



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 140 за 2017 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Зипунова Е.В., Иванов А.В.

**Две новые численные
схемы для моделирования
магнетиков**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 140. 18 с. doi:[10.20948/prepr-2017-140](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-140)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-140>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

Е.В. Зипунова, А.В. Иванов

**Две новые численные схемы
для моделирования магнетиков**

Москва — 2017

Зипунова Е.В., Иванов А.В.

e-mail: e.zipunova@gmail.com, aivanov@keldysh.ru

Две новые численные схемы для моделирования магнетиков

В настоящий момент численное моделирование является одним из важнейших инструментов по изучению физических процессов, протекающих в магнитных материалах, и широко востребовано при решении инженерных задач по созданию новых устройств спинтроники. При этом необходима разработка численных схем, адаптированных под определенные постановки задач. В частности численные схемы, оптимальные по темпу счета, для задач с демагнетизацией и без, очевидно, будут принципиально разными. Также желательно, чтобы численные схемы учитывали специфику эволюции магнитных моментов в магнитных материалах. Эволюция магнитных моментов точнее всего описывается как вращение с непостоянной скоростью вокруг движущейся оси. В данной работе приведены перспективные численные схемы, в том числе на основе операторов поворота, и результаты сравнения с традиционными численными схемами Рунге–Кутты второго и четвертого порядков.

Ключевые слова: уравнение Ландау–Лифшица, метод Рунге–Кутты, численное моделирование

Elizaveta Vyacheslavovna Zipunova, Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: e.zipunova@gmail.com, aivanov@keldysh.ru

Two new numerical schemes for the modeling of magnets

At the moment, numerical simulation is one of the most important tools for studying the physical processes taking place in magnetic materials and is in great demand when solving engineering problems for creating new spintronics devices. At the same time, it is necessary to develop numerical schemes that are adapted to certain tasks. In particular, numerical schemes that are optimal in terms of the count rate for problems with demagnetization and without it, obviously, will be fundamentally different. It is also desirable for numerical schemes to take into account the specificity of the evolution of magnetic moments in magnetic materials. The evolution of the magnetic moments is most accurately described by a rotation with a non-constant velocity around the moving axis. In this paper, prospective numerical schemes, including those that are based on rotation operators, and comparison results with traditional Runge–Kutta numerical schemes of the second and fourth orders are presented.

Keywords: Landau–Lifshitz equation, Runge–Kutta method, numerical simulation

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 15-01-05052.

Содержание

1	Введение	3
2	Физико–математическая модель	4
3	Выбор безразмерной системы единиц	5
4	Описание традиционных численных схем	5
5	Оператор поворота	7
6	Схема Рунге–Кутты в поворотах 2-го порядка (Rot2)	8
7	Схемы на основе ряда Тейлора	11
8	Результаты тестов	13
9	Выводы	17
	Список литературы	17

1. Введение

В настоящий момент численное моделирование является одним из важнейших инструментов по изучению физических процессов, протекающих в магнитных материалах, и широко востребовано при решении инженерных задач по созданию новых устройств спинтроники.

Различные подходы к моделированию эволюции распределения намагниченности («атом–в–атом» [1], микромагнитный [2, 3] и макроспиновый) сводятся в итоге к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений Ландау–Лифшица. За редким исключением, такая система может быть решена только численно. Как правило, для этого используют численные схемы на основе метода Рунге–Кутты [4, 5], реже метода Адамса*. Задача является жесткой, и, соответственно, для получения адекватного ответа расчет приходится вести с достаточно маленьким шагом по времени (много меньше периода прецессии), что значительно замедляет расчет.

При этом необходима разработка численных схем, адаптированных под определенные постановки задач. В частности, численные схемы, оптимальные по темпу счета, для задач с демагнетизацией и без, очевидно, будут принципиально разными: расчет поля демагнетизации — крайне дорогая операция с вычислительной точки зрения [6, 7], что требует минимизации числа стадий численной схемы и максимизации шага по времени.

Также желательно, чтобы численные схемы учитывали специфику эволюции магнитных моментов в магнитных материалах, которая точнее всего описывается как вращение с непостоянной скоростью вокруг движущейся оси.

