

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)

23 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_{s1}	\dots	a_{ss}
	a_{11}	\dots	a_{ss}

Рис. 1.1: Таблица для общего вида

$$S_{n+1} = S_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(t_n + c_j h, \xi_j) \quad (1.1)$$

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

В данной работе рассматривается симплектический интегратор Рунге-Кутты 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:

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

$$S_k = S_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} \cdot \left(-\gamma S_n \times H_k^{eff} - \gamma \lambda S_n \times (S_n \times H_k^{eff}) \right) \quad (1.3)$$

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

Методом Ньютона в обобщенном виде удобно искать численное решение подобной системы:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

Выбрав некоторое начальное приближение $\bar{x}^{[0]}$ следующие приближения находятся из решения системы уравнений:

$$f_i + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_k} (x_k^{[j+1]} - x_k^{[j]}) \quad (1.5)$$

Замечание 2. Для решения системы можно воспользоваться методом би-сопряженных градиентов ??.

Для того чтобы воспользоваться методом ньютона необходимо выделить многомерную функцию f и вычислить ее производную. Перепишем уравнение 1.3 в виде:

$$S_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} \cdot \left(-\gamma S_n \times H_i^{eff} - \gamma \lambda S_n \times (S_n \times H_i^{eff}) \right) - S_j = 0 \quad (1.6)$$

Вычислим $\nabla_{S_n} f$:

$$\begin{aligned} \nabla_{S_k} (S_n \times H_k^{eff}) &= \nabla_{S_k} (S_n \times (A_k S_k + B)) = \\ &= \nabla_{S_k} S_n \times (A_k S_k + B) + S_n \nabla_{S_k} (A_k S_k + B) = \\ &= \delta_{kn} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times (A_k S_k + B) + S_n \times \nabla_{S_k} (A_k S_k + B) = \\ &= \delta_{kn} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times H_k^{eff} + S_n A_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nabla_{S_k} \left(S_n \times \left(S_n \times H_k^{eff} \right) \right) &= \nabla_{S_k} S_n \times \left(S_n \times H_k^{eff} \right) + S_n \times \nabla_{S_k} \left(S_n \times H_k^{eff} \right) = \\ &= \delta_{kn} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \left(S_n \times H_k^{eff} \right) + S_n \times \left(\delta_{kn} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times H_k^{eff} + S_n A_k \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta_{nk} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + h \sum_{i=1}^s \left(a_{ji} \cdot \gamma \left[\delta_{in} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times H_i^{eff} + S_n A_i \right] - \right. \\ \left. - \gamma \lambda \left[S_n \times \left(\delta_{in} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times H_i^{eff} + S_n A_i \right) \right] \right) - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \nabla_{S_k} f \quad (1.7)\end{aligned}$$

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).

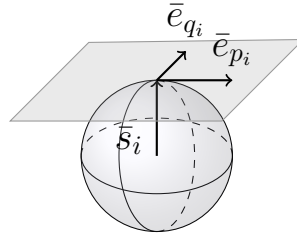


Рис. 2.1: Введение базисных векторов

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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