

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
“САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
МЕХАНИКИ И ОПТИКИ”

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

«СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЯ
ЛАНДАУ-ЛИФШИЦА»

Автор Плотников А.М. _____
(Фамилия, Имя, Отчество) (Подпись)

Направление подготовки (специальность) 01.03.02 _____

Квалификация бакалавр _____
(бакалавр, инженер, магистр)

Руководитель Лобанов И.С. к.ф.-м.н. _____
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

К защите допустить

Зав. кафедрой Попов И.Ю., профессор, д.ф.-м.н. _____
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

“ ” июня 2016г.

Санкт-Петербург, 20__ г.

Студент Плотников А.М. Группа А3401 Кафедра ВМ Факультет ЕН
(ФИО)

Направленность (профиль), специализация Математическое моделирование

Квалификационная работа выполнена с оценкой _____

Дата защиты “___” _____ июня 2016г.

Секретарь ГЭК _____

Листов хранения _____

Демонстрационных материалов/Чертежей хранения _____

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
“САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
МЕХАНИКИ И ОПТИКИ”

АННОТАЦИЯ

ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Студент Плотников Антон Михайлович
(ФИО)

Наименование темы ВКР: Симплектические методы интегрирования уравнения Ландау-Лифшица

Наименование организации, где выполнена ВКР Университет ИТМО

ХАРАКТЕРИСТИКА ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1 Цель исследования Разработать эффективный алгоритм численного интегрирования уравнения Ландау-Лифшица для исследования динамики магнитной системы

2 Задачи, решаемые в ВКР Разработать симплектический алгоритм интегрирования уравнения Ландау-Лифшица. Привести необходимые формулы. Экспериментально убедиться в работоспособности полученного алгоритма. Сравнить полученный алгоритм с несколькими классическими методами численного интегрирования.

3 Число источников, использованных при составлении обзора 7

4 Полное число источников, использованных в работе 15

5 В том числе источников по годам

Отечественных			Иностранных		
Последние 5 лет	От 5 до 10 лет	Более 10 лет	Последние 5 лет	От 5 до 10 лет	Более 10 лет
0	0	5	5	2	3

6 Использование информационных ресурсов Internet нет
(Да, нет, число ссылок в списке литературы)

7 Использование современных пакетов компьютерных программ и технологий Язык программирования python, пакеты для научных вычислений scipy, numpy, matplotlib
(Указать, какие именно, и в каком разделе работы)

в 3 главе «Проведение эксперимента»

8 Краткая характеристика полученных результатов В работе реализован алгоритм численного интегрирования уравнения Ландау-Лифшица,

сохраняющий квадратичные инварианты системы. Рассмотрена эффективность алгоритма на
тестовом стенде в сравнении с алгоритмами Эйлера и не симплектическими алгоритмами
Рунге-Кутты второго и четвертого порядков

9 Полученные гранты, при выполнении работы отсутствуют
(Название гранта)

10 Наличие публикаций и выступлений на конференциях по теме выпускной работы нет
(Да, нет)

Выпускник Плотников Антон Михайлович
(ФИО) (подпись)

Руководитель Лобанов Игорь Сергеевич
(ФИО) (подпись)

“ _____ ” июня 2016 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
“САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
МЕХАНИКИ И ОПТИКИ”

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой Попов

Игорь Юрьевич

(ФИО)

(подпись)

« 1 » « декабря » 2016 г.

ЗАДАНИЕ
НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ

Студенту Плотникову А.М. Группа A3401 Кафедра ВМ Факультет ЕН

Руководитель Лобанов Игорь Сергеевич, к.ф.-м.н., университет итмо, доцент

(ФИО, ученое звание, степень, место работы, должность)

1 Наименование темы: Симплектические методы интегрирования уравнения
Ландау-Лифшица

Направление подготовки (специальность) 01.03.02

Направленность (профиль) математическое моделирование

Квалификация бакалавр
(бакалавр, магистр, специалист, инженер)

2 Срок сдачи студентом законченной работы « 1 » « июня » 2016 г.

3 Техническое задание и исходные данные к работе Разработать эффективный
алгоритм численного интегрирования уравнения Ландау-Лифшица для исследования
динамики магнитной системы

4 Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов)

Разработать симплектический алгоритм интегрирования уравнения Ландау-Лифшица.
Привести необходимые формулы. Экспериментально убедиться в работоспособности
полученного алгоритма. Сравнить полученный алгоритм с несколькими классическими
методами численного интегрирования.

5 Перечень графического материала (с указанием обязательного материала)

6 Исходные материалы и пособия

1. Markiewicz D. W. Survey on symplectic integrators
2. X. Z. Yu Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal
3. Скроцкий Г. В., Лифшица У. Л. Еще раз об уравнении ландау – лифшица
4. Хаар Д. тер Основы Гамильтоновой Механики

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

№№ п/п	Наименование этапов выпускной квалификационной работы	Срок выполнения этапов работы	Отметка о выполнении, подпись руков.
1	Ознакомление с предметной областью.	01.01.2016	
2	Реализация программы для моделирования динамики магнитной системы несколькими классическими численными методами.	01.03.2016	
3	Расчет необходимых формул для интегрирования симплектическим методом Рунге-Кутта.	01.04.2016	
4	Построение графиков и анализ полученного алгоритма.	01.05.2016	
5	Подведение итогов работы, оформление пояснительной записки.	30.05.2016	

8 Дата выдачи задания « 1 » « сентября » 2016г.

