for ferroelectric domain structuring $\text{LiNbO}_3:\text{Nd}^{3+}$ / P. Molina, M.O. Ramírez, J. García-Sole, L.E. Bausá // Optical Materials, 2009. – V. 31. – P. 1777 – 1780.

227. Масловская, А.Г. Взаимодействие электронных пучков средних энергий с сегнетоэлектрическими материалами / А.Г. Масловская, И.Б. Копылова – Владивосток: изд-во Дальнаука, 2010. – 204 с.

228. Delbosco, D. Existence and uniqueness for a nonlinear fractional differential equation / D. Delbosco, L. Rodino // Journal of Mathematical Analysis and Applications, 1996. – V. 204. – No. 2. – P. 609 – 625.

229. Derbazi, C. Initial value problem for nonlinear fractional differential equations with ψ -Caputo derivative via monotone iterative technique / C. Derbazi, Z. Baitiche, M. Benchohra, A. Cabada // Axioms, 2020. – V. 9(2). – No. 57. – P. 1 – 10.

230. Mahto, L. Existence and uniqueness of solution of Caputo fractional differential equations / L. Mahto, S. Abbas // AIP Conference Proceedings, 2012. – V. 1479. – P. 896 – 899.

231. Рудяк, В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах / В.М. Рудяк. – М.: Наука, 1986. – 248 с.

232. Шур, В.Я. Скачки Баркгаузена при движении одиночной сегнетоэлектрической доменной стенки / В.Я. Шур, В.Л. Кожевников, Д.В. Пелегов, Е.В. Николаева, Е.И. Шишкин // Физика твердого тела, 2001. – Т. 43. – Вып. 6. – С. 1089 – 1092.

233. Масловская, А.Г. Моделирование диффузионных систем с запаздыванием в приложении к задаче оценки температурного нагрева материалов при электронном облучении / А.Г. Масловская, Л.И. Мороз // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сб. трудов Межд. науч. конф. – Воронеж: Изд-во «Научно-исследовательские публикации», 2019. – С. 852 – 859.

234. Maslovskaya, A.G. Mathematical modeling diffusion systems with delay

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

235. Trybus, M. Dynamic response of TGS ferroelectric samples in paraelectric phase/ M. Trybus, B. Wos // Infrared Phys. Technol., 2015. – V. 71. – P. 526 – 532.

236. Hadni, A. Laser study and applications to pyroelectric detectors / A. Hadni, R. Thomas // Ferroelectrics, 1972. – V. 49. – P. 39 – 49.

237. Lal, R.B. Growth and properties of triglycine (TGS) sulfate crystals / R.B. Lal, A.K. Batra // Ferroelectrics, 1993. – V. 142. – P. 51 – 82.

238. Bogomolov, A.A. Effects of temperature gradient on the surface domain structure in DTGS crystals / A.A. Bogomolov, O.V. Malyshkina, A.V. Solnyshkin // Ferroelectrics, 1997. – V. 191. – P. 313 – 317.

239. Strukov, B.A. Logarithmic singularity in the specific heat in the vicinity of phase transitions in uniaxial ferroelectrics / B.A. Strukov, E.P. Ragula, S.V. Arkhangel'skaya, I.V. Shnidshtein // Physics of the Solid State, 1998. – V. 40. – P. 94 – 95.

240. Malyshkina, O.V. Use of the thermal square wave method to analyze polarization state in ferroelectric materials / O.V. Malyshkina, A.A. Movchikova, R.M. Grechishkin, O.N. Kalugina // Ferroelectrics, 2010. – V. 400. – P. 63 – 75.

241. Kushnarev, P.I. Polar properties of nominally pure polarized TGS crystals / P.I. Kushnarev, A.G. Maslovskaya, S.V. Baryshnikov // Russian Physics Journal, 2011. – V. 54. – P. 86 – 91.

