

Научная статья | Original paper

УДК 519.633:537.226.4

Численное моделирование аннигиляции доменной структуры в нелинейной гиперболической модели фазового поля

Л.И. Мороз ✉, О.С. Дорошков

Амурский государственный университет, Благовещенск, Российская Федерация

✉ moroz_l_i@mail.ru

Резюме

Контекст и актуальность. Моделирование динамики параметра порядка в нелинейных средах с учётом инерционных эффектов представляет интерес для физики конденсированного состояния и теории фазовых переходов. Гиперболические обобщения уравнения Ландау–Халатникова позволяют учитывать волновые механизмы переноса энергии, что принципиально отличает их от классических релаксационных моделей. Для их численного исследования требуется устойчивый и согласованный алгоритм второго порядка точности, способный корректно воспроизводить как нелинейную релаксацию, так и инерционно обусловленные волновые процессы. Цель. Исследовать динамику параметра порядка в нелинейной среде, описываемой инерционным уравнением типа Ландау — Халатникова — Тани, в приложении к процессу спонтанной аннигиляции узкой локализованной доменной структуры в двумерной постановке задачи. Гипотеза. Предполагается, что учёт инерционного члена приводит к качественному изменению эволюции доменной границы, а именно к перераспределению градиентной энергии в динамические колебания поля порядка, а применение неявной разностной схемы с итерационным уточнением нелинейности обеспечит корректное воспроизведение всех стадий аннигиляции. Методы и материалы. Для численного решения задачи использована неявная конечно-разностная схема Кранка — Николсона второго порядка точности по времени. Нелинейный член аппроксимируется методом Ньютона с итерационным уточнением решения на каждом временном шаге. Корректность реализации алгоритма подтверждена сравнением численных и аналитических решений на тестовой задаче с известным точным решением. Результаты. Численные эксперименты демонстрируют последовательные стадии эволюции доменной структуры: сближение границ, их исчезновение и формирование распространяющихся волновых возмущений. Показано,



что наличие инерционного члена приводит к перераспределению части градиентной энергии в динамические колебания поля параметра порядка. Выводы. Полученные результаты подтверждают корректность реализованного численного подхода и демонстрируют существенное влияние инерционных эффектов на характер динамики локализованных структур. Гиперболическая постановка позволяет описывать волновые процессы, отсутствующие в параболических моделях, что важно при анализе энергетического баланса и эволюции доменных границ.

Ключевые слова: уравнение Ландау — Халатникова — Тани, доменные структуры, сегнетоэлектрик, аннигиляция, вычислительный эксперимент

Для цитирования: Мороз, Л.И., Дорошков, О.С. (2026). Численное моделирование аннигиляции доменной структуры в нелинейной гиперболической модели фазового поля. Моделирование и анализ данных, 16(3), 186—201. <https://doi.org/10.17759/mda.2026160309>

Numerical modelling of domain structure annihilation in a nonlinear hyperbolic phase-field model

L.I. Moroz ✉, **O.S. Doroshkov**

Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation

✉ moroz_l_i@mail.ru

Abstract

Context and relevance. Modelling the dynamics of the order parameter in nonlinear media with inertial effects is of interest for condensed matter physics and the theory of phase transitions. Hyperbolic generalisations of the Landau–Khalatnikov equation make it possible to account for wave mechanisms of energy transport, which fundamentally distinguishes them from classical relaxation models. Their numerical investigation requires a stable and consistent second-order accurate algorithm capable of correctly reproducing both nonlinear relaxation and inertially induced wave processes. **Objective.** To investigate the dynamics of the order parameter in a nonlinear medium described by an inertial equation of the Landau–Khalatnikov–Tani type, with application to the process of spontaneous annihilation of a narrow-localised domain structure in a two-dimensional formulation. **Hypothesis.** It is assumed that inclusion of the inertial term leads to a qualitative modification of the domain boundary evolution, namely to redistribution of gradient energy into dynamical oscillations of the order parameter field, and that the use of an implicit finite-difference scheme with iterative treatment of the nonlinearity ensures correct reproduction of all stages of annihilation. **Methods and materials.** An implicit Crank — Nicolson finite-difference scheme with second-order temporal accuracy is employed for the numerical solution. The nonlinear term is approximated using



the Newton method with iterative refinement at each time step. Correctness of the algorithm implementation is confirmed by comparison of numerical and analytical solutions for a test problem with a known exact solution. **Results.** Numerical experiments demonstrate successive stages of domain structure evolution: convergence of the interfaces, their disappearance, and the formation of propagating wave disturbances. It is shown that the presence of the inertial term leads to redistribution of part of the gradient energy into dynamical oscillations of the order parameter field. **Conclusions.** The obtained results confirm the correctness of the implemented numerical approach and demonstrate the significant influence of inertial effects on the dynamics of localised structures. The hyperbolic formulation allows description of wave processes absent in parabolic models, which is important for analysing the energy balance and the evolution of domain boundaries.