Руководитель _____
(подпись)

Задание принял к исполнению _____ « 1 » « сентября » 2016г.
(подпись)

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	5
ВВЕДЕНИЕ	6
 ГЛАВА 1 КРАТКИЙ ОБЗОР МАТЕРИАЛОВ	 8
1.1 Уравнения Гамильтона в электродинамике	8
1.2 Метод Эйлера	8
1.3 Метод Рунге-Кутты	9
1.4 Метод Ньютона	10
1.5 Уравнение Ландау-Лифшица	11
 ГЛАВА 2 ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ	 12
2.1 Уравнение Ландау-Лифшица	12
2.2 Симплектический интегратор	13
2.3 Метод Ньютона	16
 ГЛАВА 3 ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА	 17
3.1 Используемые технологии	17
3.2 Модель	18
3.3 Метод Эйлера	19
3.4 Методы Рунге-Кутты	20
3.5 Скирмион	23
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	25
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	26

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

- $S^{[n]}$ — элемент вектора (столбец матрицы) S индексом n ,
- $a \sim b$ — обозначение наличия связи между атомами решетки с индексами a и b ,
- E — полная энергия системы,
- B — магнитное поле,
- $D^{[n,m]}$ — вектор Дзялошинского-Мория для пары соседних атомов n и m ,
- $J^{[n,m]}$ — коэффициент межатомного взаимодействия между атомами n и m ,
- K — единичный вектор направления анизотропии,
- K_0 — коэффициент анизотропии,
- δ_{kn} — символ Кронекера,
- Id_n — единичная матрица ранга n ,
- \dot{a} — производная a по времени,
- $\langle a|b \rangle$ — скалярное произведение векторов a и b .

ВВЕДЕНИЕ

Последнее время часто поднимается тема магнитных скирмионов в научных работах и публикациях. Скирмионы – это квазичастица, представляющая собой структуру, выстраивающуюся из спинов нескольких атомов, обзор скирмионной системы на двумерной кристаллической решетке можно посмотреть, например в [6]. За счет стабильности (подробнее можно прочесть в статье [5], опубликованной в журнале Science) и своих малых размеров (порядка 1-2 нанометров) они представляют интерес в использовании в качестве ячеек магнитной памяти. В недавно-опубликованной статье [1], ученые из университета Тохоку изучили динамику поведения скирмионов в антиферромагнетиках и предсказали их поведение с учетом силы Магнуса, таким образом поведение магнитных скирмионов можно считать потенциально управляемым.

Магнитная система описывается уравнением Ландау-Лифшица, которое крайне сложно проинтегрировать символьно, поэтому для исследования динамики систем скирмионных структур будет полезно вывести метод, с помощью которого можно моделировать поведение скирмионов в динамически меняющихся условиях, например воздействие на них точечного заряда или изменении магнитного поля, который при этом будет достаточно эффективен и точен для наблюдения динамики системы в ”реальном времени“. Также о такой системе известно что энергия (в без диссипативной среде) должна сохраняться, поэтому нельзя пользоваться обычными численными методами высоких порядков, таких как методы Рунге-Кутты, поскольку они не гарантируют сохранений каких-либо инвариантов систем.

В настоящей работе предлагается алгоритм сохраняющий симплектическую структуру магнитной системы на основе симплектических методов Рунге-Кутта, для изучения динамики системы, описанной уравнением Ландау-Лифшица. В главе 1 дан обзор используемых в решении поставленной задачи численных методов, напоминается уравнение Гамильтона и его свойства и уравнение Ландау-Лифшица. В главе 2 описывается конкретная постановка проблемы и приведение необходимых формул для использования их в приведенных в главе 1 методах. Далее в 3 приведены результаты проведенных экспериментов, представлены сравнительные графики зависимостей исследуемых характеристик моделей и сравнение эффективности работы предлагаемого алгоритма и классических алгоритмов Эйлера и Рунге-Кутта.

ГЛАВА 1

КРАТКИЙ ОБЗОР МАТЕРИАЛОВ ПО ИССЛЕДУЕМОЙ ТЕМЕ

1.1 Уравнения Гамильтона в электродинамике

Динамическую систему с s степенями свободы можно описать с помощью $2s$ обыкновенных дифференциальных уравнений. Удобным способом записи является запись с помощью уравнений Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{q}_k = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p_k} \\ \dot{p}_k = -\frac{\partial H(p, q)}{\partial q_k} \end{cases}, \quad k = 1 \dots s. \quad (1.1)$$

В простых случаях гамильтониан представляет собой энергию системы. Рассмотрим автономную систему, т.е. систему гамильтониан не зависит явно от времени, тогда

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0,$$

легко показать что в такой системе функция Гамильтона, записанная в виде 1.1, не меняется со временем

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \\ &= \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \end{aligned}$$

Подробнее изучить материал можно, например, в работах [14, с. 123] и [11, с. 260].

Такие системы обычно невозможно решить в символьном виде, поэтому нужно воспользоваться какими-нибудь численными методами.

1.2 Метод Эйлера

Метод Эйлера – простейший метод численного интегрирования, описанный в [15, раздел 2, глава 7].

Напомним что порядком точности d называется порядок зависимости точности алгоритма от величины шага и обозначается $O(h)$. Метод Эйлера имеет порядок точности 1.

Метод Эйлера состоит в следующем. Пусть дана задача Коши

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y|_{x=x_0} = y_0 \end{cases}, \quad (1.2)$$

тогда следующее значение вычисляется через предыдущее по следующей формуле:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i).$$

1.3 Метод Рунге-Кутта

Также широко популярен класс численных методов решения задачи Коши именуемыми методами Рунге-Кутта.

Пусть есть задача Коши (1.2), тогда в общем виде итерационная схема неявного метода Рунге-Кутта имеет вид:

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \dots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \dots & b_s \end{array}$$

Рисунок 1.1 — Таблица для общего вида

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(x_n + c_j h, \xi_j), \quad (1.3)$$

где ξ вычисляется из нелинейного уравнения

$$\xi_j = y_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} f(x_n + c_j h, \xi_i). \quad (1.4)$$

Коэффициенты c_i , a_{ij} и b_i вычисляются из разложения функций y_n , f в

ряд Тейлора и приравнивания коэффициентов при степенях $h^{(p-1)}$ к нулю, где p – порядок степени аппроксимации схемы. Подробнее см. [12, с. 75].

Пусть $M = (m_{ij})_{i,j=1}^s$ – матрица вещественных чисел размера $s \times s$, где

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j, \quad i, j = 1, \dots, s,$$

тогда справедлива следующая теорема, доказательство которой можно посмотреть в работе [2].

Теорема 1. Если $M = 0$, тогда метод Рунге-Кутты является симплектическим.

В данной работе рассматривается симплектический метод Рунге-Кутты второго порядка, имеющий четвертый порядок точности, он же метод Гаусса-Лежандра-Рунге-Кутты. Для него таблица 1.1 выглядит как таблица 1.2.

