

ГИБРИДНЫЙ ФРАКТАЛЬНО-СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ КИНЕТИКИ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ В РЕЖИМЕ ИНЖЕКЦИИ

© 2019 г. *Л.И. Мороз, А.Г. Масловская*

Амурский государственный университет

maslovskayaag@mail.ru

Работа выполнена в рамках реализации государственного задания
Министерства науки и высшего образования РФ (проект 1.13421.2019/13.2)

DOI: 10.1134/S0234087919090077

Работа посвящена разработке и реализации гибридного фрактально-стохастического подхода к математическому моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков как самоподобных физических систем с памятью. Математическая модель фрактальной динамической системы включает начальную задачу для дифференциального уравнения дробного порядка. Вычислительные алгоритмы решения дробно-дифференциальной задачи построены с использованием предиктор-корректорных схем в концепции метода Адамса – Башфорта – Моултона. На основе метода Монте-Карло предложен стохастический алгоритм симуляции процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика. Описаны результаты вычислительных экспериментов по оценке тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в сравнении с данными эксперимента в режиме инжекции.

Ключевые слова: фрактальная модель, переключение сегнетоэлектрика, дробно-дифференциальное уравнение, метод Монте-Карло, метод «предиктор-корректор».

HYBRID STOCHASTIC FRACTAL-BASED APPROACH TO MODELLING FERROELECTRICS SWITCHING KINETICS IN INJECTION MODE

L.I. Moroz, A.G. Maslovskaya

Amur State University

The paper is devoted to development and implementation of hybrid stochastic fractal-based approach to mathematical modeling electron-induced kinetics of ferroelectrics polarization switching as the self-similar memory physical systems. The mathematical model of fractal dynamic system includes an initial value problem for the fractional order

differential equation. Computational schemes for solving fractional differential problem were constructed using Adams – Bashforth – Moulton type predictor-corrector methods. The stochastic algorithm based on Monte-Carlo method was proposed to simulate the domain nucleation process during restructuring domain structure in ferroelectrics. The ferroelectrics polarization switching current in electron injection mode was evaluated to demonstrate computational experiment results with comparison of experimental data.

Keywords: fractal model, ferroelectric switching, Monte-Carlo method, fractional-order differential equation, “predictor-corrector” method.

1. Введение

В последнее время применение методов математического моделирования и разработка алгоритмов для их программной реализации являются неотъемлемыми и перспективными составляющими при решении научных и инженерных задач, связанных с обоснованием механизмов формирования отклика и прогнозированием поведения сложных физических систем. Пристальное внимание многих современных исследователей уделяется изучению процессов и явлений, обладающих фрактальными свойствами.

Одним из основных направлений использования концепций фрактального формализма является апостериорный анализ размерности физических систем. 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 актуальны 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.) [1-3].

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, состоит в использовании концепций дробно-дифференциального исчисления [4-7], в частности, аппарата дробно-дифференциальных уравнений для моделирования протекающих процессов. 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 аналитическое решение дробно-дифференциальных задач можно найти в ограниченном ряде случаев, особое место в практике математического моделирования занимают численные методы [8-12].

В данной работе область приложения результатов моделирования фрактальной системы ориентирована на описание процесса переключения поляризации сегнетоэлектриков. Сегнетоэлектрики – перспективный класс полярных диэлектриков, для которых исследование неравновесной динамики, фазовых переходов и кинетики доменов имеет ключевое значение в связи с востребованностью этих материалов в радиотехнике, акустике, оптоэлектронике, пиро- и пьезотехнике, в вычислительной технике. Поскольку процесс переключения поляризации представляет собой результат образования самоподобных структур, то доменные конфигурации многих сегнетоэлектриков характеризуются самоподобным строением, а электрические отклики – фрактальными закономерностями [13-19]. Проявление свойств фрактальности обусловлено сложными механизмами движения доменных границ, свойствами анизотропии реальных кристаллов, стохастическим характером процесса зародышеобразования, присутствием эффектов памяти.