Keywords: Landau — Khalatnikov — Tani equation, domain structures, ferroelectric, annihilation, numerical experiment

For citation: Moroz, L.I., Doroshkov, O.S. (2026). Numerical modelling of domain structure annihilation in a nonlinear hyperbolic phase-field model. *Modelling and Data Analysis*, 16(3), 186–201. (In Russ.). <https://doi.org/10.17759/mda.2026160309>

Введение

Динамика локализованных нелинейных структур является одной из фундаментальных проблем современной теории фазовых переходов, математической физики и материаловедения. Во многих системах спонтанно формируются доменные структуры — области с различной ориентацией параметра порядка, разделённые переходными слоями конечной толщины. Эволюция доменных стенок определяет макроскопические свойства среды и играет ключевую роль в процессах релаксации и переключения структур (Landau, Lifshitz, 1980; Lines, Glass, 1977; Onuki, 2002; Chanthbouala et al., 2012).

Феноменологическая теория фазовых переходов Ландау, а также её динамическое обобщение — уравнение Ландау–Халатникова — традиционно служат теоретической основой для математического описания кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках (Khalatnikov, 1965; Cahn, Hilliard, 1958; Bray, 1994). В стандартной постановке уравнение Ландау–Халатникова представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка по времени. Оно описывает релаксационную динамику системы к минимуму свободной энергии и широко применяется в рамках фазово-полевого метода для анализа роста доменов, движения стенок под действием внешнего поля и эволюции многодоменных структур (Chen, 2002; Frey 2023; Allen, Cahn, 1979; Chen, 2008).

Для описания пространственно-неоднородных состояний медленные вариации поляризации вдоль полярного направления учитываются через дополнительный вклад в плотность свободной энергии, пропорциональный квадрату градиента поляризации (Rabe, 2007). В феноменологическом подходе этот член отражает энергетическую стоимость образования доменных границ и обеспечивает пространственную



когерентность параметра порядка. Применение вариационной процедуры приводит к обобщённому уравнению Ландау–Халатникова, содержащему вторую пространственную производную. Данный член описывает диффузионное сглаживание неоднородностей, определяет эффективную толщину доменных стенок и составляет математическую основу современных фазово-полевых расчётов эволюции доменной структуры в реальных поликристаллах и тонких плёнках.

С математической точки зрения модель Ландау — Гинзбурга — Девоншира — Халатникова характеризуется монотонным убыванием функционала свободной энергии. Данная постановка применима для описания медленных релаксационных процессов, однако не учитывает инерционные эффекты. Между тем при рассмотрении быстрых переходных процессов, высокочастотных режимов или резких структурных перестроек вклад инерции становится существенным (Wang, Xia, Fan, Woo, 2003; Wang, Chen, Nagarajan, 2013; Tani, 1972). В этих случаях динамика параметра порядка не описывается исключительно механизмами диффузионной релаксации.

Учёт инерционных эффектов обуславливает гиперболическую модификацию модели. Включение кинетического члена в лагранжиан системы позволяет получить уравнение второго порядка по времени, известное в литературе как инерционное уравнение Ландау–Халатникова–Тани (Wang, Xia, Fan, Woo, 2003; Wang, Chen, Nagarajan, 2013; Tani, 1972). Такие уравнения обладают волновыми свойствами и допускают существование распространяющихся возмущений параметра порядка. Кроме того, при наличии внешнего гармонического поля и полиномиальном потенциале свободной энергии четвёртой степени данная модель сводится к уравнению Дуффинга, что позволяет анализировать гистерезисные и резонансные явления (Cross, 1987; Zhong, Vanderbilt, Rabe, 1994; Bhattacharya, 2003; Scott, 2000).

Несмотря на развитие инерционных моделей, большинство работ посвящено либо пространственно однородной динамике, либо медленной эволюции доменных ансамблей в параболической постановке. Существенно менее изученной остаётся пространственно неоднородная гиперболическая динамика локализованных структур, в частности процесс аннигиляции доменов. Под аннигиляцией понимается исчезновение локализованной области параметра порядка, ограниченной двумя противоположно ориентированными доменными стенками. При уменьшении ширины домена ниже критического значения взаимодействие стенок вызывает их ускоренное сближение и коллапс структуры. В параболической модели первого порядка данный процесс носит монотонный характер и сопровождается плавной релаксацией энергии. В гиперболической постановке высвобождаемая градиентная энергия частично преобразуется в кинетическую, что приводит к формированию распространяющихся волновых пакетов.

Анализ таких процессов представляет интерес как с точки зрения физики конденсированного состояния, так и в контексте исследования нелинейных гиперболических систем с диссипацией (Onuki, 2002; Frey 2023; Temam, 1997).

Численное моделирование подобных задач сопряжено с рядом вычислительных трудностей. Нелинейный потенциальный член высокой степени, малые коэффициенты затухания и гиперболический характер уравнения требуют применения



устойчивых разностных схем и корректной аппроксимации нелинейности. В настоящей работе рассматривается двумерная инерционная модель фазового поля в безразмерной постановке. Для её численного решения применяется схема Кранка — Николсон в совокупности с итерационным методом Ньютона на каждом временном шаге. Корректность вычислительного алгоритма подтверждается сравнением с аналитическим решением тестовой задачи.

