

министерство образования и науки российской федерации

**санкт-петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики**

Факультет Естественнонаучный

Направление Прикладная информатика и информатика

Квалификация бакалавр

Специализация математическое моделирование

Кафедра высшей математики Группа A3401

**ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
к выпускной квалификационной работе**

симплектические методы интегрирования
уравнения ландау-лифшица

Автор квалификационной работы Плотников А. М. (подпись)

Руководитель Лобанов И. С. (подпись)

К защите допустить

Зав. кафедрой Попов И. Ю. (подпись)

5 июня 2016 г.

Условные обозначения

\mathbf{S} – Вектор векторов спинов (состояние системы)

$\mathbf{S}^{[n]}$ – Вектор спина в узле n

E – Полная энергия системы

δ_{kn} – Символ Кронекера

\dot{a} – производная a по времени

Глава 1

Введение

1.1. Уравнения Гамильтона в теоретической динамике

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

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

Смыслом гамильтониана системы обычно является энергия. Рассмотрим такую систему, где гамильтониан не зависит явно от времени, тогда

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

легко показать что в такой системе гамильтониан, записанный в виде 1.1, не меняется со временем

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

Подробнее изучить материал можно, например, в работе Хаар, 1974, стр. 123 и Айзерман, 1980, стр. 260

Такие системы обычно невозможно решить в символьном виде, поэтому нужно прибегать к численным методам.

1.2. Метод Эйлера

Метод Эйлера – простейший метод численного интегрирования, описанный в Эйлер, 1956, раздел 2, глава 7, имеющий первый порядок точности, т.е. погрешность метода составляет $O(h)$, где h – величина шага.

Метод Эйлера состоит в следующем. Пусть дано

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

тогда следующее значение вычисляется через предыдущее по следующей формуле:

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

1.3. Метод Рунге-Кутты

Также широко популярен класс численных методов решения задачи коши именуемыми методами Рунге-Кутты.

Пусть есть задача коши 1.2, тогда в общем виде итерационная схема неявного метода Рунге-Кутты имеет вид:

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

Рис. 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. «Численные методы» 2005, стр. 75.

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

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

Рис. 1.2: Таблица для метода Гаусса-Лагранжа-Рунге-Кутта

1.4. Метод Ньютона

При решении задачи коши с помощью методов Рунге-Кутта возникает необходимость решить нелинейное уравнение 2.4.

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

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

и есть начальное приближение x^0 , тогда следующее приближение вычисляется из системы линейных уравнений

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

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.

1.5. Уравнение Ландау-Лифшица

В данной работе исследуется динамика системы, описанной уравнением Ландау-Лифшица.

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта описывает движение векторов намагниченности в кристаллических решетках фери- и ферромагнетиков см. Скроцкий и Лифшица, 1984.

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

Тут γ некоторая феноменологическая постоянная, \mathcal{H} – эффективное магнитное поле, которое выражается через градиент энергии \mathbf{E} (вид гамильтониана см. Nagameister и др., 2015, стр. 2):

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

1.6. Актуальность работы

Тема магнитных скирмионов не редко сейчас поднимается в таких научных журналах, как «Nature» (Yu и др., 2010), «Nature Physics» (Liang, Stolt и Jin, 2016).

За счет своих малых размеров и устойчивой структуре, скирмионы можно использовать как эффективный способ хранения данных. 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 для наблюдения в ”реальном времени“.

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:

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

Возьмем энергию вклад в которую вносят:

- \mathbf{B} – внешнее магнитное поле
- K_0, \mathbf{K} – анизотропия, где K_0 и \mathbf{K} линейный вклад в анизотропию и единичный вектор направления вектора анизотропии
- $J^{[n,m]}$ – сила межатомного взаимодействия между атомами n и m
- $D^{[n,m]}$ – сила Дзялошинского-Мория между атомами n и m

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

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

$$\mathcal{H}^{[n]} = \nabla_{\mathbf{S}^{[n]}} \mathbf{E} = A \mathbf{S}^{[n]} + \mathbf{B}^{[n]},$$

где

$$AS^{[n]} = -2K_0K(K \cdot S^{[n]}) - \sum_m J^{[n,m]} S^{[m]} - \sum_m S^{[m]} \times D^{[n,m]}$$

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.