Фрактальный подход к описанию процесса перестройки доменов при переключении сегнетоэлектрика и формированию поляризационного тока развит в работах авторов [17, 18]. В частности, была предложена фрактальная модель, основанная на аналитической аппроксимации тока переключения с помощью производной дробного порядка [18]. Однако представленные подходы неприменимы к моделированию процесса переключения сегнетоэлектрика в режиме инъекции. Модель аппроксимационного типа не учитывала специфику динамики доменной структуры и управляющие физические параметры.

В серии авторских работ была предложена математическая модель процесса переключения поляризации сегнетоэлектрика в условиях электронного облучения, а позже сформулирован ее фрактальный аналог [19]. Настоящая работа направлена на развитие этой модели на основе применения эффективных вычислительных схем и модификации подхода к симуляции процесса зародышеобразования. Основной целью является разработка математического и программного обеспечения для моделирования и прогнозирования фазового состояния динамических фрактальных физических систем с памятью на примере кинетики переключения сегнетоэлектриков в условиях электронного облучения.

2. Концептуальная постановка задачи моделирования

В качестве объекта математического моделирования будем рассматривать процесс переключения поляризации одноосного сегнетоэлектрика и формирование поляризационного тока при диагностике методом растровой электронной микроскопии [20]. При облучении пучок электронов проникает в образец на глубину l и вызывает накопление зарядов. Это приводит к возникновению электрических полей: \mathbf{E}_1 – в облученном слое и \mathbf{E}_2 – в основном объеме материала. Поле \mathbf{E}_2 способно инициировать переключение доменов, ориентированных противоположно, и стабилизировать домены с сонаправленной ориентацией вектора спонтанной поляризации \mathbf{P}_S . Схема взаимодействия пучка электронов с материалом показана на рис. 1а.

В практике моделирования кинетики доменной структуры рассматривают два основных механизма переключения – боковой рост и сквозное прорастание доменов. Изображения доменных структур, визуализируемые в режиме инжекции, демонстрируют незначительное изменение размеров и эффект эрозии [20], что позволяет включить в модель механизм сквозного роста доменов в форме клиньев с основанием $2y$ и углом наклона доменной границы ϕ . Геометрическая схема роста доменов показана на рис. 1б.

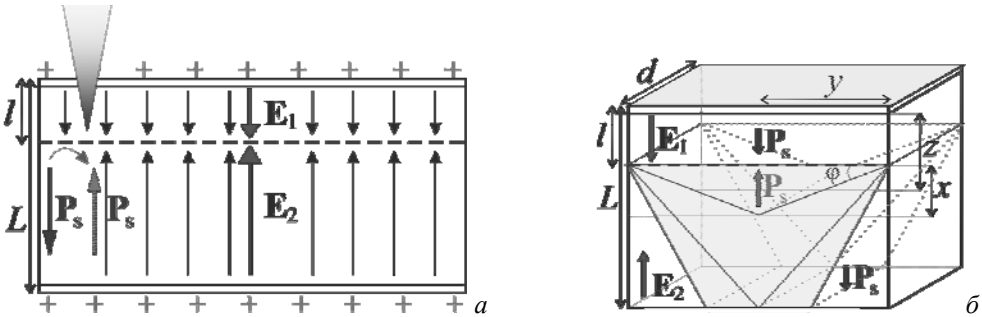


Рис.1. Схема взаимодействия источника с образцом – а и геометрическая схема модели движения доменной границы в инжекционном режиме – б.

Теоретическое описание поляризационного тока $I(t)$ можно ввести с использованием теории Колмогорова – Аврами [21], в которой ток определяется отношением переключенного объема к полному объему образца:

$$I(t) = 2 \frac{P_S S}{L} \frac{dx}{dt}, \quad v = \frac{dx}{dt} = v_\infty \exp\left(-\frac{\delta}{E_2}\right), \quad (1)$$

где P_S – спонтанная поляризация, Кл/м²; $S=2yd$ – площадь электрода, м²; L – толщина кристалла, м; v_∞ – максимальная скорость, м/с; δ – поле активации, В/м.