Таким образом, целью работы является моделирование динамики локализованной доменной структуры, анализ процесса её аннигиляции и последующего формирования распространяющихся возмущений в системе.

Математическая постановка задачи

В качестве базовой математической модели выбрана двумерная нелинейная гиперболическая модель фазового поля. Динамика параметра порядка во времени и пространстве подчиняется обобщенному уравнению Ландау — Халатникова — Тани (Richman, 2017):

$$\rho P_{tt} + \gamma P_t = \psi \Delta P - (AP + BP^3 + CP^5), \quad (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, t > 0, \quad (1)$$

где $P(x, y, t)$ — параметр порядка, Кл·м⁻²; ρ — инерционный коэффициент, м·В·с²·Кл⁻¹; $\gamma \geq 0$ — кинетический коэффициент, м·с·Ф⁻¹; $\psi > 0$ — параметр пространственного взаимодействия, м³·Ф⁻¹; A, B, C — параметры разложения нелинейного термодинамического потенциала, м·Ф⁻¹, м⁵·Кл⁻²·Ф⁻¹ и м⁹·Кл⁻⁴·Ф⁻¹ соответственно (Rabe, 2007).

Нелинейный член в правой части уравнения (1) представляет собой производную плотности свободной энергии:

$$F(P) = \frac{A}{2} P^2 + \frac{B}{4} P^4 + \frac{C}{6} P^6.$$

Стационарные однородные состояния удовлетворяют уравнению $AP + BP^3 + CP^5 = 0$.

Алгебраическая структура корней уравнения определяет тип моделируемого фазового перехода. В частности, при $B > 0$ (как правило, $C = 0$) реализуется фазовый переход второго рода: при $A < 0$ потенциал $F(P)$ принимает классическую форму симметричной «двойной ямы». Если же $B < 0$ и $C > 0$, модель описывает фазовый переход первого рода, допускающий существование трёх стационарных точек, две из которых являются локальными минимумами. Наличие нескольких локальных минимумов энергии обеспечивает существование нескольких устойчивых однородных состояний, что математически обуславливает возможность формирования пространственно неоднородных решений — доменных структур.

В качестве расчетной области рассмотрим прямоугольник $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$.



На границе области заданы периодические условия:

$$P(0, y, t) = P(L_x, y, t), P_x(0, y, t) = P_x(L_x, y, t), P(x, 0, t) = P(x, L_y, t), P_y(x, 0, t) = P_y(x, L_y, t). \quad (2)$$

Использование периодических граничных условий позволяет моделировать поведение бесконечного кристалла и исключает влияние краевых эффектов на динамику доменных стенок и их аннигиляцию.

В начальный момент времени задаётся локализованная доменная структура. Для простоты рассматривается конфигурация с двумя параллельными доменными стенками, ориентированными вдоль оси y :

$$P(x, y, 0) = P_s \left(\tanh \frac{x - x_1}{w} - \tanh \frac{x - x_2}{w} \right) + P_{eq}, \quad (3)$$

где w характеризует ширину границы домена, м; x_1, x_2 определяют начальное положение стенок, м; P_{eq} соответствует одному из локальных минимумов функции $F(P)$, Кл·м⁻²; P_s — значение спонтанной поляризации (амплитуда параметра порядка внутри домена), Кл·м⁻².

Отметим, что ранее нами была исследована (Moroz, Maslovskaya, 2021) кинетика 180° доменных стенок в сегнетоэлектриках в рамках дробно-дифференциальной модели при наличии внешнего электрического поля. В настоящей работе акцент смещен на изучение свободной (релаксационной и инерционной) динамики и аннигиляции доменных стенок при нулевом внешнем поле.

Начальная скорость принимается равной нулю:

$$P_t(x, y, 0) = 0. \quad (4)$$

Динамика параметра порядка носит релаксационный характер при $\gamma > 0$ и направлена на минимизацию свободной энергии системы. Это приводит к эволюции доменной структуры во времени: стенки могут перемещаться, изгибаться и аннигилировать при столкновении.

Численная схема

Численное интегрирование уравнения (1) осуществляется с использованием неявной конечно-разностной схемы Кранка — Николсон, обладающей вторым порядком точности по времени и пространственным переменным. Выбор данной схемы связан с необходимостью устойчивого расчёта при наличии инерционного члена и нелинейности пятого порядка; полностью явные методы в рассматриваемой задаче требуют существенно более жёстких ограничений на шаг по времени.



Прямоугольная область $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ разбивается равномерной сеткой $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, где $\Delta x = L_x / N_x$, $\Delta y = L_y / N_y$.

Моменты времени задаются последовательностью $t^n = n\Delta t$. Значения решения в узлах сетки обозначаются через $P_{i,j}^n \approx P(x_i, y_j, t^n)$.