В данной работе приведены перспективные численные схемы, в том числе на основе операторов поворота, и результаты сравнения с традиционными численными схемами Рунге–Кутты второго и четвертого порядков.

*В [5] показано, что метод Адамса не всегда применим при решении подобных задач из-за неустойчивости.

2. Физико–математическая модель

При моделировании магнитного материала «атом–в–атом» считается, что магнитный момент отдельного атома задаётся вектором постоянной длины, который может ориентироваться произвольным образом. Эволюция магнитного момента i -го атома описывается уравнением Ландау–Лифшица:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{M}_i}{dt} &= -\gamma [\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \frac{\alpha\gamma}{\mu_s} [\mathbf{M}_i \times [\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\tilde{\mathbf{S}}\sqrt{\frac{\alpha T k_B}{\mu_s}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= -\nabla_{\mathbf{M}_i} W, \quad W = W^{\text{exch}} + W^{\text{anis}} + W^{\text{ext}} + W^{\text{dip}}, \\ W^{\text{exch}} &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad \mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j / \mu_s, \\ W^{\text{anis}} &= -\sum_i K (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a})^2, \quad \mathbf{H}^{\text{anis}} = 2K / \mu_s (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a}, \\ W^{\text{ext}} &= -\sum_i (\mathbf{M}_i \cdot \mathbf{H}^{\text{ext}}), \\ W^{\text{dip}} &= -\frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{3(\mathbf{M}_j \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i))(\mathbf{M}_i \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i))}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|^5} - \frac{\mathbf{M}_i \mathbf{M}_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|^3} \right), \end{aligned}$$

где \mathbf{M}_i — намагниченность i -го атома, \mathbf{m}_i — единичный вектор направления намагниченности i -го атома, μ_s — величина магнитного момента ($\mathbf{M}_i = \mu_s \mathbf{m}_i$), γ — гиромагнитное отношение, α — безразмерный параметр затухания, \mathbf{H}^{eff} — эффективное магнитное поле, $\tilde{\mathbf{S}}$ — случайный источник единичной интенсивности с нормальным распределением, сохраняющий модуль \mathbf{M}_i и обеспечивающий в равновесном случае больцмановское распределение в ансамбле магнитных моментов, W^{exch} — энергия обменного взаимодействия, W^{anis} — энергия анизотропии, W^{ext} — энергия от взаимодействия с внешним однородным полем, W^{dip} — энергия диполь–дипольного взаимодействия, J_{ij} — обменный интеграл между частицами i и j , K — коэффициент анизотропии, \mathbf{a} — направление анизотропии, \mathbf{R}_i — координата i -го атома, T — температура системы, k_B — постоянная Больцмана.

Обменное взаимодействие обусловлено наложением электронных облаков между двумя соседними магнитными атомами. Соответственно, при подсчете обменного поля суммирование ведется только по ближайшим атомам. Анизотропию вводят в уравнение для учета формы частиц и кристаллической решетки. Наиболее часто используются одноосная [8] (линейная анизотропия типа «легкая ось») и кубическая [9] формы анизотропии. В данной работе рассматривается линейная анизотропия типа «легкая ось» и не учитывается диполь–дипольное взаимодействие.

3. Выбор безразмерной системы единиц

За единицу магнитного момента принята величина магнитного момента атома $\Delta_M = \mu_s$. За единицу энергии принят модуль обменного интеграла между ближайшими соседями $\Delta_W = |J|$. Соответственно, за единицу поля принято отношение единицы энергии к модулю намагниченности атома $\Delta_H = \Delta_W/\Delta_M = |J|/\mu_s$. За единицу времени принимается обратная частота прецессии магнитного момента в единичном поле $\Delta_t = \frac{1}{\gamma\Delta_H}$.

Уравнение Ландау–Лифшица в выбранной безразмерной системе единиц имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} &= -\gamma^* [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\tilde{\mathbf{S}}\sqrt{\alpha T^*}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{exch}} &= \sum_j J_{ij}^* \mathbf{m}_j, \quad \mathbf{H}_i^{\text{anis}} = 2K^* (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}), \end{aligned}$$

где $J_{ij}^* = J_{ij}/|J|$, $K^* = K/|J|$, $D^* = \mu_s^2/a^3|J|$, $\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i/a$, $T^* = k_B T/|J|\mu_s$, $\gamma^* = 1$ для учета прецессии и $\gamma^* = 0$, когда прецессия не моделируется. Далее все уравнения и выкладки будут приводиться в выбранной системе единиц.