Поскольку включение источника в объекте, строго говоря, не является мгновенным, примем также, что процесс переключения начинается в момент времени $t_0 > 0$, близкий к нулевому значению, и завершается при достижении координатой середины клина $z(t)$ нижней грани кристалла L .

3. Математическая модель динамики доменной границы сегнетоэлектрика: фрактально-стохастический подход

Используя соотношения (1), после ряда преобразований приходим к математической постановке задачи моделирования динамики доменной границы и формирования поляризованного тока сегнетоэлектрика в неравновесных условиях электронного облучения [19]. Уравнение динамики доменной границы задается в безразмерном виде как дифференциальное уравнение дробного порядка с начальным условием:

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

где $s = x/L$ – безразмерное расстояние, $0 \leq s(w) \leq 2(1-l/L)$; $w = t/\tau_1$ – безразмерное время, $w \in [t_0/\tau_1, T/\tau_1]$; α – динамическая фрактальная размерность; $\cos^2 \varphi = y^2 / (x^2 + y^2)$; $\tau_1 = L/v_\infty$ – характерное время пробега толщины кристалла стенкой со скоростью v_∞ ; $\tau_2 = (\delta \varepsilon \varepsilon_0 L) / (jl)$ – параметр – время накопления заряда, создающего поле $E_2 = \delta$ при плотности тока j ; ε – диэлектрическая проницаемость образца; ε_0 – диэлектрическая постоянная; $\tau_3 = 2P_S/j$ – параметр – время, в течение которого ток j инициирует появление зарядов с поверхностной плотностью $\sigma = 2P_S$.

Использование оператора дробного дифференцирования по времени в (2) позволяет математически описать фрактальный характер движения доменной стенки, исходя из предположения о наличии эффекта памяти.

Введем в рассмотрение следующие принципы переключения поляризации. До момента достижения границей $x(t)$ нижней грани кристалла L ток будет определен площадью растущего домена (1). Переключение закончится в момент достижения позицией середины клина нижней грани L , при этом будут существовать части непереключенного объема. Разобьем основание области непереключенного объема на M дискретных интервалов, каждый из которых «включает» в процесс переполаризации соответствующую область. Принимая во внимание введенную нормировку, ток можно определить соотношением:

$$I(w) = \begin{cases} I^1(s(w)) = 4 \frac{P_S y d}{\tau_1} \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 0 \leq s \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ I^2(s(w)) = 4 \frac{P_S y d}{s^2 \tau_1} L^2 \left[1 - \frac{k}{M} \right] \frac{d^\alpha s}{dw^\alpha}, & 1 - \frac{l}{L} < s \leq 2 \left(1 - \frac{l}{L} \right), \end{cases} \quad (3)$$

где $k = \overline{0, M}$ – номер дискретного интервала.

Однако подход, предполагающий движение «единого полярного фронта» в виде расширяющегося клинообразного домена, является достаточно грубым приближением к описанию механизма перестройки доменной структуры. Как показывают авторы [16, 17], расширение области переполаризации сопровождается случайным процессом зародышеобразования доменов противоположной полярности. Подобные процессы часто связывают с появлением «скачков Баркгаузена» на кривой тока переключения.

Для учета указанных закономерностей введем стохастическую модификацию 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. Геометрическая схема модели показана на рис.2.

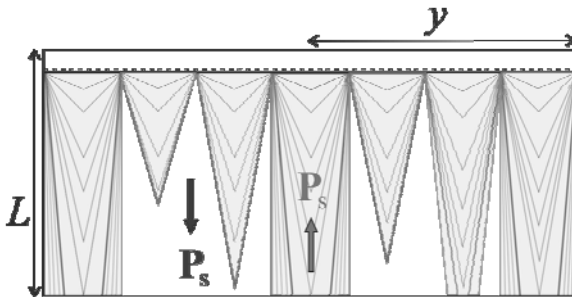


Рис.2. Схема доменного роста в стохастической модификации динамической модели.