Пространственный оператор Лапласа аппроксимируется стандартной пятиточечной разностной формулой (Zhang, Yang 2022):

$$\Delta_d P_{i,j}^n = \frac{P_{i+1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j-1}^n}{\Delta y^2}.$$

Периодические граничные условия реализуются циклической идентификацией индексов по каждому пространственному направлению.

Временные производные аппроксимируются центральными разностями:

$$(P_{tt})_{ij}^n = \frac{P_{ij}^{n+1} - 2P_{ij}^n + P_{ij}^{n-1}}{\Delta t^2}, \quad (P_t)_{ij}^n = \frac{P_{ij}^{n+1} - P_{ij}^{n-1}}{2\Delta t}.$$

Правая часть уравнения усредняется по времени согласно схеме Кранка — Николсона. В результате на каждом временном слое возникает нелинейная система относительно значений P^{n+1} :

$$\rho \frac{P_{i,j}^{n+1} - 2P_{i,j}^n + P_{i,j}^{n-1}}{\Delta t^2} + \gamma \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{\psi}{2} (\Delta_d P_{i,j}^{n+1} + \Delta_d P_{i,j}^{n-1}) - \frac{1}{2} (f(P_{i,j}^{n+1}) + f(P_{i,j}^{n-1})), \quad (5)$$

где $f(P) = AP + BP^3 + CP^5$.

Таким образом, переход от слоя t^n к t^{n+1} сводится к решению системы нелинейных алгебраических уравнений размерности $N_x \times N_y$.

Для решения указанной системы применяется метод Ньютона. Обозначив через $G(P^{n+1})$ невязку, соответствующую разностной схеме (5), на k -й итерации вычисляется поправка $\delta P^{(k)}$ из линейной системы

$$M(P^{(k)})\delta P^{(k)} = -G(P^{(k)}). \quad (6)$$

Матрица линеаризованной системы имеет вид

$$M(P^{(k)}) = \left(\frac{\rho}{\Delta t^2} + \frac{\gamma}{2\Delta t} \right) I - \frac{\psi}{2} L + \frac{1}{2} J(P^{(k)}),$$

Здесь L — матрица дискретного оператора Лапласа, $J(P^{(k)})$ — диагональная матрица, составленная из значений производной $f'(P) = A + 3BP^2 + 5CP^4$.



Итерации продолжаются до выполнения условия $\|\delta P\|_{\infty} < \varepsilon$. Полученная схема обладает вторым порядком аппроксимации по времени и пространству и позволяет устойчиво вычислять эволюцию решения при шагах по времени, существенно превышающих ограничения, характерные для явных методов.

Тестовая задача

Для верификации разностной схемы рассмотрим следующую двумерную линейную задачу с источником:

$$\rho P_{tt} + \gamma P_t = \psi \Delta P - A_{\text{eff}} P + S(x, y, t), \quad (x, y) \in (0, L_x) \times (0, L_y), \quad t > 0, \quad (7)$$

где $S(x, y, t) = \cos(k_x x) \cos(k_y y) \left[(\psi(k_x^2 + k_y^2) + A_{\text{eff}} - \rho \omega^2) \sin(\omega t) + \gamma \omega \cos(\omega t) \right]$.

Уравнение (7) дополнено периодическими граничными условиями

$$\begin{aligned} P(0, y, t) &= P(L_x, y, t), \quad P_x(0, y, t) = P_x(L_x, y, t), \\ P(x, 0, t) &= P(x, L_y, t), \quad P_y(x, 0, t) = P_y(x, L_y, t) \end{aligned} \quad (8)$$

и начальными условиями

$$P(x, y, 0) = 0, \quad P_t(x, y, 0) = \omega \cos(k_x x) \cos(k_y y). \quad (9)$$

Точное решение задачи (7)–(9) имеет вид

$$P_{\text{exact}}(x, y, t) = \sin(\omega t) \cos(k_x x) \cos(k_y y), \quad k_x = \frac{2\pi}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y}. \quad (10)$$

Расчёты выполнялись в квадратной области $L_x = L_y = 1$ до момента времени $T = 1$ при параметрах $\omega = 3$, $\rho = 1$, $\gamma = 0,02$, $\psi = 1$, $A_{\text{eff}} = 1$.

Погрешность вычислялась в норме L_2 :

$\|e\|_{L^2} = \left(\int_{\Omega} (P_h(x, y, T) - P_{\text{exact}}(x, y, T))^2 dx dy \right)^{1/2}$, где интеграл вычислялся по формуле средних прямоугольников.

Экспериментальный порядок сходимости q вычислялся на основе двух последовательных измельчений сетки по формуле Рунге:

$$q = \frac{\ln(\|e_{h_1}\|_{L^2} / \|e_{h_2}\|_{L^2})}{\ln(h_1 / h_2)},$$

где h_1, h_2 — шаги дискретизации (пространственные или временные), а $\|e_{h_1}\|_{L^2}, \|e_{h_2}\|_{L^2}$ — соответствующие им погрешности.