4. Описание традиционных численных схем

Для численного моделирования магнитного материала «атом–в–атом» в данной работе рассматривались явные численные схемы. Для сравнения с разработанными численными методами были выбраны два метода Рунге–Кутты (RK2, RK4).

Систему уравнений Ландау–Лифшица, записанных для каждого атома магнитного материала, можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \mathbf{f}(t, \mathbf{M}),$$

где $\mathbf{M} = (\dots \mathbf{m}_{i-1}, \mathbf{m}_i, \mathbf{m}_{i+1} \dots)^T$ и

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{M}) = \begin{pmatrix} \vdots \\ -\gamma[\mathbf{m}_{i-1} \times \mathbf{H}_{i-1}^{\text{eff}}(\mathbf{M})] - \alpha[\mathbf{m}_{i-1} \times [\mathbf{m}_{i-1} \times \mathbf{H}_{i-1}^{\text{eff}}(\mathbf{M})]] \\ -\gamma[\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\mathbf{M})] - \alpha[\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\mathbf{M})]] \\ -\gamma[\mathbf{m}_{i+1} \times \mathbf{H}_{i+1}^{\text{eff}}(\mathbf{M})] - \alpha[\mathbf{m}_{i+1} \times [\mathbf{m}_{i+1} \times \mathbf{H}_{i+1}^{\text{eff}}(\mathbf{M})]] \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

4.1. Метод Рунге–Кутты 2-го порядка (RK2). В численной схеме RK2 значение магнитного момента на следующем шаге по времени вычисляется следующим образом:

$$\mathbf{M}^{n+1} = \mathbf{M}^n + h\mathbf{f}\left(t^n + \frac{h}{2}, \mathbf{M}^n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(t^n, \mathbf{M}^n)\right).$$

Доказан порядок аппроксимации второго порядка. Применительно к уравнению Ландау–Лифшица для i -го атома:

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \mathbf{m}_i^n - h\gamma \left[\tilde{\mathbf{m}}_i \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}) \right] - h\alpha \left[\tilde{\mathbf{m}}_i \times \left[\tilde{\mathbf{m}}_i \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}) \right] \right],$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{M}} &= (\dots \tilde{\mathbf{m}}_{i-1}, \tilde{\mathbf{m}}_i, \tilde{\mathbf{m}}_{i+1} \dots)^T, \\ \tilde{\mathbf{m}}_i &= \mathbf{m}_i^n - \frac{h}{2}\gamma [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i(\mathbf{M}^n)] - \frac{h}{2}\alpha [\mathbf{m}_i^n \times [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i(\mathbf{M}^n)]]. \end{aligned}$$

4.2. Классический метод Рунге–Кутты 4-го порядка (RK4). В численной схеме RK4 значение магнитного момента на следующем шаге по времени вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{n+1} &= \mathbf{M}^n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4), \\ \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t^n, \mathbf{M}^n), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}\left(t^n + \frac{h}{2}, \mathbf{M}^n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}\left(t^n + \frac{h}{2}, \mathbf{M}^n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= \mathbf{f}(t^n + h, \mathbf{M}^n + h\mathbf{k}_3). \end{aligned}$$

Доказана аппроксимация четвертого порядка. Применительно к уравнению Ландау–Лифшица для i -го атома:

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \mathbf{m}_i^n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_{i1} + 2\mathbf{k}_{i2} + 2\mathbf{k}_{i3} + \mathbf{k}_{i4}),$$

где $\mathbf{k}_{i1}, \mathbf{k}_{i2}, \mathbf{k}_{i3}, \mathbf{k}_{i4}$ определяются следующим образом. Первая стадия:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{i1} &= -\gamma [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i(\mathbf{M}^n)] - \alpha [\mathbf{m}_i^n \times [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i(\mathbf{M}^n)]], \\ \tilde{\mathbf{m}}_{i1} &= \mathbf{m}_i^n - \frac{h}{2}\mathbf{k}_{i1}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_1 = (\dots \tilde{\mathbf{m}}_{(i-1)1}, \tilde{\mathbf{m}}_{i1}, \tilde{\mathbf{m}}_{(i+1)1} \dots)^T. \end{aligned}$$