Для каждой области с номером p проводится расчет координаты доменной границы. Ток переключения поляризации вычисляется как суперпозиция токов (3), представляющих вклады отдельных областей, с учетом весовых коэффициентов:

$$I(w) = \begin{cases} \eta I^1(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{N-1} \sum_{p=2}^N I^1(s_p(w)), & 0 \leq s_p(w) \leq 1 - \frac{l}{L}, \\ \eta I^2(s_1(w)) + \frac{1-\eta}{N-1} \sum_{p=2}^N I^2(s_p(w)), & 1 - \frac{l}{L} < s_p(w) \leq 2 \left(1 - \frac{l}{L}\right). \end{cases} \quad (4)$$

Решение начальной задачи для неавтономного дифференциального уравнения дробного порядка (2) не может быть найдено на основе известных аналитических подходов и требует привлечения численных методов.

4. Используемый математический аппарат и вычислительные схемы для решения дробно-дифференциальной задачи

Математическая постановка начальной задачи для дифференциального уравнения дробного порядка (2) имеет следующий общий вид:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = f(t, u(t)), \quad u(t_0) = u_0, \quad (5)$$

где $f(t, u(t))$ – некоторая заданная функция, $t \in [t_0, T]$; α – порядок дробного дифференцирования, $0 < \alpha \leq 1$.

В научной практике используют различные подходы к определению дробной производной. В числе наиболее известных – определение Римана – Лиувилля [4-5]:

$$D_R^\alpha u(t) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dt^m} \int_{t_0}^t \frac{u(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-m}} d\tau, & m-1 \leq \alpha \leq m, \\ \frac{d^m u(t)}{dt^\alpha}, & \alpha = m, \end{cases} \quad (6)$$

и определение Капуто [4, 5]:

$$D_C^\alpha u(t) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_{t_0}^t \frac{u^{(m)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-m}} d\tau, & m-1 \leq \alpha \leq m, \\ \frac{d^m u(t)}{dt^\alpha}, & \alpha = m, \end{cases} \quad (7)$$

где $\Gamma(\beta)$ – гамма-функция Эйлера.

Определение Капуто позволяет рассматривать классы задач, включающие неоднородное начальное условие, а определение Римана – Лиувилля

может быть использовано для решения задач с однородными начальными условиями. Операторы дробного дифференцирования согласовываются посредством введения корректирующего слагаемого [12]:

$$D_C^\alpha u(t) = D_R^\alpha u(t) - p, \quad p = D^\alpha(u_0) = u_0 \cdot t^0 = u_0 \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}. \quad (8)$$

При построении вычислительных схем для решения дробно-дифференциальных задач (5) часто используют конечно-разностный подход. Так, Грюнвальдом и Летниковым был предложен конечно-разностный аналог определения производной дробного порядка Римана – Лиувилля [9], на основе которого вводят аппроксимацию дробной производной на сетке $\Omega_h = \{t_i = t_0 + ih, i = \overline{0, N}\}$ с шагом h по времени:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{i=0}^N \frac{\Gamma(i-\alpha)}{\Gamma(i+1)} u(t-ih). \quad (9)$$

Используя (9), можно записать явную конечно-разностную схему для решения задачи (5) с учетом корректирующего слагаемого [12]:

$$u_{GL}(t_{i+1}) = h^\alpha f(t_i, u_{GL}(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}(t_{i-j+1}), \quad (10)$$

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

На основе определения Капуто можно построить схему прогноза и коррекции [10], аналогичную схеме Адамса – Башфорта – Моултона. Предиктор на конечно-разностной сетке Ω_h для $i = \overline{0, N-1}$ имеет вид

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

$$b_{j,i+1} = \frac{h^\alpha}{\alpha} \left((i+1-j)^\alpha - (i-j)^\alpha \right). \quad (11)$$