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Рисунок 1.2 — Таблица для метода Гаусса-Лагранжа-Рунге-Кутты

1.4 Метод Ньютона

При решении задачи Коши с помощью методов Рунге-Кутты возникает необходимость решить нелинейное уравнение 2.4.

Метод Ньютона – один из итерационных численных методов для отыскания корня. Пусть дана система уравнений

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}, \quad (1.5)$$

и есть начальное приближение x_0 , тогда следующее приближение вычисляется из системы линейных уравнений

$$f_i(x^j) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_k}(x^j)(x_k^{j+1} - x_k^j) = 0, i = 1 \dots n \quad .$$

Критерием остановки метода может служить, например, $|x^i - x^{i-1}| < \epsilon$.

Для решения системы 1.5 можно снова прибегнуть к помощи численных методов, например к методу би-сопряженных градиентов.

Так же стоит обратить внимание на выбор начального приближения, поскольку в некоторых случаях с неправильно выбранным начальным условием метод может расходиться.

1.5 Уравнение Ландау-Лифшица

Уравнение Ландау-Лифшица в форме Ландау-Лифшица-Гильберта описывает движение векторов намагниченности в кристаллических решетках ферри- и ферромагнетиков в системе с диссипацией подробнее см. [13].

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = -|\gamma| [\mathbf{S} \times \mathcal{H}] - |\gamma|\lambda \mathbf{S} \times (\mathbf{S} \times \mathcal{H}), \quad (1.6)$$

тут γ некоторая феноменологическая постоянная, \mathcal{H} – эффективное магнитное поле, которое выражается через градиент энергии \mathbf{E} (вид гамильтониана см. [9, с. 2]):

$$\mathcal{H} = -\nabla \mathbf{E}. \quad (1.7)$$

ГЛАВА 2

ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

2.1 Уравнение Ландау-Лифшица

Рассмотрим систему описываемую уравнением Ландау-Лифшица (1.6). Второе слагаемое в этом уравнении является диссипативным членом. В данной работе исследуются симплектические методы интегрирования уравнения Ландау-Лифшица с целью сохранения полной энергии системы, поэтому далее уравнение (1.6) будет рассматриваться как уравнение для бездиссипативной среды и выглядеть следующим образом:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = -|\gamma|[\mathbf{S} \times \mathcal{H}]. \quad (2.1)$$

Будем рассматривать систему вклад в энергию которой вносят:

- $\sum_n \langle \mathbf{B} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle$ – внешнее магнитное поле
- $K_0 \sum_n |\langle \mathbf{K} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle|^2$ – анизотропия, где K_0 – линейный вклад в анизотропию и \mathbf{K} – единичный вектор направления вектора анизотропии
- $\sum_{n \sim m} J^{[n,m]}$ – межатомное взаимодействие между атомами n и m
- $\langle \mathbf{D}^{[n,m]} | (\mathbf{S}^{[n]} \times \mathbf{S}^{[m]}) \rangle$ – вектор Дзялошинского-Мория между атомами n и m

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = & - \sum_n \langle \mathbf{B} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle - K_0 \sum_n |\langle \mathbf{K} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle|^2 - \\ & - \sum_{n \sim m} J^{[n,m]} \mathbf{S}^{[n]} - \sum_{n \sim m} \langle \mathbf{D}^{[n,m]} | (\mathbf{S}^{[n]} \times \mathbf{S}^{[m]}) \rangle. \end{aligned}$$

Для удобства дальнейших расчетов перепишем в эффективное магнитное поле (1.7) в виде

$$\mathcal{H}^{[n]} = \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E}$$

где

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E} &= \\
&= \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \left(- \sum_n \langle \mathbf{S}^{[n]} | \mathbf{K} \mathbf{K}_0 \langle \mathbf{K} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle \rangle - \frac{1}{2} \left\langle \sum_n \mathbf{S}^{[n]} \left| \sum_{n \sim m} J^{[n,m]} \mathbf{S}^{[m]} \right. \right\rangle - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \left\langle \mathbf{S}^{[n]} \left| \sum_{n \sim m} \mathbf{S}^{[n]} \times \mathbf{D}^{[n,m]} \right. \right\rangle - \sum_n \langle \mathbf{B} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle \right) = \\
&= \underbrace{-2\mathbf{K}_0 \mathbf{K} \langle \mathbf{K} | \mathbf{S}^{[n]} \rangle - \sum_{n \sim m} J^{[n,m]} \mathbf{S}^{[m]} - \sum_{n \sim m} \mathbf{S}^{[m]} \times \mathbf{D}^{[n,m]} - \mathbf{B}}_{\mathbf{AS}^{[n]}}.
\end{aligned}$$

Для удобства дифференцирования далее будем рассматривать уравнение (1.7) в виде

$$\mathcal{H}^{[n]} = \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} = \mathbf{AS}^{[n]} - \mathbf{B}.$$

2.2 Симплектический интегратор

Чтобы воспользоваться симплектическим методом нужно убедиться в том, что энергия в системе, описанной уравнением Ландау-Лифшица (2.1), действительно должна сохраняться. Для этого посмотрим на ее дифференциал и убедимся что он равен 0:

$$\frac{d\mathbf{E}(S(t))}{dt} = \langle \nabla_S \mathbf{E} | \dot{\mathbf{S}} \rangle = \langle \nabla_S \mathbf{E} | \gamma \mathbf{S} \times \nabla_S \mathbf{E} \rangle = 0,$$

также гамильтониан должен быть представлен в симплектической форме:

$$\begin{cases} \dot{q}^{[n]} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial p^{[n]}} \\ \dot{p}^{[n]} = -\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial q^{[n]}} \end{cases}. \quad (2.2)$$

Поскольку $\mathbf{S}^{[n]}$ всегда единичный вектор в \mathbb{R}^3 , его состояние можно однозначно определить парой координат в ортогональном базисе, например в сферических координатах или с помощью длин ортогональных векторов на сфере. Таким образом можно ввести новый базис для каждого атома в решет-

ке и представить $\mathbf{S}^{[n]}$ следующим образом:

$$\mathbf{S}^{[n]} = \mathbf{S}^{[n]}(q^{[n]}, p^{[n]}).$$

Итак необходимо убедиться в эквивалентности:

$$\mathbf{S}^{[n]} = |\gamma| \mathbf{S}^{[n]} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E} \stackrel{?}{\Leftrightarrow} \begin{cases} \dot{q}^{[n]} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial p^{[n]}} \\ \dot{p}^{[n]} = -\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial q^{[n]}} \end{cases}. \quad (2.3)$$

Для удобства расчетов далее полагается $\gamma = 1$. Если есть необходимость задать эту константу отличной от 1, то можно переопределить энергию \mathbf{E} так, чтобы внести в нее эту поправку, тогда будут верны все ниже указанные расчеты.