242. Grechishkin, R.M. Effect of domain structure realignment on the pyroelectric current temperature dependence in gadolinium molybdate crystals / R.M. Grechishkin, O.V. Malyshkina, N.B. Prokofieva, S.S. Soshin // Ferroelectrics, 2001. – V. 251. – P. 207 – 212.

243. Zhou, Y. Basic Theory of Fractional Differential Equations / Y. Zhou. – Singapore: World Scientific, 2014. – 304 p.

244. Струков, Б.А. О логарифмической сингулярности теплоемкости в

близки фазовых переходов в одноосных сегнетоэлектриках / Б.А. Струков, Е.П. Рагула, С.В. Архангельская, И.В. Шнайдшейн // Физика твердого тела, 1998. – Т. 40. – № 1. – С. 106 – 108.

245. Whatmore, R. Ferroelectric materials / R. Whatmore// Electronic and photonic materials, 2017. – P. 589 – 614.

246. Keve, E.T. Pyroelectric materials based on triglycinesulphate (TGS) for infrared detection / E.T. Keve // Philips tech. Rev., 1975. – V. 35. – P. 247 – 257.

247. Aggarwal, M.D. Pyroelectric materials for uncooled infrared detectors: processing, properties and applications / M.D. Aggarwal, A.K. Batra, P. Guggilla, M.E. Edwards, B.G. Penn, J.R. Currie. – Alabama: Marshall Space Flight Center MSFC, 2010. – 92 p.

248. Aleksandrov, S.E. Relaxer ferroelectrics as promising materials for IR detectors / S.E. Aleksandrov, G.A. Gavrilov, A.A. Kapralov, E.P. Smirnova, G.Yu. Sotnikova, A.V. Sotnikov // Technical Physics., 2004. – V. 49. – P. 1176 – 1180.

249. Blinc, R. Soft modes in ferroelectrics and antiferroelectrics / R. Blinc, B. Zeks. – Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1974. – 317 p.

250. Gonzalo, J.A. Effective field approach to phase transitions and some applications to ferroelectrics / J.A. Gonzalo. – Singapore: World Scientific Press, 2006. – 236 p.

251. Cui, L. The hysteresis loops of a ferroelectric bi layer film with surface transition layers / L. Cui, T.Q. Lü, P.-N. Sun, H.J. Xue // Chin. Phys. B, 2010. – V. 19. – No. (7). – P. 077701.

252. Omura, M. Simulations of ferroelectric characteristics using a one-dimensional lattice model / M. Omura, H. Adachi, Y. Ishibashi // Jpn. J. Appl. Phys., 1991. – V. 30. – P. 2384 – 2387.

253. Hu, H.L. Three-dimensional computer simulation of ferroelectric domain formation / H.L. Hu, L. Chen // J. Amer. Cer. Soc., 1998. – V. 81. – No. 3. – P. 492 – 500.

254. Xi, L.Y. Three-dimensional phase field simulations of hysteresis and

butterfly loops by the finite volume method / L.Y. Xi, H.M. Chen, F. Zheng, H. Gao, Y. Tong, Z. Ma // *Chin. Phys. Lett.*, 2015. – V. 32. – No. 9. – P. 097701.

255. Narita, F. Evaluation of dielectric and piezoelectric behavior of un poled and poled barium titanate polycrystals with oxygen vacancies using phase field method / F. Narita, T. Kobayashi, Y. Shindo // *Int. J. Smart. Nano. Mat.*, 2016. – V. 7. – No. 4. – P. 265 – 275.

256. Wang, C.L. Switching characters of asymmetric ferroelectric films / C.L. Wang, L. Zhang, W.L. Zhong, P.L. Zhang // *Phys. Lett. A*, 1999. – V. 254. – P. 297 – 300.

257. Ouyang, K. Simulation on the hysteresis of ferroelectric thin films / K. Ouyang, T.-L. Ren, L.-T. Liu, D. Wei // *Integrated Ferroelectrics*, 2004. – V. 64. – No. 1. – P. 69 – 75.