Для исследования пространственного порядка шаг по времени, как показано в таблице 1, фиксировался равным $\Delta t = 10^{-3}$. При данном значении временная погрешность оказывалась существенно меньше пространственной, что подтверждалось дополнительными тестовыми расчётами.

Таблица 1 / Table 1

Сходимость по пространству
Spatial convergence

Δx	$\ e\ _{L_2}$	q_x
1/20	$1,1185 \cdot 10^{-4}$	—
1/40	$1,8217 \cdot 10^{-5}$	2,6182
1/80	$3,9469 \cdot 10^{-6}$	2,2065
1/160	$9,5085 \cdot 10^{-7}$	2,0534

Как видно из таблицы, при измельчении сетки экспериментальный порядок сходимости асимптотически стремится к двум, что соответствует второму порядку аппроксимации дискретного оператора Лапласа. Завышенные значения порядка на наиболее грубых сетках обусловлены доасимптотическим режимом. В этом случае погрешность определяется суммой членов различных порядков малости. При дальнейшем уменьшении шага сетки схема выходит в асимптотический режим, где наблюдаемый порядок строго стремится к теоретическому значению.

Для оценки временного порядка использовалась достаточно густая пространственная сетка ($\Delta x = \Delta y \approx 0,00078$), что позволило минимизировать влияние пространственной погрешности (табл. 2).

Таблица 2 / Table 2

Сходимость по времени
Temporal convergence

Δt	$\ e\ _{L_2}$	q_t
1/20	$7,2646 \cdot 10^{-5}$	—
1/40	$6,2964 \cdot 10^{-6}$	3,5283
1/80	$7,6620 \cdot 10^{-7}$	3,0387
1/160	$1,5004 \cdot 10^{-7}$	2,3524

Динамика экспериментального порядка демонстрирует выход схемы на асимптотический режим. При относительно крупных шагах интегрирования (доасимптотический режим) в погрешности аппроксимации существенную роль играют члены



высших порядков малости, что выражается в завышенных значениях расчетного порядка ($q > 3$). При дальнейшем уменьшении шага Δt старшие члены ряда Тейлора быстро затухают, и наблюдаемый порядок стремится к теоретическому значению 2, подтверждая заявленную точность схемы Кранка–Николсон.

Вычислительный эксперимент

Для изучения динамики доменных стенок проводится серия вычислительных экспериментов на основе двумерной гиперболической фазово-полевой модели (1)–(4). В рассматриваемой постановке координата x направлена по нормали к доменным стенкам, тогда как y соответствует поперечному направлению. Начальное распределение параметра порядка (3) задаётся в виде узкого полосового домена положительной ориентации, расположенного в фоновой среде противоположного знака. Несмотря на то, что стартовая конфигурация является квазиодномерной, полноценная двумерная модель позволяет учитывать возможные поперечные возмущения и отклонения формы фронтов в процессе эволюции. При этом на границах расчетной области задаются периодические условия, что исключает влияние краевых эффектов и позволяет интерпретировать область моделирования как фрагмент бесконечной среды.

Поскольку внешнее электрическое поле отсутствует, а объемные энергии обеих фаз вырождены (равны), единственной движущей силой автономной эволюции выступает стремление системы минимизировать суммарную градиентную энергию доменных стенок. Возникающая эффективная сила притяжения между противоположно ориентированными стенками инициирует процесс сжатия полосового домена (Alikin, Turygin, Kosobokov, 2022).

Численные расчёты полностью подтверждают данный сценарий и позволяют выделить несколько характерных стадий эволюции сформированной структуры. На начальном этапе решение сохраняет квазистационарную конфигурацию, определяемую балансом объёмной и градиентной энергий. Далее наблюдается ускоренное сближение доменных стенок (Su, Landis, 2007) сопровождаемое резким увеличением локальных градиентов параметра порядка и существенным возрастанием вклада инерционного члена. Кульминацией процесса становится аннигиляция встречных фронтов. После этого система переходит к релаксационной стадии, которая характеризуется генерацией и диссипативным затуханием возникших пространственных волновых возмущений.

Для простоты модель (1)–(4) рассматривается в безразмерной форме. Все приведённые значения параметров и геометрических размеров носят относительный характер.

Вычислительный эксперимент проводился в прямоугольной области, где размеры области составляли $L_x = 120$, $L_y = 30$. Пространственная дискретизация осуществлялась на равномерной сетке с числом узлов $N_x = 512$ и $N_y = 128$, что соответствует шагам $\Delta x = L_x / N_x$, $\Delta y = L_y / N_y$. Интегрирование по времени выполнялось с шагом $\Delta t = 0,01$ до конечного момента времени $T = 100$, что соответствует $N_t = 10000$ временным шагам.



Параметры модели принимались следующими: $\rho = 1$, $\gamma = 0,015$, $\psi = 1$, $A = -1$, $B = -1$, $C = 1$.