Посчитаем производную по времени у гамильтониана в симплектической форме

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}^{[n]} &= \frac{d}{dt} \mathbf{S}^{[n]}(q^{[n]}(t), p^{[n]}(t)) = \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial q^{[n]}} \cdot \dot{q}^{[n]} + \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial p^{[n]}} \cdot \dot{p}^{[n]} = \\ &= \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial q^{[n]}} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial p^{[n]}} - \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial p^{[n]}} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial q^{[n]}} = \begin{vmatrix} \mathbf{S}^{[n]} & \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial q^{[n]}} & \frac{\partial \mathbf{S}^{[n]}}{\partial p^{[n]}} \\ 1 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial q^{[n]}} & \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial p^{[n]}} & \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{S}^{[n]}} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь, полученная в итоге, матрица представляет векторное произведение в базисе записанном первой строкой, вторая строка есть $\mathbf{S}^{[n]}$ и 3 представляет градиент \mathbf{E} по $\mathbf{S}^{[n]}$, таким образом

$$\dot{\mathbf{S}}^{[n]} = \mathbf{S}^{[n]} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E},$$

что и требовалось доказать в (2.3).

Таким образом можно воспользоваться симплектическим методом Рунге-Кутты, обзор которого можно посмотреть, например, в статье [3], и пользоваться приводимыми там формулами без явной записи гамильтониана в виде (2.2).

Так как исследуемая система автономна, то в уравнениях (1.3), (2.4) функ-

ция $f(t_n + c_j h, \xi_j)$ принимает вид $f(\xi_j)$. Для исследуемой модели $f(x)$ есть правая часть уравнения Ландау-Лифшица (2.1):

$$f(\xi) = -\mathbf{S} \times \mathcal{H}(\xi) = \mathbf{S} \times \nabla_{\mathbf{S}} \mathbf{E}(\xi).$$

Тогда итерационная схема (1.3) для исследуемой модели будет записана в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{k+1}^{[n]} &= \mathbf{S}_k^{[n]} + h \sum_{j=1}^s b_j \left[\xi_k^{[n]} \times \nabla_{\xi_j^{[n],k}} \mathbf{E}^k \right], \\ \xi_j^{[n],k} &= \mathbf{S}_k^{[n]} + h \sum_{i=1}^s a_{j,i} \left[-\xi_i^{[n],k} \times \nabla_{\xi_i^{[n],k}} \mathbf{E}^k \right], \end{aligned} \quad (2.4)$$

где

- k – номер шага в методе Рунге-Кутты,
- n – номер узла в решетке.

Для вычисления каждого следующего состояния системы необходимо решить нелинейное уравнение (2.4). Для этого можно воспользоваться, каким-нибудь численным методом, например методом Ньютона.

Отметим, что выше мы не переходим к локальным двумерным координатам, а остаемся в трехмерном пространстве, то необходимо учесть, чтобы длины векторов, характеризующие направление спинов атомов должны сохраняться. Запишем этот инвариант в эквивалентном виде следующем виде:

$$L^{[n]} = \left\langle \mathbf{S}^{[n]} \left| \mathbf{S}^{[n]} \right. \right\rangle.$$

Заметим, что L является квадратичной формой, тогда согласно теореме 2 (подробнее см. [7]) симплектический метод Рунге-Кутта будет сохранять этот инвариант.

Теорема 2. Симплектический метод Рунге-Кутта сохраняет все инварианты в квадратичной форме Гамильтоновой системы.

2.3 Метод Ньютона

Уравнение (1.5), это уравнение на нули следующей функции

$$F_j^{[n],k}(\xi) = \mathbf{S}_k^{[n]} + h \sum_{i=1}^s a_{j,i} \left[\xi_i^{[n],k} \times \nabla_{\xi_i^{[n],k}} \mathbf{E}(\xi) \right] - \xi_j^{[n],k} = 0,$$

в системе (1.5) ξ зависит от номера шага k , индекс которого можно опустить, поскольку рассматривается только один шаг.

Так же необходимо вычислить производную функции $F(x)$:

$$\begin{aligned} \nabla_{\xi^{[m]}} \left[\xi^{[n]} \times \mathcal{H}^{[n]}(\xi) \right] &= \\ &= \nabla_{\xi^{[j]}} \xi^{[i]} \times \mathcal{H}^{[n]}(\xi) + \xi^{[i]} \times \nabla_{\xi^{[j]}} \mathcal{H}^{[i]}(\xi) = \\ &= \nabla_{\xi^{[j]}} \xi^{[i]} \times \left(A \xi^{[i]} + \mathbf{B} \right) + \xi^{[i]} \times \nabla_{\xi^{[j]}} \left(A \xi^{[i]} + \mathbf{B} \right) = \\ &= \delta_{i,j} \text{Id}_3 \times \left(\mathcal{H}^{[i]}(\xi) \times \mathcal{H}^{[i]}(\xi) \right) + \xi^{[i]} \times \left(A^{[i,j]} \right), \end{aligned}$$

$$\nabla_{\xi_i^{[m]}} F_j^{[n]}(\xi) = h a_{j,i} \nabla_{\xi_i^{[m]}} \left(\xi_i^{[m]} \times \nabla_{\xi_i^{[m]}} \mathbf{E}[\xi_i] \right) = \delta_{i,j} \delta_{n,m} \text{Id}_3,$$

где Id_3 – единичная матрица с рангом 3.