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

Так же Гамильтониан должен быть представлен в симплектической форме:

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

Поскольку $S^{[n]}$ всегда единичный вектор в \mathbb{R}^3 , в определенной фиксированной точке, то 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 решетке и представить $S^{[n]}$ следующим образом:

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

Итак необходимо убедиться в эквивалентности:

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

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

Посчитаем производную по времени у Гамильтониана в симплектической

форме

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

что и требовалось доказать в 2.3.

Таким образом можно воспользоваться симплектическим методом Рунге-Кутты, обзор которого можно посмотреть, например, в статье **Markiewicz1999**, 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 функция $f(t_n + c_j h, \xi_j)$ принимает вид $f(\xi_j)$

Для исследуемой модели $f(x)$ есть правая часть уравнения Ландау-Лифшица 2.1:

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

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

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

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.

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 $F(x)$:

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

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

Реализация

3.1. Используемые технологии

Для реализации модели 3.2 был выбран язык программирования *python* и модуль для научных вычислений *scipy*

3.2. Модель

Модель представляет из себя двумерную кристаллическую решетку на 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
- γ

- μ
- x и y – размер решетки

Для изучения динамики модели реализован метод Эйлера 3.3 и, описанный выше, симплектический метод Рунге-Кутты 2.2 второго порядка он же метод Гаусса-Лежандра-Рунге-Кутты.

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

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

Относительным временем будем называть величину

$$\tau = \iota \cdot h$$

где ι номер итерации. На графике зависимости энергии системы от относительного времени видно, что метод Эйлера не применим на допустимых скоростях. Также не сохраняется длина векторов спинов И суммой проекций всех спинов на вектор магнитного поля

Для сохранения длины спинов можно на каждой итерации нормировать все вектора из \mathbf{S} , тогда графики будут выглядеть как и для энергии системы и проекции векторов на направление магнитного поля соответственно.