Соответственно корректор записывается в форме

$$u_C^c(t_{i+1}) = u_0 + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} f(t_{i+1}, u_C^p(t_{i+1})) + \frac{h^\alpha}{\Gamma(\alpha+2)} \sum_{j=0}^i a_{j,i+1} f(t_j, u_C^p(t_j)),$$

$$a_{j,i+1} = \begin{cases} i^{\alpha+1} - (i-\alpha)(i+1)^\alpha, & j=0, \\ (i+2-j)^{\alpha+1} - (i-j)^{\alpha+1} - 2(i+1-j)^{\alpha+1}, & 1 \leq j \leq i. \end{cases} \quad (12)$$

Довольно широкий круг различных модификаций указанных конечно-разностных методов представлен в обзорах [8, 9].

Можно предложить модификацию схемы (10), построенную на основе формулы Грюнвальда–Летникова, с использованием концепции метода прогноза и коррекции и с учетом корректирующего слагаемого:

$$u_{GL}^p(t_{i+1}) = h^\alpha f(t_i, u_{GL}^c(t_i)) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (13)$$

$$u_{GL}^c(t_{i+1}) = h^\alpha f(t_{i+1}, u_{GL}^p(t_{i+1})) + \frac{u_0}{(i+1)^\alpha \Gamma(1-\alpha)} - \sum_{j=1}^{i+1} C_j^\alpha u_{GL}^c(t_{i-j+1}), \quad (14)$$

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

Вычислительные алгоритмы решения дробно-дифференциальных уравнений демонстрируют главный принцип моделирования процессов с долговременной памятью – установление характеристик системы в текущий момент времени с использованием всех значений переменной состояния в предыдущие моменты времени. По аналогии вводят модели динамических фрактальных систем с «контролируемой» памятью, ограничивая при аппроксимации дробной производной соответствующий временной диапазон.

В общем, указанные методы имеют порядок аппроксимации [11]:

$$\max_{i=0, N} |u(t_i) - u_h(t_i)| = O(h^q), \quad q = \min(2, 1 + \alpha). \quad \text{В нашем случае порядок аппроксимации соответствует } O(h^{1+\alpha}).$$

В работах [9, 12] показано, что практическая оценка погрешностей конечно-разностных решений задач вида (5) 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.

5. Численное решение тест-задачи

Для численного решения рассматриваемого класса задач разработано программное приложение в ППП Matlab, реализующее алгоритмы представленных выше методов. С целью проверки адекватности работы прикладной

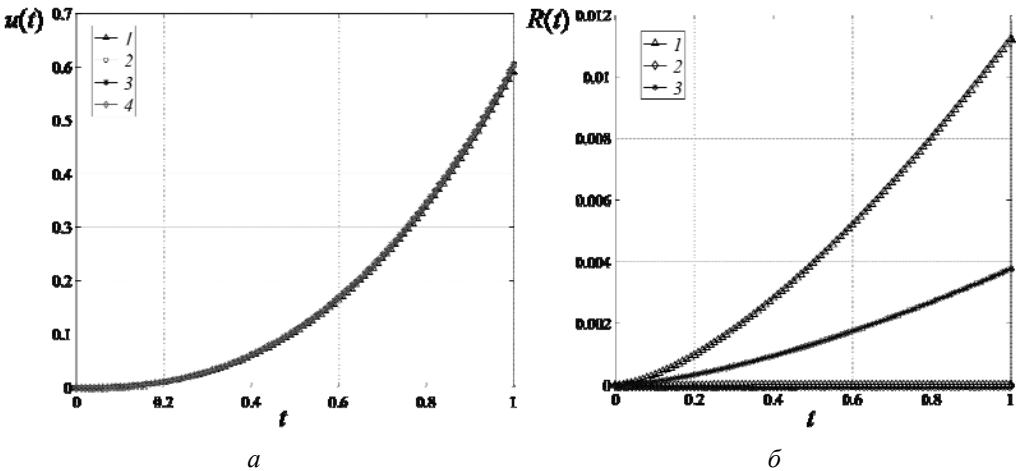
программы продемонстрируем численное решение следующего дифференциального уравнения дробного порядка с однородным начальным условием

$$\frac{d^{0.5}u(t)}{dt^{0.5}} = t^2, \quad u(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (15)$$