258. Song, T.K. Landau–Khalatnikov simulations for the effects of external stress on the ferroelectric properties of $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ thin films / T.K. Song, J.S. Kim, M.H. Kim, W. Lim, Y.S. Kim, J.C. Lee // *Thin Solid Films*, 2003. – V. 424. – P. 84 – 87.

259. Starkov, A.S. Effect of thermal phenomena on a second-order phase transition in the Landau – Ginzburg model / A.S. Starkov, O.V. Pakhomov, I.A. Starkov // *J. Exper. Theor. Phys. Lett.*, 2010. – V. 91. – No. 10. – P. 507 – 511.

260. Dattagupta, S. Pattern formation in non-linear reaction-diffusion systems / S. Dattagupta, M.K. Roy // *Indian Acad. Sci. Conf. Ser.*, 2019. – V. 2. – No. 1. – P. 55 – 58.

261. Cui, L. Study on the dynamic critical behavior of a ferroelectric heterostructure / L. Cui, C. Chen, Y. Xiang // *Phys. Lett. A*, 2019. – V. 383. – No. 24. – P. 2963 – 2968.

262. Ducharme, S. Intrinsic ferroelectric coercive field / S. Ducharme, V.M. Fridkin, A.V. Bune, S.P. Palto, L.M. Blinov, N.N. Petukhova, S.G. Yudin // *Phys. Rev. Lett.*, 2000. – V. 84. – No. 1. – P. 175 – 178.

263. Chen, S. On the Cauchy problem of the Ginzburg-Landau equations for atomic Fermi gases near the BCS-BEC crossover / S. Chen, B. Guo // *J. Partial Dif-*

fer. Equ., 2009. – V. 22. – No. 3. – P. 218 – 233.

264. Fang, S. Global attractor for the initial-boundary value problems for Ginzburg – Landau equations for atomic Fermi gases near the BCS-BEC crossover / S. Fang, L. Jin, B. Guo // *Nonlinear Anal.*, 2010. – V. 72. – P. 4063 – 4070.

265. Doering, C.R. Weak and strong solutions of the complex Ginzburg – Landau equation / C.R. Doering, J.D. Gibbon, C.D. Levermore // *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1994. – V. 71. – No. 3. – P. 285 – 318.

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

267. Weitzner, H. Some applications of fractional derivatives / H. Weitzner, G.M. Zaslavsky // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2003. – V. 8. – P. 273 – 281.

268. Tarasov, V.E. Fractional Ginzburg – Landau equation for fractal media / V.E. Tarasov, G.M. Zaslavsky // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2005. – V. 354. – P. 249 – 261.

269. Li, L. Large time behavior for the fractional Ginzburg – Landau equations near the BCS-BEC crossover regime of Fermi gases / L. Li, L. Jin, S. Fang // *Boundary Value Problems*, 2017. – V. 8. – No. 16. – P. 1 – 16.

270. Ворошилов, А.А. Задача типа Коши для диффузионно-волнового уравнения с частной производной Римана – Лиувилля / А.А. Ворошилов, А.А. Килбас // *Докл. РАН*, 2006. – Т. 406. – № 1. – С. 12-16.

271. Кочубей, А.Н. Задача Коши для уравнения дробного порядка / А.Н. Кочубей // *Дифференциальные уравнения*, 1989. – Т. 25. – № 8. – P. 1359 – 1368.

272. Псху, А.В. Решение краевых задач для уравнения диффузии дробного порядка методом функции Грина / А.В. Псху // *Дифференциальные уравнения*, 2003. – Т. 39. – № 10. – С. 1430 – 1433.

273. Псху, А.В. Решение первой краевой задачи для уравнения диффу-

зии дробного порядка / А.В. Псху // Дифференциальные уравнения, 2003. – Т. 39. – № 9. – С. 1286 – 1289.

274. Gekkieva, S.Kh. A boundary value problem for the generalized transfer equation with a fractional derivative in a semi-infinite domain / S.Kh. Gekkieva // Izv. KBNTs RAN, 2002. – V. 1. – P. 6 – 8.