Вторая стадия:

$$\begin{aligned}\mathbf{k}_{i2} &= -\gamma \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i1} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_1) \right] - \alpha \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i1} \times \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i1} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_1) \right] \right], \\ \tilde{\mathbf{m}}_{i2} &= \mathbf{m}_i^n - \frac{h}{2} \mathbf{k}_{i2}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_2 = (\dots \tilde{\mathbf{m}}_{(i-1)2}, \tilde{\mathbf{m}}_{i2}, \tilde{\mathbf{m}}_{(i+1)2} \dots)^T.\end{aligned}$$

Третья стадия:

$$\begin{aligned}\mathbf{k}_{i3} &= -\gamma \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i2} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_2) \right] - \alpha \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i2} \times \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i2} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_2) \right] \right], \\ \tilde{\mathbf{m}}_{i3} &= \mathbf{m}_i^n - h \mathbf{k}_{i3}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_3 = (\dots \tilde{\mathbf{m}}_{(i-1)3}, \tilde{\mathbf{m}}_{i3}, \tilde{\mathbf{m}}_{(i+1)3} \dots)^T.\end{aligned}$$

Четвертая стадия:

$$\mathbf{k}_{i4} = -\gamma \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i3} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_3) \right] - \alpha \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i3} \times \left[\tilde{\mathbf{m}}_{i3} \times \mathbf{H}_i(\tilde{\mathbf{M}}_3) \right] \right].$$

5. Оператор поворота

Чтобы составить численную схему из поворотов, для начала рассмотрим свойства поворотов. Введем матрицу поворота $\Xi(\mathbf{n}, \delta)$ вокруг произвольного единичного вектора \mathbf{n} на произвольный угол δ против часовой стрелки в правой системе координат, если смотреть против направления \mathbf{n} :

$$\begin{aligned}\Xi(\mathbf{n}, \delta) &= \\ &= \begin{pmatrix} n_x^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta & n_x n_y(1 - \cos \delta) - n_z \sin \delta & n_x n_z(1 - \cos \delta) + n_y \sin \delta \\ n_x n_y(1 - \cos \delta) + n_z \sin \delta & n_y^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta & n_y n_z(1 - \cos \delta) - n_x \sin \delta \\ n_x n_z(1 - \cos \delta) - n_y \sin \delta & n_y n_z(1 - \cos \delta) + n_x \sin \delta & n_z^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Введем бинарный оператор поворота \circlearrowleft , поворот некоторого вектора \mathbf{a} вокруг единичного вектора \mathbf{n} на угол δ будем обозначать как $\mathbf{a} \circlearrowleft \delta \mathbf{n}$:

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \delta \mathbf{n} \equiv \Xi(\mathbf{n}, \delta) \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cos \delta - [\mathbf{a} \times \mathbf{n}] \sin \delta + \mathbf{n}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})(1 - \cos \delta).$$

Если δ — малая величина, то поворот вокруг вектора \mathbf{n} на угол δ можно представить в виде ряда Тейлора:

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \delta \mathbf{n} = \mathbf{a} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{(2n+1)!} \delta^{2n+1} [\mathbf{a} \times \mathbf{n}] + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+2)!} \delta^{2n+2} [[\mathbf{a} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{n}].$$

Очевидно, оператор \circlearrowleft некоммутативен

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b} \neq \mathbf{b} \circlearrowleft \mathbf{a},$$

неассоциативен

$$(\mathbf{a} \circ \mathbf{b}) \circ \mathbf{c} \neq \mathbf{a} \circ (\mathbf{b} \circ \mathbf{c})$$

и недистрибутивен слева

$$\mathbf{a} \circ (\mathbf{b} + \mathbf{c}) \neq (\mathbf{a} \circ \mathbf{b}) + (\mathbf{a} \circ \mathbf{c}).$$

6. Схема Рунге–Кутты в поворотах 2-го порядка (Rot2)