и аналитическим решением:

$$u_{ex}(t) = \frac{16}{15\sqrt{\pi}} t^2 \sqrt{t}. \quad (16)$$

Численные решения тестовой задачи (15), полученные на основе сеточных методов, в сравнении с аналитическим решением (16) приведены на рис.3а, при значении шага дискретизации по времени $h=0.01$. Рис.3б визуализирует абсолютные величины невязок найденных решений $R(t) = |u_h(t) - u_{ex}(t)|$.



Численное решение: 1 – по явной схеме (10), 2 – по схеме «предиктор-корректор» (11), (12), 3 – по схеме «предиктор-корректор» (13), (14). Аналитическое решение (16) – 4.

Невязка решения: 1 – по явной схеме (10), 2 – по схеме «предиктор-корректор» (11), (12), 3 – по схеме «предиктор-корректор» (13), (14).

Рис.3. Сравнение численных решений задачи (15) с аналитическим (16) – а и абсолютная величина невязок решений – б.

Оценка абсолютной погрешности с помощью евклидовой нормы для каждого метода дает следующий результат: явная схема (10) – 0.057; схема «предиктор-корректор» (11), (12) – 0.00013; схема «предиктор-корректор» (13), (14) – 0.019. Уменьшение шага по времени дает меньшую погрешность результатов, сохраняя соотношение между точностью методов в пользу схемы «предиктор-корректор», построенной на основе определения Капуто.

Модифицированная схема прогноза и коррекции (на основе формулы Грюнвальда – Летникова) дает лучший результат по сравнению с явной схемой и более проста в алгоритмическом плане по сравнению со схемой «предиктор-корректор» на основе определения Капуто.

6. Вычислительный эксперимент

Результаты компьютерного моделирования продемонстрируем на примере типичного сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата (ТГС) с использованием параметров, соответствующих условиям физического эксперимента [20].

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, μm (варьировался в диапазоне 0.05–0.5). Моделирование проведено в предположении, что в стартовый момент времени начинается переключение 50% объема кристалла ($\eta=0.5$), стохастический процесс образования новых зародышей продолжается в течение 16 с (40% от общего времени наблюдения процесса переключения). Как показано в [19], порядок дробной производной согласуется со значением параметра Херста для экспериментальной кривой (0.7–0.75) и в модели принят равным $\alpha=0.73$.

Параметры и константы математической модели: $L=10^{-3}$ м – толщина кристалла; $d=2y=0.5\cdot 10^{-3}$ м – линейные размеры облучаемой области кристалла; $l=3\cdot 10^{-6}$ м – глубина инъекции (устанавливается по данным моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло); $\tau_1=13.2$ с, $\tau_2=40$ с, $\tau_3=10$ с – характерные параметры времени; $[10^{-4} \text{ } 40.5]$ с – временной диапазон; $\epsilon=50$ – диэлектрическая проницаемость образца; $\epsilon_0=8.85\cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная; $P_S=2\cdot 10^{-2}$ Кл/м² – спонтанная поляризация.

В качестве методов численной реализации модели выбраны схемы типа «предиктор-корректор», которые в условиях задачи давали количественное согласование до четырех значащих цифр. Верификация также проводилась на основе сравнения решения методом Рунге – Кутты IV порядка аналогичной задачи с целой производной с решением дробно-дифференциальной задачи при $\alpha=0.999$.

На рис.4 показаны результаты моделирования зависимости координаты от времени при динамике доменной границы в рамках реализации дробно-дифференциальной модели и ее целочисленного аналога. 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. На рис.5 представлен результат моделирования импульса тока переключения поляризации для кристалла ТГС в сравнении с данными эксперимента.