275. Zhu, B. Existence and uniqueness of global mild solutions for a class of nonlinear fractional reaction–diffusion equations with delay / B. Zhu, L. Liu, Y. Wu // Computers & Mathematics with Applications, 2019. – V. 78. – No. 6. – P. 1811 – 1818.

276. Tayyaba, A. Novel numerical approach based on modified extended cubic B-spline functions for solving non-linear time-fractional telegraph equation / A. Tayyaba, A. Muhammad, I. Azhar, B. Dumitru; A. Jihad // Symmetry, 2020. – V. 12. – No. 7. – P. 1 – 20.

277. Ding, Q. Quintic non-polynomial spline for time-fractional nonlinear Schrödinger equation / Q Ding, P. Wong // Adv. Differ. Equ., 2020. – V.1 . – P. 577 – 582.

278. Joy, D.C. Monte-Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis / D.C. Joy – New York: Oxford University Press., 1995. – 216 p.

279. Соболев, И.М. Метод Монте-Карло / И.М. Соболев – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1985. – 80 с.

280. Fitting, H.-J. Secondary electron emission and self-consistent charge transport in semi-insulating samples / H.-J. Fitting, M. Touzin // J. Appl. Phys., 2011. – V. 110 (4). – P. 044111 (12).

281. Lu, S. Fourier spectral approximation to long-time behavior of the derivative three-dimensional Ginzburg – Landau equation / S. Lu, Q. Lu, E.H. Twizell // J. Comp. Appl. Math., 2007. – V. 198. – No. 1. – P. 167 – 186.

282. Paasonen, V.I. Three-level non-iterative high accuracy scheme for Ginzburg – Landau equation / V.I. Paasonen, M.P. Fedoruk // Comp.Techn., 2015. – V. 20. – No. 3. – P. 46 – 57.

283. Xie, S. Compact finite difference schemes with high accuracy for one

dimensional nonlinear Schrödinger equation / S. Xie, G. Li, S. Yi // *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 2009. – V.198. – P.1052 – 1060.

284. Wu, L. A high-order compact (HOC) implicit difference scheme and amultigrid method for solving 3D unsteady reaction diffusion equations / L. Wu, X. Feng // *Mathematics*, 2019. – V.7. – No.12. – P. 1208 – 1229.

285. Dimitrov, Y. Approximations for the Caputo Derivative (I) / Y. Dimitrov // *Mathematics*, 2016. – P.1 – 39.

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

287. Мороз, Л.И. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665096 «Программа численного моделирования процесса теплопроводности эредитарных сред в нелинейных режимах» / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 19.11.2019, г. Москва.

288. Мороз, Л.И. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021613089 «Программа расчета характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции дробно-дифференциального термодинамического подхода» / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам, 02.03.2021, г. Москва.

289. Масловская, А.Г. Моделирование взаимодействия электронных пучков с полярными диэлектриками: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / А.Г. Масловская. – Благовещенск, 2004. – 174 с.

290. Hlinka, J. Phenomenological model of 90° domain wall in BaTiO₃-type ferroelectrics / J. Hlinka, P. Marton // *Phys. Rev. B*, 2006. – V. 74. – P. 104104.

291. Narita F. Evaluation of dielectric and piezoelectric behavior of unpoled

and poled barium titanate polycrystals with oxygen vacancies using phase field method / F. Narita, T. Kobayashi, Ya. Shindo // *International Journal of Smart and Nano Materials*, 2016. – V. 7(4). – P. 265 – 275.

292. Nakamura, K. *Ultrasonic transducers: Materials and design for sensors, actuators and medical applications* / K. Nakamura. – Woodhead Publ. Ltd.; 2012. – 722 p.

293. Moulson A. *Electroceramics. Materials, properties, applications.* / A. Moulson, J.M. Herbert. – Chapman & Hall, London; 1990. – 464 p.

294. Glazkova, E. Tailoring properties of ferroelectric ultrathin films by partial charge compensation / E. Glazkova, K. McCash, C.-M. Chang, B. Mani, I. Ponomareva // *Appl. Phys. Lett.*, 2014. – V. 104. – P. 012909.