Замечание 1. Тут и далее под векторным произведением матрицы на вектор имеется в виду:

$$(A_1 | \dots | A_n) \times B = (A_1 \times B | \dots | A_n \times B),$$

где A и B вектора.

ГЛАВА 3

ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

3.1 Используемые технологии

Для реализации модели 3.2 был выбран язык программирования *python*, в связи с простотой синтаксиса и большим выбором высокопроизводительных библиотек для математического моделирования, и модуль для научных вычислений *scipy* [8], являющийся одним из самых эффективных и популярных на момент написания работы. Преимуществом предлагаемого алгоритма является отсутствие в вычислениях сложных операций (с точки зрения производительности выполнения операций на ЭВМ), в программе использованы только матричные функции сложения, умножения модуля научных вычислений *numpy* [10]. Графики и рисунки приведенные в работе построены с использованием модуля *matplotlib* [4].

Вычисления производились на тестовом стенде с характеристиками:

- ЦПУ: AMD A8-7100 Radeon R5, 4 ядра, 1800 МГц
- ОС: Arch Linux, x86_64 Linux 4.5.4-1-ARCH
- ЗУПВ:
 - SODIMM DDR3 1600 МГц, 4 Гб, RMT3170ME68F9F1600
 - SODIMM DDR3 1600 МГц, 8 Гб, CT102464BF160B.M16
- *python* 2.7.11
- *scipy* 0.17.1
- *numpy* 1.11.0
- *matplotlib* 1.5.1

3.2 Модель

Модель представляет из себя двумерную кристаллическую решетку на плоском торе. Каждый элемент решетки имеет свой спин (трехмерный единичный вектор).

Атомы на решетке имеют связь только с 4 своими ближайшими соседями, то есть i атом имеет связь с $i - 1, i + 1, i - x, i + x$ элементами, если x и y задают размеры решетки, а узлы индексируются как $index = p_x + x * p_y$, где p_x и p_y это положение узла в решетке.

Между соседними атомами с индексами i и j установлена связь взаимодействия Дзялошинского-Мория $D_{i,j}$, в направлении от одного узла к другому. Стоит отметить, что $D_{i,j} = -D_{j,i}$.

Основные характеристики модели:

- b – вектор характеризующий магнитное поле, далее для усовершенствования можно заменить на векторное поле, чтобы смоделировать поведение в неоднородной среде
- i – сила межатомного взаимодействия
- K_0 – абсолютное значение анизотропии
- K – направление вектора анизотропии, единичный трехмерный вектор
- λ – параметр диссипации (для среды без диссипации $\lambda = 0$)
- γ – феноменологическая постоянная из уравнения Ландау-Лифшица
- x и y – размер решетки

Для сравнения эффективности метода, помимо самого симплектического метода Рунге-Кутты 2.2, был реализован метод Эйлера 3.3 и неявный метод Рунге-Кутты 4го порядка.

3.3 Метод Эйлера

Наивное интегрирование методом Эйлера:

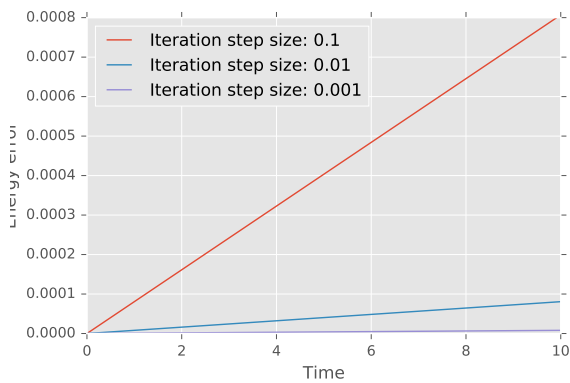
$$\mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_n + h\Delta\mathbf{S}_n,$$

где h – скорость в методе Эйлера, а

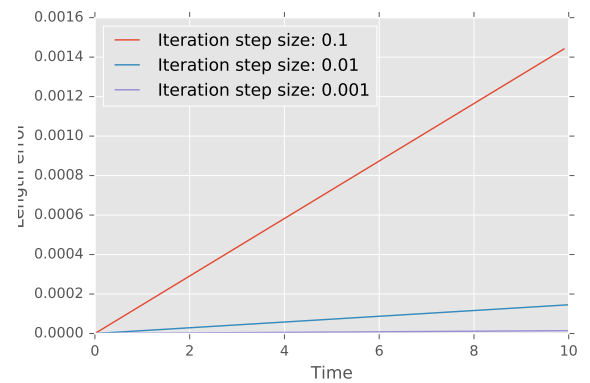
$$\Delta\mathbf{S}_n = -|\gamma| [\mathbf{S}_n \times \mathbf{H}^{eff}].$$

Убедимся на графиках в том что энергия при интегрировании методом Эйлера не сохраняется и в том что ошибка накапливается линейно, поскольку используемый численный метод, как сказано выше имеет 1 порядок, построив график зависимости ошибки от времени при различном шаге. График зависимости ошибки энергии от времени для метода Эйлера изображен на рис. 3.1а.

О модели мы знаем не только то что она должна сохранять энергию, но и то что вектора спинов находятся на единичной сфере, поэтому сумма длин всех векторов должна сохраняться, для метода Эйлера график зависимости ошибки длины векторов спинов от времени изображен на рис. 3.1б.



(а)

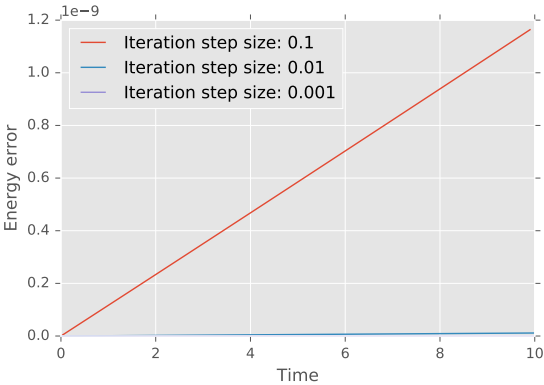


(б)

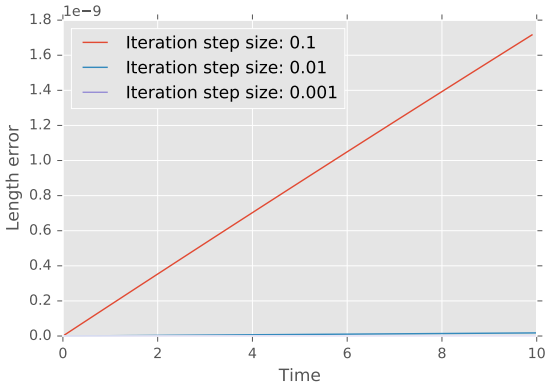
Рисунок 3.1 — (а) График зависимости ошибки энергии для метода Эйлера; (б) График зависимости ошибки суммы длин векторов спинов для метода Эйлера.

