УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Симплектические методы интегрирования уравнения Ландау-Лифшица

Кафедра высшей математики

Плотников Антон Михайлович

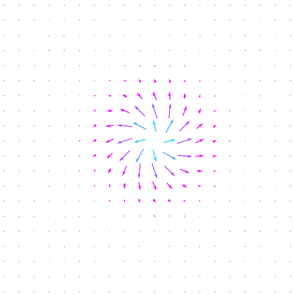
Научный руководитель Лобанов И. С.

Санкт-Петербург, 2016

Магнитный скирмион

Скирмион - это квазичастица, представляющая структуру, выстраивающеюся из спинов нескольких атомов кристаллической решетки.

Скирмион - это квазичастица, представляющая структуру, выстраивающеюся из спинов нескольких атомов кристаллической решетки.



Уравнение Ландау-Лифшица

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Состояние магнитной системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{dS_n}{dt} = -\gamma S_n \times \nabla_{S_n}\mathbf{E} - \gamma\lambda S_n \times (S_n \times \nabla_{S_n}\mathbf{E})$$

- $\mathbf{E}$ - энергия системы
- S_n - вектор направления спина атома с индексом n

Состояние магнитной системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{dS_n}{dt} = -\gamma S_n \times \nabla_{S_n}\mathbf{E} - \gamma\lambda S_n \times (S_n \times \nabla_{S_n}\mathbf{E})$$

- S_n - вектор направления спина атома с индексом n

Энергия системы

$$\mathbf{E} = -\sum_n \left\langle \mathbf{B} \middle| \mathbf{S}^{[n]} \right\rangle - \mathrm{K}_0 \sum_n \left| \left\langle \mathbf{K} \middle| \mathbf{S}^{[n]} \right\rangle \right|^2 - \\ - \sum_{n\sim m} J^{[n,m]}\mathbf{S}^{[n]} - \sum_{n\sim m} \left\langle \mathbf{D}^{[n,m]} \middle| \left(\mathbf{S}^{[n]} \times \mathbf{S}^{[m]} \right) \right\rangle .$$

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

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

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Неявный метод Рунге-Кутта

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

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

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

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

Неявный метод Рунге-Кутта

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

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

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

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

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

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

тогда справедлива следующая теорема

Теорема

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

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

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

тогда справедливы следующие теоремы

Теорема

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

Теорема

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

$$
\begin{array}{c|cc}
\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\
\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\
\hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

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

Гамильтонова система

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Система Гамильтона

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

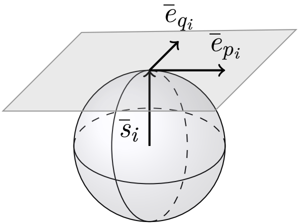
Гамильтонова система

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Система Гамильтона

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

При наивном численном интегрировании должна появится ошибка с длиной вектора $\overline{s}$



Гамильтонова система

Система Гамильтона

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

При наивном численном интегрировании должна появится ошибка с длиной вектора $\overline{s}$

Квадратичный инвариант

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

Пусть дана система уравнений и начальное приближение x^0

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

Метод ньютона

Пусть дана система уравнений и начальное приближение x^0

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

тогда следующее приближение вычисляется как

Следующее приближение в методе Ньютона

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

Эту систему можно решить методом би-сопряженных градиентов.

Тестовый стенд

- 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

Сравнение ошибки энергии

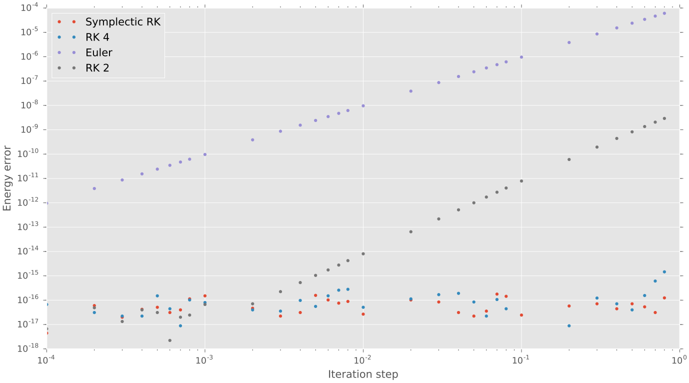


Рисунок: график зависимости ошибки энергии от времени

Сравнение ошибки длин

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

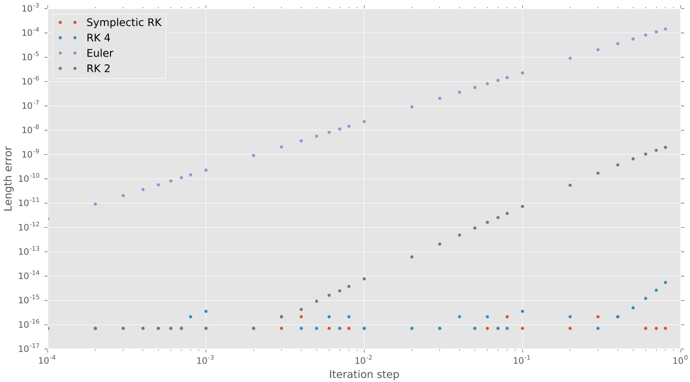


Рисунок: график зависимости ошибки квадрана суммы длин векторов спинов от времени

Сравнение скорости

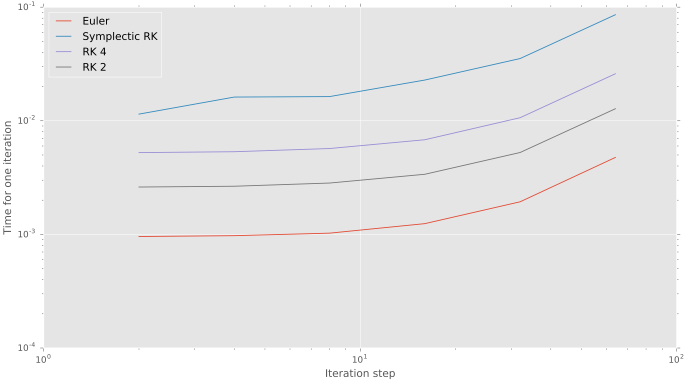
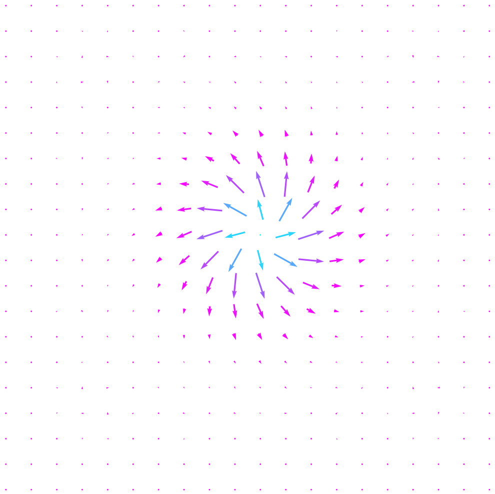


Рисунок: график зависимости скорости одной итерации от размера решетки



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Спасибо за внимание!

Плотников Антон

Санкт-Петербург, 2016