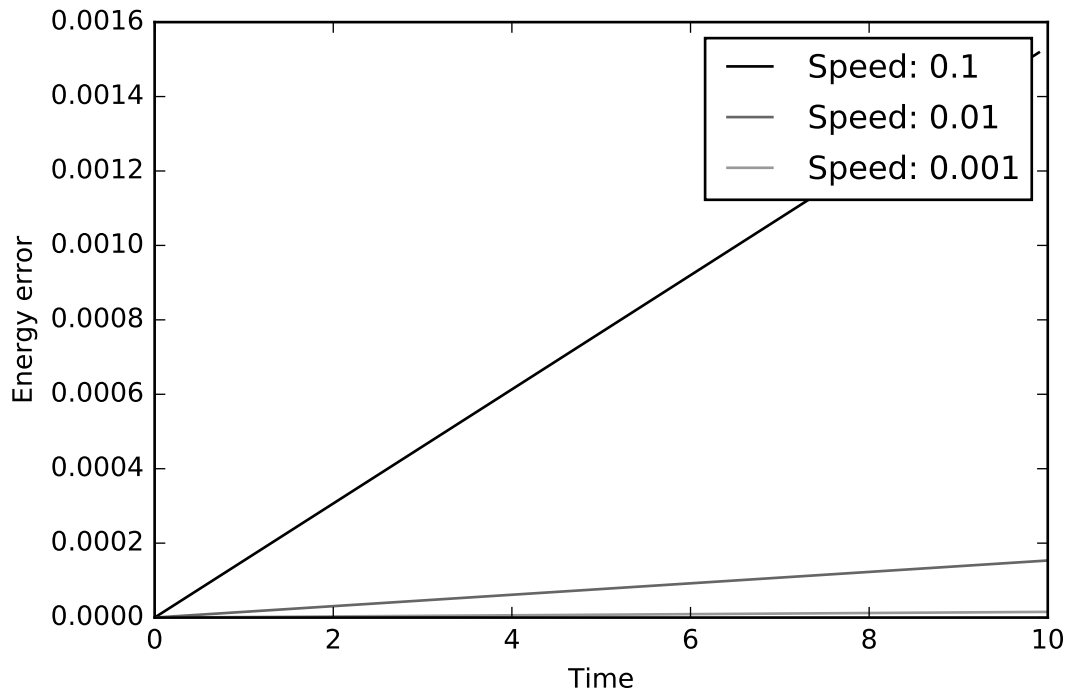


Рис. 3.1: Зависимость погрешности энергии в методе Эйлера от времени

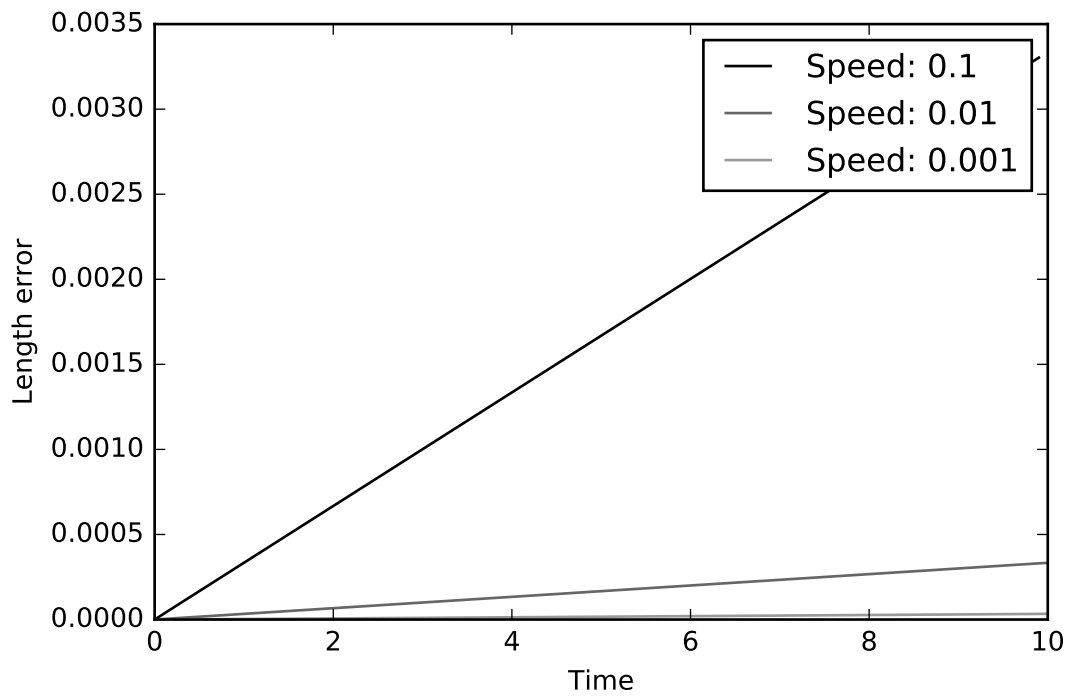


Рис. 3.2: Зависимость погрешности суммы длин векторов в методе Эйлера от времени