Существует множество способов ввести вращения в численную схему из сумм. В случае эволюции магнитных моментов самый простой подход — представить эволюцию магнитного момента как вращение вокруг постоянного вектора. Уравнение Ландау–Лифшица можно записать как

$$\frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} = -[\mathbf{m}_i \times \mathbf{K}_i(t, \mathbf{M})], \quad (1)$$

где $\mathbf{M} = (\dots \mathbf{m}_{i-1}, \mathbf{m}_i, \mathbf{m}_{i+1} \dots)^T$. Известно, что если $\mathbf{K}_i(t, \mathbf{M}) = \mathbf{K}_i = \text{const}$, то уравнение 1 описывает вращение вокруг вектора \mathbf{K}_i с угловой скоростью $|\mathbf{K}_i|$ [10, 11]. Тогда, повторяя схему Рунге–Кутты 2-го поворота, получим схему в поворотах:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_i^{n+1} &= \mathbf{m}_i^n \circ (h_1 \mathbf{K}_{i1}) \circ (h_2 \mathbf{K}_{i2}), \\ \mathbf{K}_{i1} &= \mathbf{K}_i(t^n, \mathbf{M}^n), \\ \mathbf{K}_{i2} &= \mathbf{K}_i \left(t^n + h'_2, \begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{m}_{(i-1)}^n \circ (h'_2 K_{(i-1)1}) \\ \mathbf{m}_i^n \circ (h'_2 K_{i1}) \\ \mathbf{m}_{(i+1)}^n \circ (h'_2 K_{(i+1)1}) \\ \vdots \end{pmatrix} \right). \end{aligned}$$

Значения шагов по времени h_1, h_2, h'_2 определяются из условий аппроксимации.

6.1. Проверка аппроксимации. Получим ограничения на шаги по времени h_1, h_2, h_3 из условия аппроксимации. Получить условия, обеспечивающие аппроксимацию, в общем случае слишком сложно, поэтому рассмотрим частный случай.

В статье [11] описано множество постановок задач с аналитическим решением, достаточно простых, чтобы использовать для проверки аппроксимации. При моделировании магнетика наибольшее влияние оказывает обменное взаимодействие, поэтому рассмотрим ферромагнитный образец кубической формы с периодическими границами и объемноцентрированной кристаллической решеткой. Атомы ОЦК решетки разбиваются на две подрешетки: атомы в центрах ячеек

и в узлах ячеек. В начальный момент времени намагниченность каждой подрешетки пространственно однородна. Атомы одной подрешетки эквивалентны между собой и могут быть представлены как один вектор: $\mathbf{m}_{1,2}$. Тогда эволюция системы будет описываться системой уравнений Ландау–Лифшица:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1] - \alpha[\mathbf{m}_1 \times [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1]], & \mathbf{H}_1 = Jn\mathbf{m}_2, \\ \frac{d\mathbf{m}_2}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_2 \times \mathbf{H}_2] - \alpha[\mathbf{m}_2 \times [\mathbf{m}_2 \times \mathbf{H}_2]], & \mathbf{H}_2 = Jn\mathbf{m}_1, \end{cases}$$

где n — количество ближайших соседей атома. Для данной задачи можно опустить множитель nJ или учитывать его в коэффициентах α и γ . Учитывая, что модули магнитных моментов единичные, для удобства можно заменить скалярное произведение магнитных моментов на косинус угла между ними $(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2) = \cos \varphi$. Определим вторую производную для \mathbf{m}_1 :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\mathbf{m}_1}{dt^2} = & \mathbf{m}_1(-\gamma^2 - \gamma^2 \cos \varphi + 2\alpha^2 - 3\alpha^2 \sin^2 \varphi) + \mathbf{m}_2(\gamma^2 \cos \varphi + \gamma^2 - 2\alpha^2 \cos \varphi) + \\ & + [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2](3\alpha\gamma \cos \varphi + \alpha\gamma). \end{aligned}$$