295. Su, Y. Effects of surface tension on the size-dependent ferroelectric characteristics of free-standing BaTiO₃ nano-thin films / Y. Su, H. Chen, J. Li, A.K. Soh, G.J. Weng // *J. Appl. Phys.*, 2011. – V. 110. – P. 084108.

296. Schultheiß, J.E. *Polarization reversal dynamics in polycrystalline ferroelectric / ferroelastic ceramic materials: dis. ... PhD* / J.E. Schultheiß. – Darmstadt, 2018. – 128 c.

297. Maslovskaya, A.G. Advanced modes of imaging of ferroelectric domains in the SEM / A.G. Maslovskaya, A.A. Sogr, I.B. Kopylova // *Ferroelectrics*, 2006. – V. 341. – P. 29 – 37.

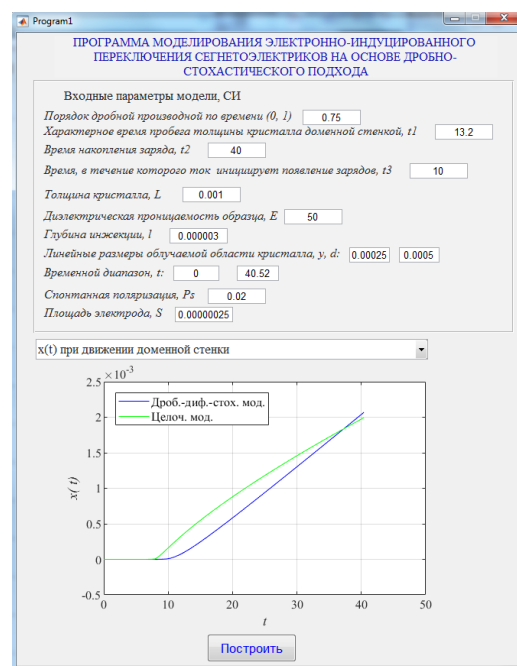
ПРИЛОЖЕНИЕ А

Копии свидетельств об официальных регистрациях программ для ЭВМ

Копия свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ «Программа моделирования электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе фрактально-стохастического подхода» и главное окно пользовательского интерфейса программы представлены на рисунке А.1.



а



б

Рисунок А.1 – Копия свидетельства (а) и общий вид интерфейса (б) программы моделирования электронно-индуцированного переключения сегнетоэлектриков на основе дробно-стохастического подхода.

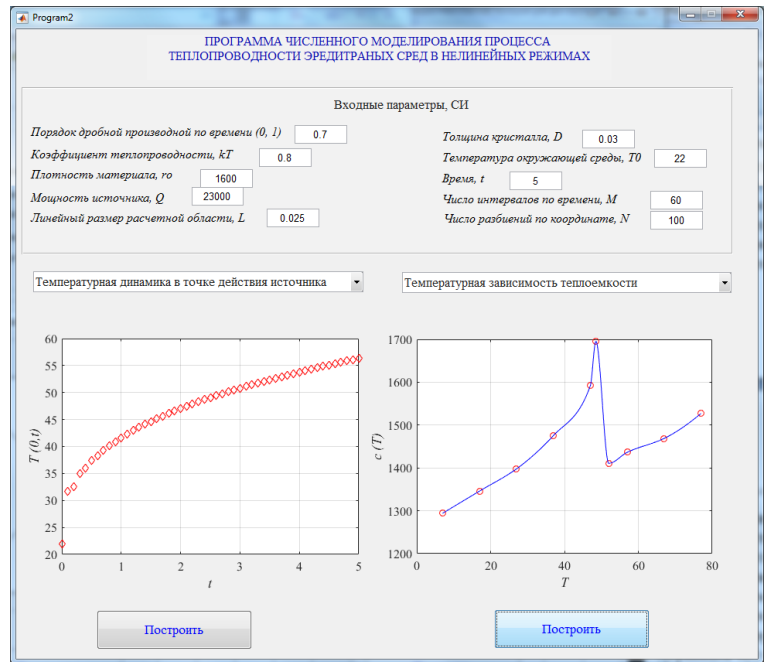
Аннотация программы. Программа предназначена для прогнозирования отклика сегнетоэлектриков при диагностике и модификации методами растровой электронной микроскопии. В основе программной реализации модели переключения сегнетоэлектриков в режиме инжекции электронов лежит схема «предиктор-корректор» для численного решения дробно-дифференциального уравнения, описывающего процесс динамики доменной границы. Симуляция процесса зародышеобразования при перестройке