3.4 Методы Рунге-Кутта

Построим графики тех же зависимостей для метода Рунге-Кутта второго (рис. 3.2) и четвертого (рис. 3.3) порядков, и симплектического метода Рунге-Кутта (рис. 3.4) что и для метода Эйлера.

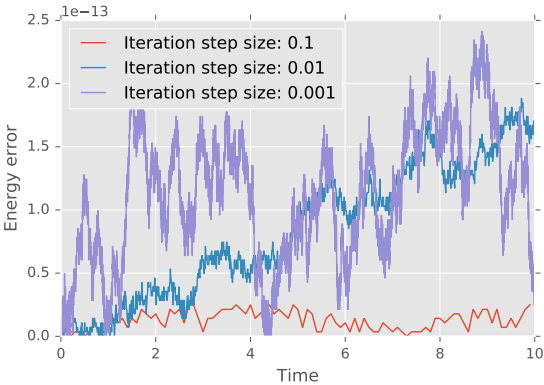


(а)

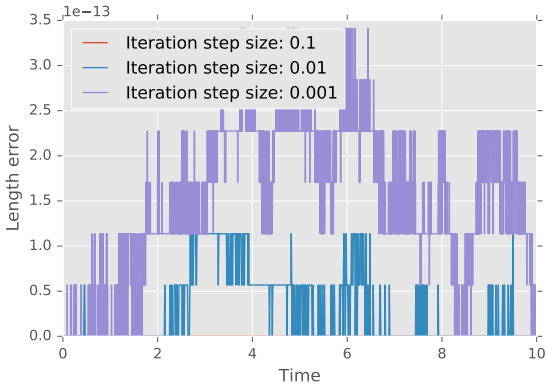


(б)

Рисунок 3.2 — (а) График зависимости ошибки энергии для метода Рунге-Кутта 2го порядка; (б) График зависимости ошибки суммы длин векторов спинов для метода Рунге-Кутта 2го порядка.



(а)



(б)

Рисунок 3.3 — (а) График зависимости ошибки энергии для метода Рунге-Кутта 4го порядка; (б) График зависимости ошибки суммы длин векторов спинов для метода Рунге-Кутта 4го порядка.

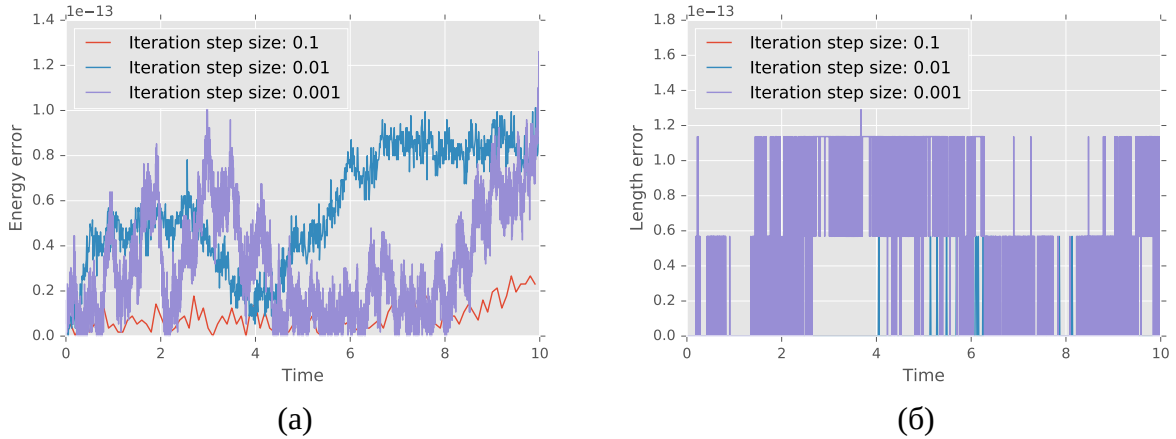


Рисунок 3.4 — (а) График зависимости ошибки энергии для симплектического метода Рунге-Кутты; (б) График зависимости ошибки суммы длин векторов спинов для симплектического метода Рунге-Кутты.

Сравнительный график зависимости ошибки энергии, от шага интегрирования на логарифмической шкале представленных алгоритмов, можно посмотреть на рис. 3.5 и ошибки суммы длин векторов на рис. 3.6.

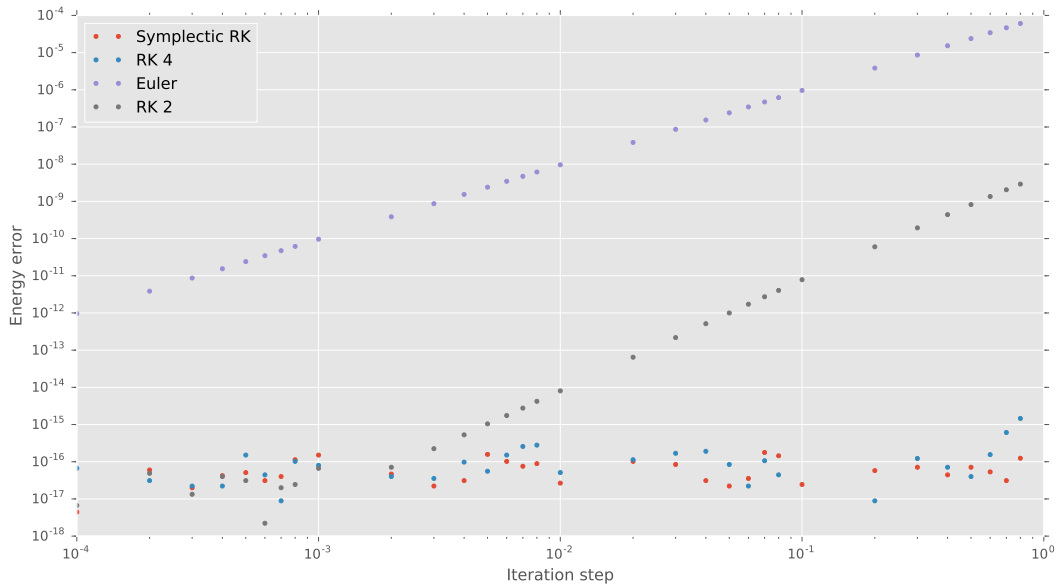


Рисунок 3.5 — Графики зависимости ошибки энергии от шага интегрирования на логарифмической шкале.