При этих значениях стационарные состояния определяются из уравнения $AP + BP^3 + CP^5 = 0$ и имеют ненулевые решения $P = \pm P_0$, где $P_0 = \sqrt{\frac{1+\sqrt{5}}{2}}$. В расчётах фоновое состояние выбиралось равным $P_{eq} = -P_0$.

Начальная конфигурация формировалась в виде узкого полосового домена положительной ориентации, встроенного в среду противоположного знака параметра порядка. Профиль задавался суперпозицией двух гиперболических тангенсов с эффективной толщиной стенки $w=1,2$ и начальной шириной домена $d=8$. Амплитуда внутри домена принималась равной $P_s = 1$. Начальная скорость во всей области полагалась равной нулю.

Для возбуждения двумерных возмущений к начальному распределению добавлялось малое случайное возмущение амплитуды порядка 10^{-2} , воспроизводящее микроскопические неоднородности среды и тепловые флуктуации, а также позволяющее инициировать возможные поперечные неустойчивости.

Результаты численного моделирования пространственно-временной эволюции параметра порядка представлены в виде последовательности распределений поля на рис. 1–4. На начальном этапе, рис. 1, эволюции в расчётной области формируется один домен положительной ориентации параметра порядка, встроенный в фоновую среду противоположного знака. Синие области на рисунке соответствуют стационарному состоянию $P \approx P_{eq} < 0$, тогда как жёлтая вертикальная полоса отражает область $P > 0$ внутри домена. Плавные переходные зоны на границах этой полосы представляют собой доменные стенки, то есть интерфейсы между фазами различного знака.

Таким образом, при наличии одного домена имеются две доменные стенки — левая (переход $P_{eq} \rightarrow P > 0$) и правая (переход $P > 0 \rightarrow P_{eq}$).

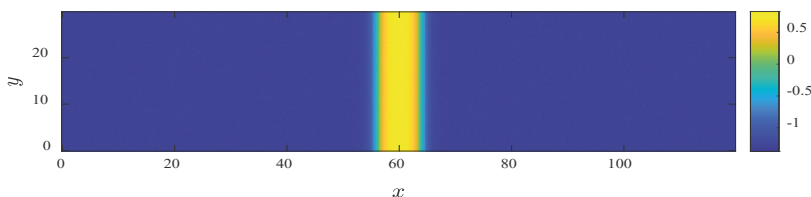


Рис. 1. Начальная конфигурация доменной структуры

Fig. 1. Initial configuration of the domain structure

По мере выхода из метастабильного состояния начинается стадия ускоренного сближения противоположно ориентированных фронтов. К моменту времени $t = 14,40$ (рис. 2) наблюдается выраженное критическое сжатие доменной структуры. Следует отметить, что внесенные начальные шумовые возмущения закономерно приводят к развитию двумерных неустойчивостей: профиль доменной стенки теряет



строгую одномерную симметрию, демонстрируя локальные поперечные искривления в процессе ускоренного схлопывания.

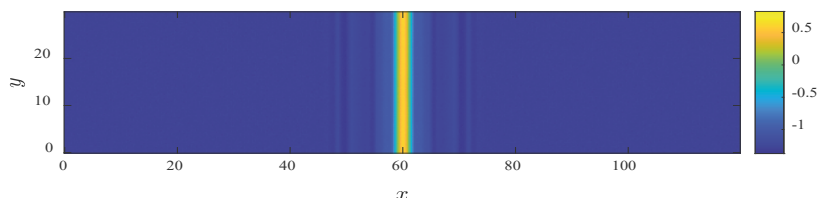


Рис. 2. Стадия сближения доменных стенок

Fig. 2. Approach stage of the domain walls

Аннигиляция домена (рис. 3) соответствует моменту слияния двух доменных стенок. Данный этап характеризуется интенсивным перераспределением энергии системы и переходом к дальнейшей релаксационной динамике.

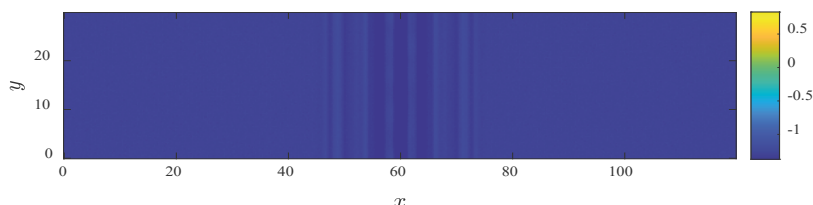


Рис. 3. Момент аннигиляции доменных стенок

Fig. 3. Annihilation moment of the domain walls

Следующая стадия (рис. 4, $t = 35,88$) соответствует релаксации поля к однородному стационарному состоянию. При этом высвобождаемая энергия преобразуется в распространяющееся возмущение параметра порядка, обусловленное гиперболическим характером модели.