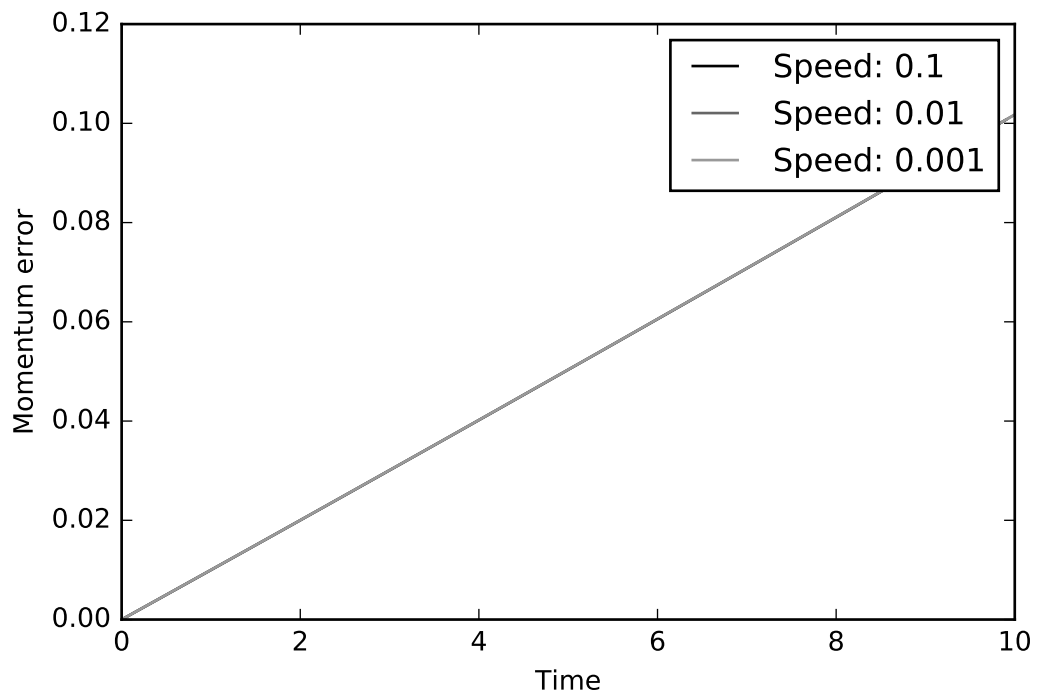


Рис. 3.3: Зависимость погрешности момента в методе Эйлера от времени

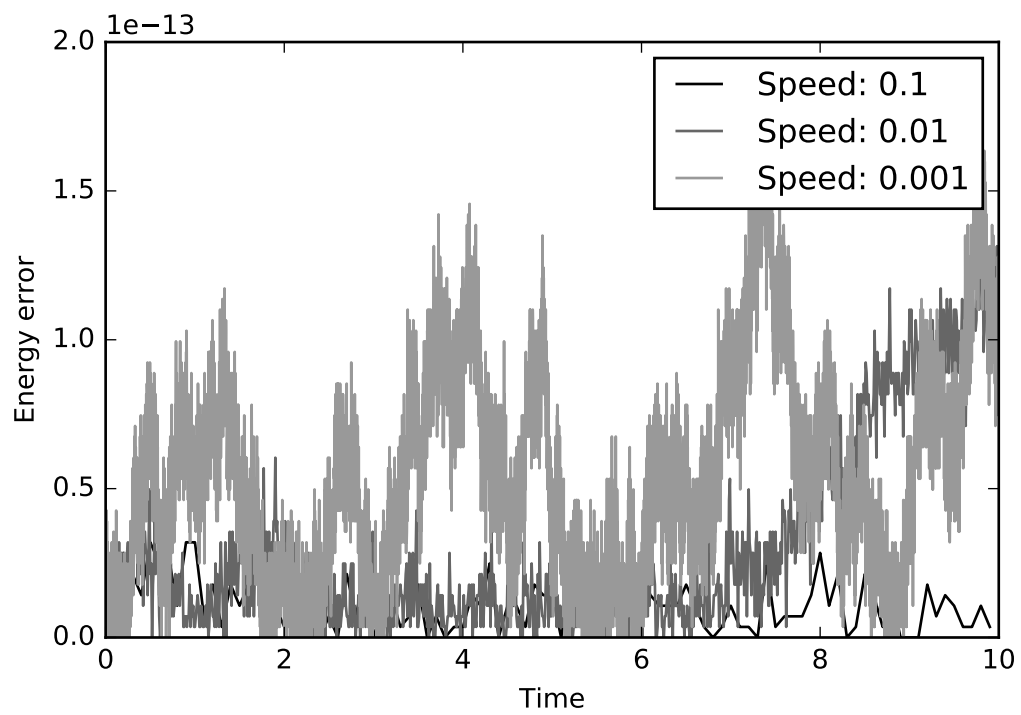


Рис. 3.4: Зависимость погрешности энергии в методе Гаусса-Лежандру-Рунге-Кутта от времени

