

**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)

22 мая 2016 г.

1 ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

1.1 Симплектический интегратор

Для того чтобы сохранить энергию системы можно воспользоваться симплектическим интегратором. Опираясь на работу Markiewicz (1999, стр. 3), в общем виде итерационная система имеет вид:

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

Рис. 1.1: Таблица для общего вида

$$\begin{aligned}
 S_{n+1} &= S_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(t_n + c_j h, \xi_j) \\
 \xi_j &= y_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} f(t_n + c_j h, \xi_i)
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

В данной работе рассматривается симплектический интегратор Рунге-Кутта второго порядка, он же метод Гаусса-Лежандра-Рунге-Кутта (далее ГЛРК). 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

Для исследуемой модели $f(x)$ есть правая часть уравнения Ландау-Лифшица ???. Тогда итерационная схема 1.1 для исследуемой модели будет записана в виде:

$$S_{n+1} = S_n + h \sum_{j=1}^s b_j \cdot (-\gamma S_n \times H_n^{eff} - \gamma \lambda S_n \times (S_n \times H_n^{eff})) \tag{1.2}$$

$$H_{n,j}^{eff} = S_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} \cdot (-\gamma S_n \times H_{n,j}^{eff} - \gamma \lambda S_n \times (S_n \times H_{n,j}^{eff})) \tag{1.3}$$

Замечание 1. Нужно отметить что в виде 1.2 энергия сохраняться не будет из-за диссипации энергии. Поэтому далее, при проведении эксперимента, для наглядности того, что энергия сохраняется коэффициент диссипации λ следует положить равным 0.

Для вычисления каждого следующего состояния системы необходимо решить нелинейное уравнение 1.3. Для этого можно воспользоваться методом Ньютона.

1.2 Метод Ньютона

2 РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

2.1 Переход к новому базису

Для того, чтобы воспользоваться симплектическим методом нужно представить Гамильтониан в виде:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad (2.1)$$

Для этого в каждом состоянии системы для каждого атома введем пару базисных векторов (\bar{e}_{p_i} и \bar{e}_{q_i}) в касательной плоскости, к единичной сфере с центром в координате атома, в точке пересечения сферы и луча, пущенного из центра сферы в направлении спина атома (\bar{s}_i).

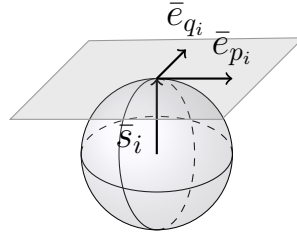


Рис. 2.1: Введение базисных векторов

ЛИТЕРАТУРА

Markiewicz, Daniel W (1999). «Survey on symplectic integrators». В: *Spring* 272, с. 1—13.