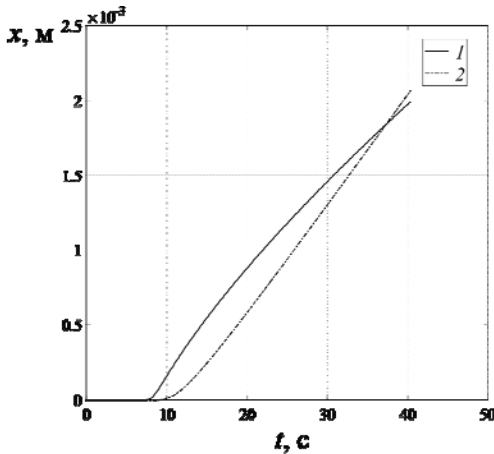


Рис.4. Модельные представления зависимости координаты от времени при движении доменной стенки, полученные с использованием: фрактальной модели – 1, модели с целочисленной производной – 2.

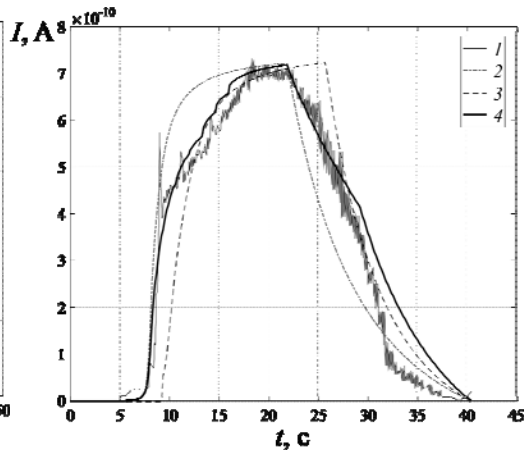


Рис.5. Результаты моделирования тока переключения поляризации кристалла ТГС в сравнении с данными эксперимента [19] – 1, полученные с использованием: фрактальной модели – 2, модели с целочисленной производной – 3, фрактально-стохастической модели – 4.

Величина среднеквадратичного отклонения для результата, полученного с помощью модели с целочисленной производной, составила $9.22 \cdot 10^{-11}$, с помощью фрактальной модели – $8.5 \cdot 10^{-11}$, с помощью фрактально-стохастической модели – $5.5 \cdot 10^{-11}$. Кривая тока переключения, рассчитанная на основе фрактально-стохастической модели (кривая 4 на рис.5), 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 режи-

ме и проводить математическое моделирование основной интегральной характеристики этого процесса – тока переключения поляризации.

7. Заключение

В данной работе предложен фрактально-стохастический подход к моделированию кинетики переключения сегнетоэлектриков в режиме инъекции. Математическая модель в постановке начальной задачи для дробно-дифференциального уравнения реализована на основе верифицированных предиктор-корректорных схем. Предложен стохастический алгоритм моделирования процесса зародышеобразования доменов. Представленные модификации позволили адекватно описать форму электронно-индуцированного тока переключения поляризации сегнетоэлектрика как фрактальной физической системы в присутствии эффекта памяти.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *С.В. Божокин, Д.А. Паршин.* Фракталы и мультифракталы. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001, 128 с.
S.V. Bozhokin, D.A. Parshin. Fraktaly i multifraktaly. – Izhevsk: NITs «Reguliarnaiia i khaoticheskaia dinamika», 2001, 128 s.
2. *J.W. Kantelhard.* Fractal and multifractal time series. – Halle-Wittenberg: Institute of Physics, Martin-Luther-University (Germany), 2010, 42 p.
3. *A. Arneodo, N. Decoster, S.G. Roux.* A wavelet-based method for multifractal image analysis. I. Methodology and test applications on isotropic and anisotropic random rough surfaces // *Eur. Phys. J. B.*, 2000, v.15, p.567-600.
4. *S.G. Samko, A.A. Kilbas, O.I. Marichev.* Fractional Integrals and Derivatives. Theory and Application. – Switzerland, Philadelphia, Pa., USA: Gordon and Breach Science Publishers, 1993, 976 p.
5. *I. Podlubny.* Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications Fractional differential equations. – San Diego: CA, USA: Acad. Press Inc., 1999, v.198, p.340.
6. *I. Petras.* Fractional-order nonlinear systems. Modeling, analysis and simulation. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011, 218 p.
7. *А.Н. Боголюбов, А.А. Кобликов, Д.Д. Смирнова, Н.Е. Шапкина.* Математическое моделирование сред с временной дисперсией при помощи дробного дифференцирования // *Математическое моделирование*, 2013, т.25, № 12, с.50-64.
A.N. Bogolyubov, A.A. Koblikov, D.D. Smirnova, N.E. Shapkina. Matematicheskoe modelirovanie sred s vremennoj dispersiej pri pomoshchi drobnogo differentsirovaniya // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2013, т.25, № 12, s.50-64.
8. *K. Diethelm, N.J. Ford, A.D. Freed, Yu. Luchko.* Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical method // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2005, v.194, p.743-773.

