



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Симплектические методы интегрирования уравнения Ландау-Лифшица

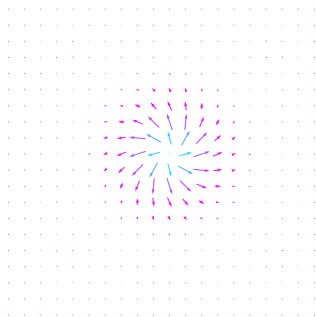
Кафедра высшей математики

Плотников Антон Михайлович
Научный руководитель Лобанов И. С.

Санкт-Петербург, 2016

- ❖ 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.

Скирмион – это квазичастица, представляющая структуру, выстраивающуюся из спинов нескольких атомов кристаллической решетки.



Состояние магнитной системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = -|\gamma| [\mathbf{S} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E}] - |\gamma| \lambda \mathbf{S} \times (\mathbf{S} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E}),$$

■ $\mathbf{S}^{[n]}$ – вектор направления спина атома с индексом n

Состояние магнитной системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = -|\gamma| [\mathbf{S} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E}] - |\gamma| \lambda \mathbf{S} \times (\mathbf{S} \times \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E}),$$

■ $\mathbf{S}^{[n]}$ - вектор направления спина атома с индексом n

Энергия системы

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

Пусть дана задача Коши

Задача Коши

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

тогда следующее значение вычисляется через предыдущее по следующей формуле:

Схема Эйлера

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

Неявный метод Рунге-Кутты

$$S_{n+1} = S_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(t_n + c_j h, \xi_j)$$

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

Коэффициенты a_{ij} , b_i и c_i задаются следующей таблицей

c_1	a_{11}	\dots	a_{1s}
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_s	a_{s1}	\dots	a_{ss}
	b_1	\dots	b_s

Неявный метод Рунге-Кутты

$$\mathbf{S}_{k+1}^{[n]} = \mathbf{S}_k^{[n]} + h \sum_{j=1}^s b_j \left[\xi_k^{[n]} \times \nabla_{\xi_j^{[n],k}} \mathbf{E}^k \right]$$

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

Коэффициенты a_{ij} , b_i и c_i задаются следующей таблицей

c_1	a_{11}	\dots	a_{1s}
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_s	a_{s1}	\dots	a_{ss}
	b_1	\dots	b_s

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

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

справедливы следующие теоремы

Теорема

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

Теорема

Симплектический метод Рунге-Кутты сохраняет все инварианты в квадратичной форме Гамильтоновой системы.

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

Таблица: коэффициенты для метода Гаусса-Лежандра-Рунге-Кутта

- ❖ 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

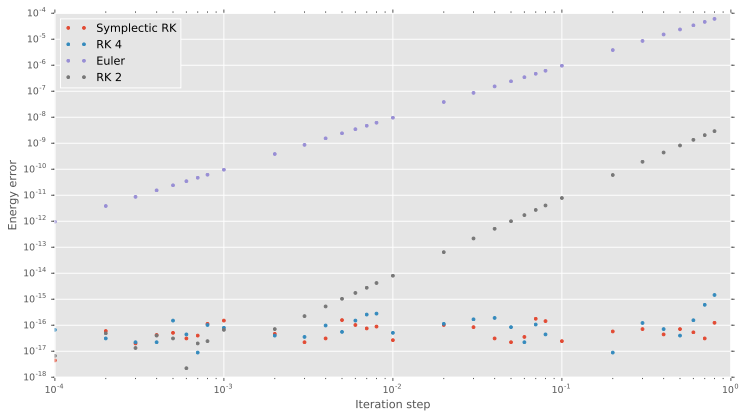


Рис.: График зависимости ошибки энергии от шага интегрирования

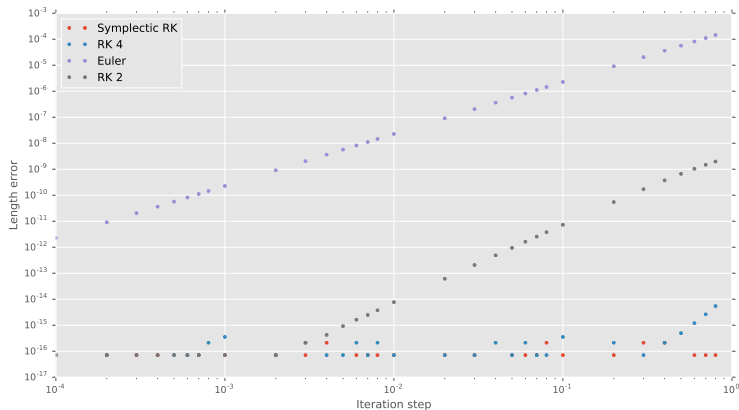


Рис.: График зависимости ошибки квадрата суммы длин векторов спинов от шага интегрирования

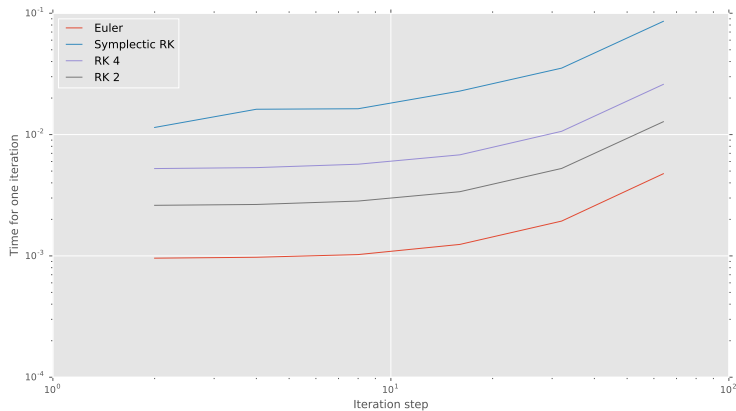
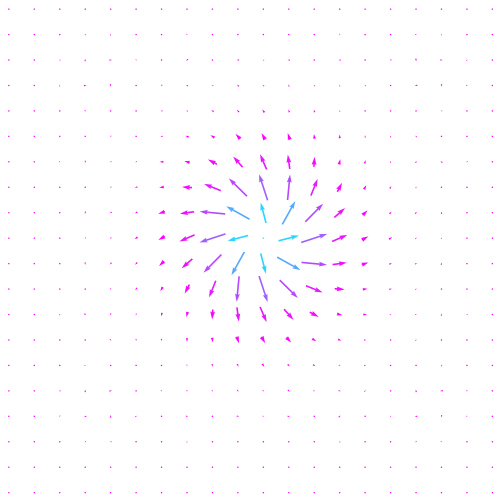


Рис.: График зависимости скорости одной итерации от размера решетки





УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Спасибо за внимание!

Плотников Антон

Санкт-Петербург, 2016

Пусть дана система уравнений и начальное приближение x^0

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

тогда следующее приближение вычисляется как

Следующее приближение в методе Ньютона

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

Эту систему можно решить методом би-сопряженных градиентов.

Система Гамильтона

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

При наивном численном интегрировании должна появиться ошибка с длиной вектора \bar{s}