Пусть в записи \mathbf{K}_{ij} и \mathbf{m}_{ij} коэффициент i обозначает номер подрешетки, j — номер стадии. Опустим коэффициент n в формуле \mathbf{m}_1^n . Схема для первой подрешетки записывается как:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1^{n+1} &= \mathbf{m}_1 \circlearrowleft h_1 \mathbf{K}_{11} \circlearrowleft h_2 \mathbf{K}_{12}, \\ \mathbf{K}_{11} &= \mathbf{K}_1(\mathbf{m}_2), \quad \mathbf{K}_{12} = \mathbf{K}_1(\mathbf{m}_2 \circlearrowleft h'_2 \mathbf{K}_{11}). \end{aligned}$$

Тогда первая стадия выражается как:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{11} &= \gamma\mathbf{m}_2 + \alpha[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2], \quad \mathbf{K}_{21} = \gamma\mathbf{m}_1 + \alpha[\mathbf{m}_2 \times \mathbf{m}_1], \\ \mathbf{m}_{21} &= \mathbf{m}_2 \circlearrowleft h'_2 \mathbf{K}_{21} = \mathbf{m}_2 - h'_2 \mathbf{m}_2 \times \mathbf{K}_{21} + \frac{h'^2_2}{2} [[\mathbf{m}_2 \times \mathbf{K}_{21}] \times \mathbf{K}_{21}] + O(h'^3_2), \\ \mathbf{m}_{11} &= \mathbf{m}_1 \circlearrowleft h'_2 \mathbf{K}_{11} = \mathbf{m}_1 - h'_2 \mathbf{m}_1 \times \mathbf{K}_{11} + \frac{h'^2_2}{2} [[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{K}_{11}] \times \mathbf{K}_{11}] + O(h'^3_2). \end{aligned}$$

Запишем \mathbf{m}_{21} до первого порядка по h :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{11} &= \mathbf{m}_1 - \gamma h'_2 [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] - \alpha h'_2 [\mathbf{m}_1 \times [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2]] + O(h^2), \\ \mathbf{m}_{21} &= \mathbf{m}_2 - \gamma h'_2 [\mathbf{m}_2 \times \mathbf{m}_1] - \alpha h'_2 [\mathbf{m}_2 \times [\mathbf{m}_2 \times \mathbf{m}_1]] + O(h^2). \end{aligned}$$

Поле для второй стадии и первой подрешетки до первого порядка по h :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{12} &= \gamma\mathbf{m}_{21} + \alpha[\mathbf{m}_{11} \times \mathbf{m}_{21}] = \\ &= \gamma\mathbf{m}_2 + \alpha[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] + h'_2 \left(2\alpha\gamma\mathbf{m}_1 + \alpha\gamma\mathbf{m}_1 \cos \varphi - \alpha\gamma\mathbf{m}_2 - 2\alpha\gamma\mathbf{m}_2 \cos \varphi + \gamma^2[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] - \right. \\ &\quad \left. - 2\alpha^2[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] \cos \varphi \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

Заключительная стадия состоит из двух поворотов. Первый поворот:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_1 &= \mathbf{m}_1 \circlearrowleft h_1 \mathbf{K}_{11} = \mathbf{m}_1 - h_1 [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{K}_{11}] + \frac{h_1^2}{2} [[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{K}_{11}] \times \mathbf{K}_{11}] + O(h^3) = \\ &= \mathbf{m}_1 - \gamma h_1 [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] - \alpha h_1 [\mathbf{m}_1 \times [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2]] + \frac{h_1^2}{2} \left(\gamma^2 \mathbf{m}_2 \cos \varphi - \gamma^2 \mathbf{m}_1 + \right. \\ &\quad \left. + \alpha \gamma [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] \cos \varphi - \alpha^2 \mathbf{m}_1 \sin^2 \varphi \right) + O(h^3),\end{aligned}$$

второй поворот:

$$\mathbf{m}_1 \circlearrowleft h_1 \mathbf{K}_{11} \circlearrowleft h_2 \mathbf{K}_{12} = \mathbf{M}_1 \circlearrowleft h_2 \mathbf{K}_{12} = \mathbf{M}_1 - h_2 [\mathbf{M}_1 \times \mathbf{K}_{12}] + \frac{h_2^2}{2} [[\mathbf{M}_1 \times \mathbf{K}_{12}] \times \mathbf{K}_{12}] + O(h^3).$$