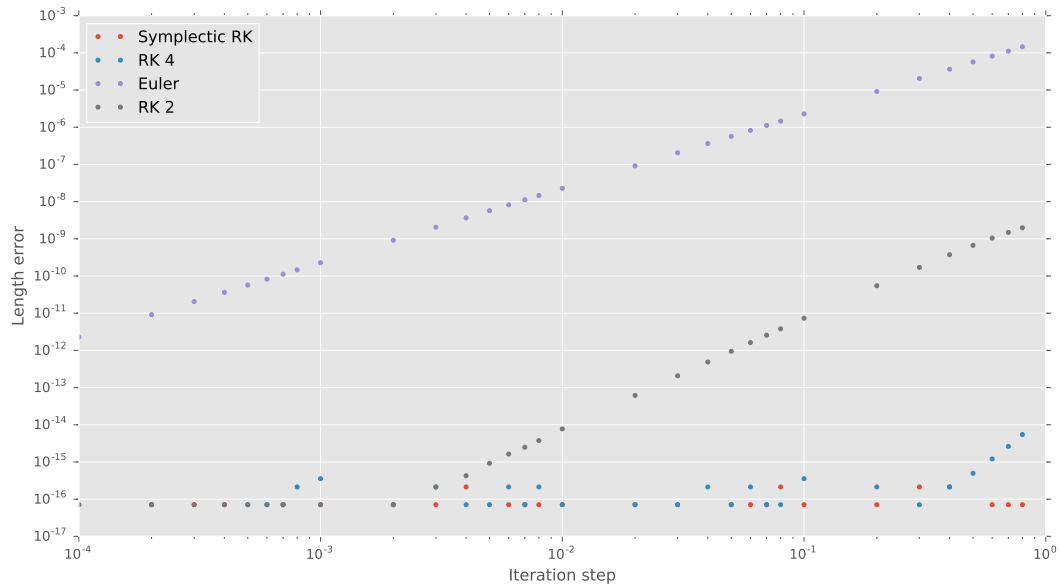


Рисунок 3.6 — Графики зависимости ошибки энергии от шага интегрирования на логарифмической шкале.

Сравним скорость работы алгоритмов на графиках зависимости скорости вычисления одной итерации от размера решетки системы. Для получения следующих результатов, алгоритмы были запущены по 1000 раз на 100 итераций с усреднением времени выполнения одной итерации. Полученные результаты см. рис. 3.7.

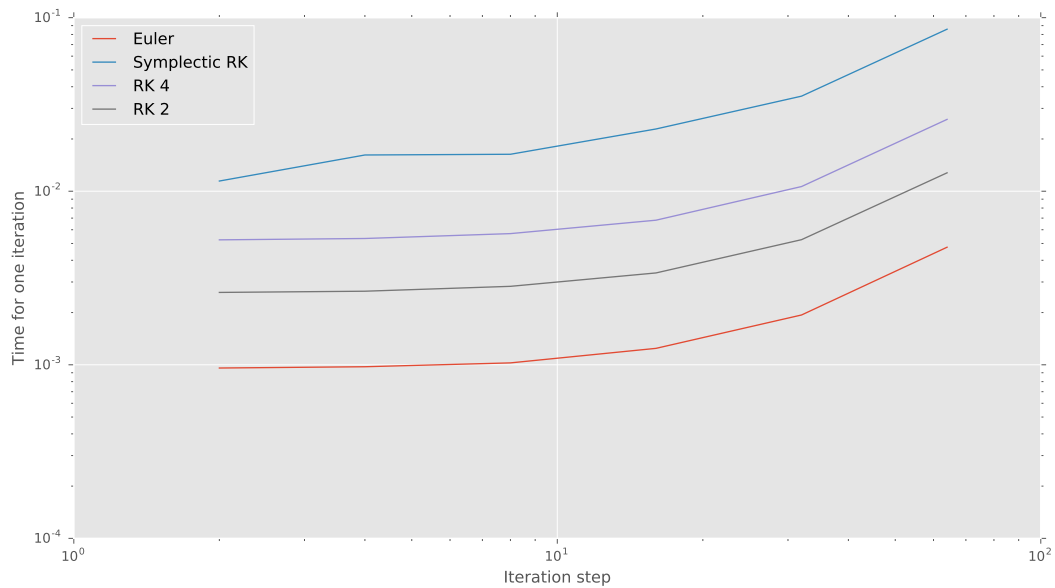


Рисунок 3.7 — Графики зависимости скорости вычисления одной итерации от размера решетки.

Видно, что зависимость не линейна, на больших размерах решеток разность скорости на одну итерацию будет не значительна, при этом предлагаемый метод гарантирует сохранение квадратичных инвариантов на каждой итерации.

3.5 Скирмион

Для получения визуального представления скирмиона положим коэффициент диссипации $\gamma = 0$. Спины в изначальной конфигурации поля направим по направлению магнитного поля кроме одного, направленного в противоположную сторону, получается рисунки следующего вида 3.8.