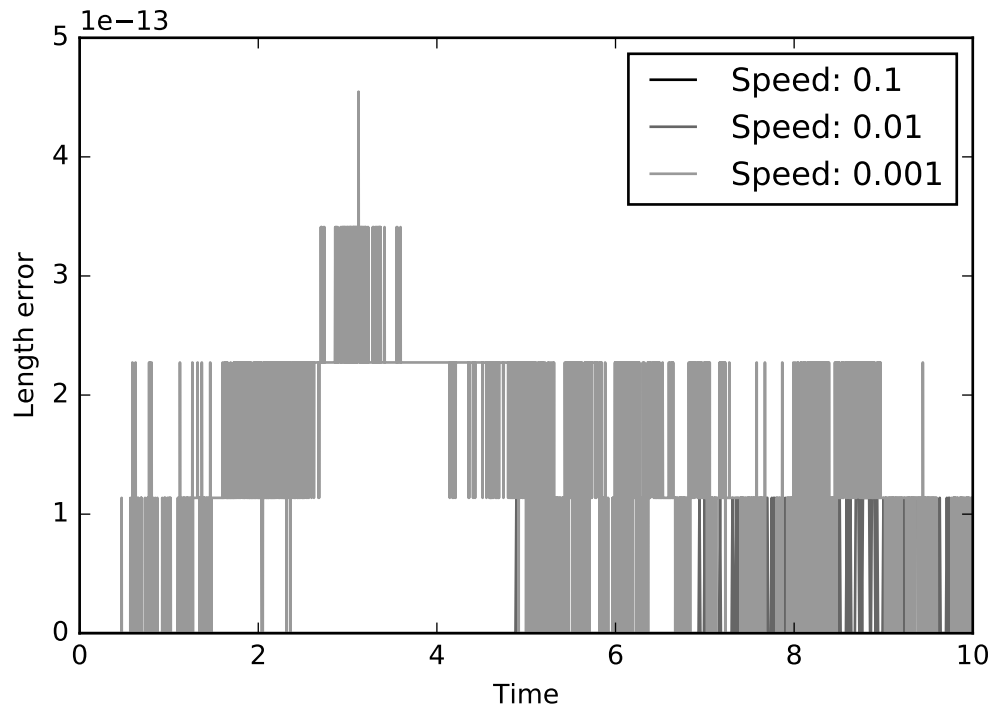


Рис. 3.5: Зависимость погрешности суммы длин векторов в методе Гаусса-Лежандру-Рунге-Кутта от времени

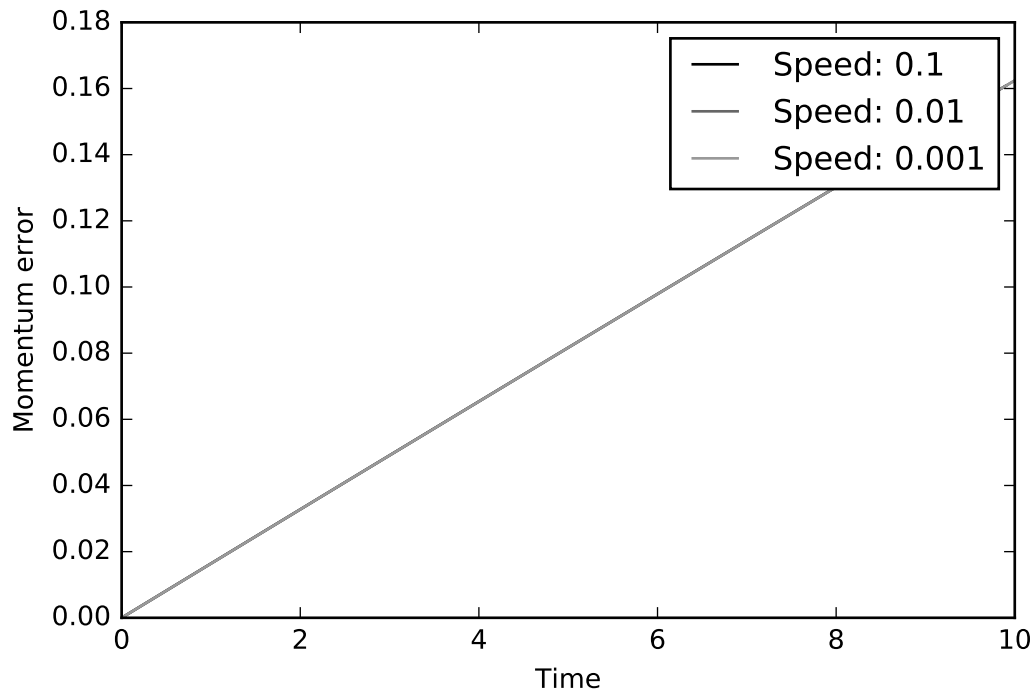


Рис. 3.6: Зависимость погрешности энергии в методе Гаусса-Лежандру-Рунге-Кутта от времени

Список литературы

- Hagemeister, J и др. (2015). «Stability of single skyrmionic bits.» В: *Nature communications* 6, с. 8455. issn: 2041-1723. doi: 10.1038/ncomms9455.
- Liang, Dong, Matthew J Stolt и Song Jin (2016). «Metastable skyrmions: Beat the heat». В: *Nat Phys* 12.1, с. 25—26. issn: 1745-2473.
- Yu, X Z и др. (2010). «Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal». В: *Nature* 465.7300, с. 901—904. issn: 0028-0836.
- Айзерман, М.А. (1980). *Классическая механика*.
- Скроцкий, Г В и Уравнение Ландау Лифшица (1984). «Еще раз об уравнении ландау - лифшица». В: 4.
- Хаар, Д. тер (1974). *Основы Гамильтоновой Механики*.
- «Численные методы» (2005). В:.
- Эйлер, Леонард (1956). *Интегральное Исчисление. Том 1*.