9. R. Garrapa. Numerical solution of fractional differential equations: a survey and software tutorial // *Mathematics*, 2018, v.6, no 16, p.1-23.
10. W. Deng. Short memory principle and a predictor-corrector approach for fractional differential equations // *J. of Computational and Applied Math.*, 2007, v.206, p.174–188.
11. S. Bhalekar, V.D. Gejji. A predictor-corrector scheme for solving nonlinear delay differential equations of fractional order // *Journal of Fractional Calculus and Applications*, 2011, v.1, № 5, p.1-9.
12. R. Scherera, S.L. Kallab, Y. Tangc, J. Huang. The Grünwald-Letnikov method for fractional differential equations // *Comp. & Math. with Applications*, 2011, v.62, p.902-917.
13. T. Ozaki. Ferroelectric domain structure characterized by prefractals of the pentad cantor sets in KH_2PO_4 // *Ferroelectrics*, 1995, v.172, p.65-77.
14. N.M. Galiyarova, A.B. Bey, E.A. Kuznetsov, Y.I. Korchmariyuk. Fractal dimensionalities and microstructural parameters of piezoceramics PZTNB-1 // *Ferroelectrics*, 2004, v.307, p.205-211.
15. B. Tadic. Switching current noise and relaxation of ferroelectric domains // *Eur. Phys. J. B.*, 2002, v.28, p.81-89.
16. M.K. Roy, J. Paul, S. Dattagupta. Domain dynamics and fractal growth analysis in thin ferroelectric films // *IEEE Xplore*, 2010, v.109, p.014108-014108.
17. J.F. Scott. Fractal dimensions in switching kinetics of ferroelectrics. – Cambridge: University of Cambridge Press., 1998, 9 p.
18. Р.П. Мейланов, С.А. Садыков. Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках // *Журнал технической физики*, 1999, т.69, № 5, с.128-129. англ.пер.: R.P. Meilanov, S.A. Sadykov. Fractal model for polarization switching kinetics in ferroelectric crystals // *Technical Physics*, 1999, v.44, p.595-596.
19. A.G. Maslovskaya, T.K. Barabash. Dynamic simulation of polarization reversal processes in ferroelectric crystals under electron beam irradiation // *Ferroelectrics*, 2013, v.442, p.18-26.
20. А.Г. Масловская, И.Б. Копылова. Исследование процесса реполяризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 2009, т.136, вып. 1(7), с.105-109; англ.пер.: A.G. Maslovskaya, I.B. Kopylova. Analysis of polarization switching in ferroelectric crystals in the injection mode // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2009, v.109, №1, p.90-94.
21. M. Omura, Y. Ishibashi. Simulations of polarization reversals by a two-dimensional lattice model // *Japanese Journal of Applied Physics*, 1992, v.31, p.3238-3240.

Поступила в редакцию 18.03.2019

После доработки 18.03.2019

Принята к публикации 20.05.2019