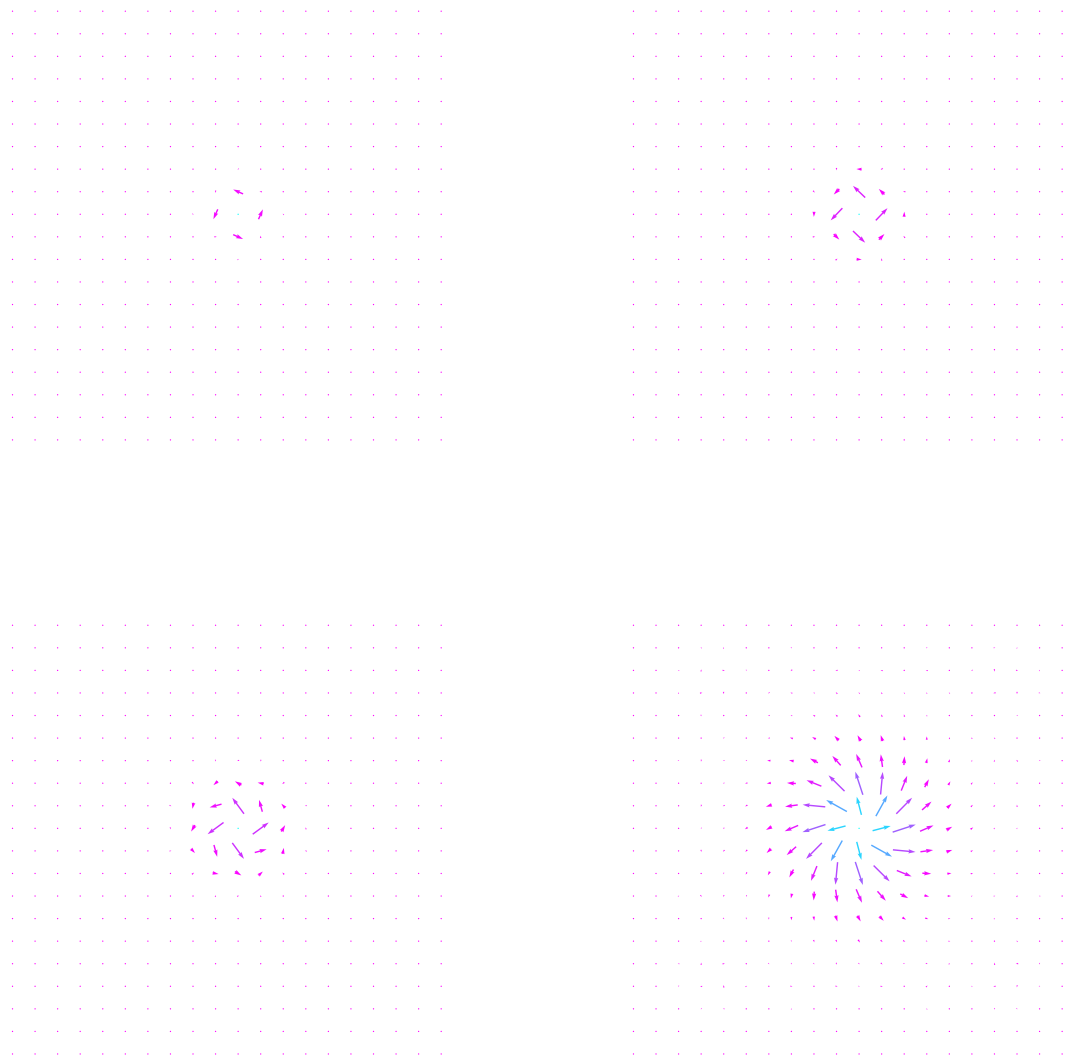


Рисунок 3.8 — Различные стадии скирмиона.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы представлен симплектический метод численного интегрирования уравнения Ландау-Лифшица с помощью симплектического метода Рунге-Кутты и продемонстрирована его эффективность.

Особенностью метода является, отсутствие перехода из внешней трехмерной системы координат к локальному двумерному базису, как часто делается в подобных задачах. Такое решение требует дополнительных ресурсов для хранения данных о третьей координате, но при этом операции над числами производятся более простые, в реализованной программе присутствуют только операции сложения и умножения матриц, что происходит значительно быстрее, чем операции, например, \sin или \cos , которые неизбежны при переходе к сферическим координатам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Barker J., Tretiakov O. A.* Static and Dynamical Properties of Antiferromagnetic Skyrmions in the Presence of Applied Current and Temperature // *Physical Review Letters*. — 2016. — Vol. 116, no. 14. — ISSN 10797114. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.147203. — arXiv: 1505.06156.
2. *Dekker K., Verwer J. G.* Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations. Vol. 984. — North-Holland Amsterdam, 1984.
3. *Markiewicz D. W.* Survey on symplectic integrators // *Spring*. — 1999. — Vol. 272.
4. Matplotlib: A 2D graphics environment / J. D. Hunter [et al.] // *Computing in science and engineering*. — 2007. — Vol. 9, no. 3. — Pp. 90–95.
5. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures / J. Sampaio [et al.] // *Nature nanotechnology*. — 2013. — Vol. 8, no. 11. — Pp. 839–844.
6. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal / X. Z. Yu [et al.] // *Nature*. — 2010. — June. — Vol. 465, no. 7300. — Pp. 901–904. — ISSN 0028-0836.
7. *Sanz-Serna J.* Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems // *BIT Numerical Mathematics*. — 1988. — Vol. 28, no. 4. — Pp. 877–883.
8. SciPy: Open source scientific tools for Python / E. Jones, T. Oliphant, P. Peterson, [et al.]. — 2001–. — [Online; accessed 2016-06-08].
9. Stability of single skyrmionic bits. / J. Hagemester [et al.] // *Nature communications*. — 2015. — Vol. 6. — P. 8455. — ISSN 2041-1723. — DOI: 10.1038/ncomms9455.
10. *Van Der Walt S., Colbert S. C., Varoquaux G.* The NumPy array: a structure for efficient numerical computation // *Computing in Science & Engineering*. — 2011. — Vol. 13, no. 2. — Pp. 22–30.

11. *Айзерман М.* Классическая механика. — 1980.
12. *Мышенков В.И. Мышенков Е.* Численные методы.
13. *Скороцкий Г.* Еще раз об уравнении Ландау-Лифшица.
14. *Хаар Д.* Основы Гамильтоновой Механики. — 1974.
15. *Эйлер Л.* Интегральное Исчисление. Том 1. — 1956.