доменной структуры сегнетоэлектрика проведена с помощью метода Монте-Карло.

Копия свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ «Программа численного моделирования процесса теплопроводности эрдитарных сред в нелинейных режимах» и главное окно пользовательского интерфейса программы приведены на рисунке А.2.



а



б

Рисунок А.2 – Копия свидетельства (а) и общий вид интерфейса (б) программы моделирования процесса теплопроводности в сегнетоэлектриках.

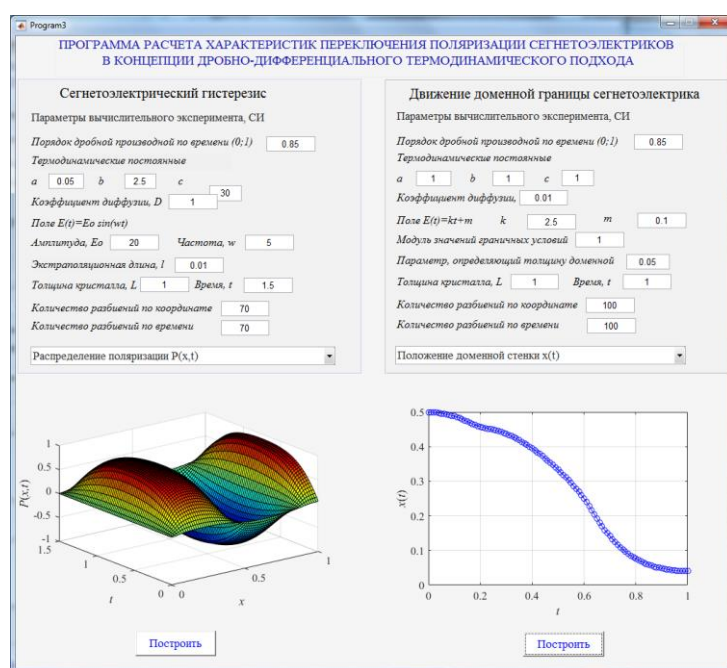
Аннотация Программа предназначена для компьютерного моделирования распределения температурных полей в материалах, характеризующихся присутствием эффекта памяти. Вычислительный алгоритм решения задачи теплопроводности построен на основе аналога конечно-разностной схемы Кранка – Николсон с использованием формулы Грюнвальда – Летникова для аппроксимации производной дробного порядка по времени. Параметры моделирования инициализированы для проведения вычислительного эксперимента по оценке температурного нагрева типичного сегнетоэлектрика с

учетом нелинейных зависимостей теплофизических характеристик кристалла от температуры.

Копия свидетельства об официальной регистрации программы для ЭВМ «Программа расчёта характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков в концепции дробно-дифференциального термодинамического подхода» и главное окно пользовательского интерфейса программы показаны на рисунке А.3.



а



б

Рисунок А.3 – Копия свидетельства (а) и общий вид интерфейса (б) программы расчета характеристик переключения поляризации сегнетоэлектриков.

Аннотация. Программа предназначена для компьютерного моделирования поляризационных характеристик сегнетоэлектриков как фрактальных физических сред с памятью. В основе алгоритма лежит дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова. Вычислительная схема решения нелинейного уравнения аномальной реакции-диффузии построена как неявная итерационная конечно-разностная схема с учетом аппроксимации производной дробного порядка по времени.