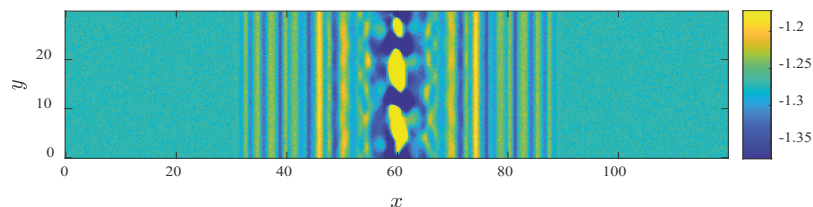


Рис. 4. Постаннигиляционная стадия

Fig. 4. Post-annihilation stage



Эти волны уносят избыточную энергию из зоны аннигиляции. Анализ временного сигнала в удаленной точке регистрации позволил оценить кинематику этого процесса. Расчет групповой скорости распространения главного максимума излученного волнового пакета показал значение $v \approx 0,93$. Данная величина согласуется с теоретической скоростью для линейных возмущений в рассматриваемой гиперболической среде ($c = \sqrt{\psi / \rho} = 1,00$). Наблюдаемое отклонение скорости распространения на $\sim 7\%$ от линейного предела обусловлено дисперсией волнового пакета конечной амплитуды на фоне сильно нелинейного потенциала Ландау, а также эффектами торможения за счет диссипативного слагаемого γ . Наблюдаемое конечное значение скорости распространения возмущения параметра порядка подтверждает гиперболическую природу модели. В отличие от параболических уравнений, описывающих чисто релаксационную динамику, гиперболическая постановка допускает волновой перенос энергии с конечной скоростью.

Заключение

В работе представлены результаты численного моделирования динамики локализованной доменной структуры в нелинейной гиперболической фазово-полевой модели, основанной на инерционном уравнении Ландау — Халатникова — Тани. Разработанный вычислительный алгоритм, сочетающий неявную схему Кранка — Николсона второго порядка точности и итерационный метод Ньютона для аппроксимации нелинейного члена, применён для анализа процесса спонтанной аннигиляции узкого домена в двумерной постановке.

Численные расчёты воспроизводят последовательные стадии эволюции доменной структуры: квазистационарное состояние, сближение противоположно ориентированных стенок, их аннигиляцию и последующее формирование распространяющихся возмущений параметра порядка. Показано, что наличие инерционного члена существенно влияет на характер динамики: в отличие от диффузионной релаксации, присущей параболическим моделям, часть высвобождаемой при аннигиляции градиентной энергии переходит в кинетическую, что приводит к возникновению затухающих волновых пакетов.

Анализ временной эволюции полной энергии подтверждает её монотонное убывание при наличии диссипации. Скорость распространения возмущений, определённая по сигналу в контрольной точке, оказалась близкой к теоретическому значению (расхождение порядка 7%), что свидетельствует о корректной реализации гиперболической части оператора и отсутствии выраженного численного затухания.

Полученные результаты показывают, что инерционная фазово-полевая модель адекватно описывает динамику доменных структур с учётом волновых эффектов и перераспределения энергии. Предложенный численный подход демонстрирует устойчивость и второй порядок точности, что позволяет применять его для исследования гиперболических нелинейных систем, возникающих в задачах физики конденсированного состояния и моделирования структурных преобразований.



Список источников / References

1. Формалев, В.Ф., Ревизников, Д.Л. (2006). *Численные методы*. Москва: ФИЗМАТЛИТ.
Formalev, V.F., Reyznikov, D.L. (2006). *Numerical Methods*. Moscow: FIZMATLIT. (In Russ.).
2. Alikin, Yu.M., Turygin, A.P., Kosobokov, M.S., Alikin, D.O., Shur, V.Ya. (2022). Decay of domains created by local switching on non-polar cut of MgO doped LiNbO₃ single crystals. *Ferroelectrics*, 592(1), 12–18. <https://doi.org/10.1080/00150193.2022.2052240>
3. Allen, S.M., Cahn, J.W. (1979). A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, 27, 1085–1095. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(79\)90196-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(79)90196-2)
4. Bhattacharya, K. (2003). *Microstructure of Martensite: Why it Forms and How it Gives Rise to the Shape-Memory Effect*. Oxford: Oxford University Press.
5. Bray, A.J. (1994). Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43, 357–459. <https://doi.org/10.1080/00018739400101505>
6. Cahn, J.W., Hilliard, J.E. (1958). Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, 28, 258–267. <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
7. Chanthbouala, A., Crassous, A., Garcia, V., Bouzehouane, K., Fusil, S., Moya, X., Allibe, J., Dlubak, B., Grollier, J., Xavier, S., Deranlot, C., Moshar, A., Proksch, R., Mathur, N.D., Bibes, M., Barthélémy, A. (2012). Solid-state memories based on ferroelectric tunnel junctions. *Nature Nanotechnology*, 7(2), 101–104. <https://doi.org/10.1038/nnano.2011.213>
8. Chen, L.-Q. (2002). Phase-field models for microstructure evolution. *Annual Review of Materials Research*, 32, 113–140. <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.32.112001.132041>
9. Chen, L.-Q. (2008). Phase-field method for microstructure evolution. *Journal of the American Ceramic Society*, 91(6), 1835–1844. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2008.02413.x>
10. Cross, L.E. (1987). Ferroelectric relaxors. *Ferroelectrics*, 69, 1–10. <https://doi.org/10.1080/00150198708016945>
11. Frey, R., Grosso, B.F., Fandré, P., Mächler, B., Spaldin, N.A., Mansouri Tehrani, A. (2023). Accelerated search for new ferroelectric materials using machine learning and high throughput DFT. *Physical Review Research*, 5, 023122. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.023122>
12. Khalatnikov, I.M. (1965). *An Introduction to the Theory of Superfluidity*. New York: W.A. Benjamin.
13. Landau, L.D., Lifshitz, E.M. (1980). *Statistical Physics. Part I*. Oxford: Pergamon Press.
14. Lines, M.E., Glass, A.M. (1977). *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*. Oxford: Clarendon Press.
15. Moroz, L., Maslovskaya, A. (2021). Fractional differential model of domain boundary kinetics in ferroelectrics: A computational approach. *AIP Conference Proceedings*, 2328(1), 020011. <https://doi.org/10.1063/5.0042140>
16. Onuki, A. (2002). *Phase Transition Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511534874>
17. Rabe, K.M., Ahn, C.H., Scott, J.-F. (Eds.). (2007). *Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective*. Berlin: Springer.



18. Richman, M.S., Rulis, P., Caruso, A.N. (2017). Ferroelectric system dynamics simulated by a second-order Landau model. *Journal of Applied Physics*, 122(9), 094101. <https://doi.org/10.1063/1.5000139>
19. Scott, J.F. (2000). *Ferroelectric Memories*. Heidelberg: Springer Science & Business Media. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-04307-3>
20. Su, Y., Landis, C.M. (2007). Continuum thermodynamics of ferroelectric domain evolution: Theory, finite element implementation, and application to domain wall pinning. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(2), 280–305. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2006.07.006>
21. Tani, S. (1972). Relaxation of order parameter in ferroelectrics. *Progress of Theoretical Physics*, 47, 1740–1752.
22. Temam, R. (1997). *Infinite-Dimensional Dynamical Systems in Mechanics and Physics*. New York: Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0645-3>
23. Wang, B., Xia, R., Fan, H., Woo, C.H. (2003). Dynamic process of domain switching in ferroelectric films. *Journal of Applied Physics*, 94, 3384–3391. <https://doi.org/10.1063/1.1599958>
24. Wang, Y.L., Chen, L.-Q., Nagarajan, V. (2013). Phase-field modeling of domain wall dynamics in ferroelectrics with inertial effects. *Physical Review B*, 88, 054404. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.054404>
25. Zhang, J., Yang, X. (2022). Efficient Fully Discrete Finite-Element Numerical Scheme with Second-Order Temporal Accuracy for the Phase-Field Crystal Model. *Mathematics*, 10(1), 155. <https://doi.org/10.3390/math10010155>
26. Zhong, W., Vanderbilt, D., Rabe, K.M. (1994). Phase transitions in BaTiO₃ from first principles. *Physical Review Letters*, 73, 1861–1864. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.1861>

Информация об авторах

Мороз Любовь Игоревна, кандидат физ.-мат. наук, доцент кафедры математического анализа и моделирования, Институт компьютерных и инженерных наук, Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: moroz_l_i@mail.ru

Дорошков Олег Сергеевич, магистр по направлению подготовки 01.04.02 — «Прикладная математика и информатика», Институт компьютерных и инженерных наук, Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация, ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-7205-906X>, e-mail: oleg2003dos@gmail.com

Information about the authors

Lyubov I. Moroz, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Mathematical Analysis and Modeling, Institute of Computer and Engineering Sciences, Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: moroz_l_i@mail.ru

Oleg S. Doroshkov, Master's degree in Applied Mathematics and Computer Science (01.04.02), Institute of Computer and Engineering Sciences, Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation, ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-7205-906X>, e-mail: oleg2003dos@gmail.com



Вклад авторов

Мороз Л.И. — идеи исследования, аннотирование и написание рукописи, контроль за проведением исследования.

Дорошков О.С. — применение численных методов, проведение экспериментов, написание программы, сбор и анализ данных, визуализация полученных результатов.

Все авторы приняли участие в обсуждении результатов и согласовали окончательный текст рукописи.

Contribution of the authors

Moroz L.I. — research concept, annotation, manuscript writing, supervision of the study.

Doroshkov O.S. — application of numerical methods, conducting experiments, programming, data collection and analysis, visualization of results.

All authors participated in the discussion of the results and approved the final text of the manuscript.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила в редакцию 13.05.2026
Поступила после рецензирования 10.08.2026
Принята к публикации 10.08.2026
Опубликована 30.09.2026

Received 2026.05.13
Revised 2026.08.10
Accepted 2026.08.10
Published 2026.09.30