Рассмотрим отдельно векторные произведения до первого порядка по h :

$$\begin{aligned}[\mathbf{M}_1 \times \mathbf{K}_{12}] &= \gamma [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] + \alpha \mathbf{m}_1 \cos \varphi - \alpha \mathbf{m}_2 + \\ &\quad + h_1 \left((\gamma^2 + \alpha^2 \sin^2 \varphi) \mathbf{m}_1 - \gamma^2 \mathbf{m}_2 \cos \varphi - \alpha \gamma [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] \cos \varphi \right) + \\ + h_2' &\left(\mathbf{m}_1 (\gamma^2 \cos \varphi - 2\alpha^2 \cos^2 \varphi) + \mathbf{m}_2 (2\alpha^2 \cos \varphi - \gamma^2) + [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] (-\alpha \gamma - 2\alpha \gamma \cos \varphi) \right) + \\ &\quad + O(h^2).\end{aligned}$$

Двойное векторное произведение до нулевого порядка по h записывается как

$$[[\mathbf{M}_1 \times \mathbf{K}_{12}] \times \mathbf{K}_{12}] = \mathbf{m}_1 (-\gamma^2 - \alpha^2 \sin^2 \varphi) + \mathbf{m}_2 \gamma^2 \cos \varphi + \alpha \gamma [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] \cos \varphi + O(h).$$

Подставим в уравнение для второго поворота и приравняем соответствующие члены разложения эволюции магнитных моментов из уравнения Ландау–Лифшица и разложения двух поворотов схемы.

Отсюда получаем условие для первого порядка по h :

$$h = h_1 + h_2.$$

Запишем равенства для второго порядка по h при \mathbf{m}_1 , $\mathbf{m}_1 \cos \varphi$, \mathbf{m}_2 , $\mathbf{m}_2 \cos \varphi$, $[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2]$, $[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2] \cos \varphi$, $\mathbf{m}_1 \sin^2 \varphi$ соответственно, получим систему уравнений для шагов по времени h , $h_{1,2}$, h_2' :

$$\begin{cases} \frac{1}{2}(h_1 + h_2)^2 = \frac{h^2}{2}, \\ h_2' h_2 = \frac{h^2}{2}. \end{cases}$$

Из всех возможных удовлетворяющих системе наборов значений шагов нами был выбран следующий:

$$h_1 = h_2 = \frac{1}{2}h, \quad h'_2 = h.$$

В итоге схема принимает вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_i^{n+1} &= \mathbf{m}_i^n \circlearrowleft \left(\frac{1}{2}h\mathbf{K}_{i1} \right) \circlearrowleft \left(\frac{1}{2}h\mathbf{K}_{i2} \right), \\ \mathbf{K}_{i1} &= \mathbf{K}_i(t^n, \mathbf{M}^n), \\ \mathbf{K}_{i2} &= \mathbf{K}_i \left(t^n + h, \begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{m}_{(i-1)}^n \circlearrowleft (hK_{(i-1)1}) \\ \mathbf{m}_i^n \circlearrowleft (hK_{i1}) \\ \mathbf{m}_{(i+1)}^n \circlearrowleft (hK_{(i+1)1}) \\ \vdots \end{pmatrix} \right). \end{aligned}$$

7. Схемы на основе ряда Тейлора

Определим сложный поворот магнитного момента \mathbf{m} вокруг поля \mathbf{H} . Разложим \mathbf{m}^{n+1} в ряд Тейлора до D_m порядка:

$$\mathbf{m}^{n+1} = \sum_{n=0}^{D_m} \frac{h^n}{n!} \frac{d^n \mathbf{m}}{dt^n}.$$

Производные $\frac{d^n \mathbf{m}}{dt^n}$ можно вычислить рекурсивно, дифференцируя обе части уравнения Ландау–Лифшица:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}}{dt} &= -\alpha[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \gamma[\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}]], \\ \frac{d^n \mathbf{m}}{dt^n} &= -\alpha \frac{d^{n-1}[\mathbf{m} \times \mathbf{H}]}{dt^{n-1}} - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-1)!}{k!(n-k-1)!} \left[\frac{d^{n-k-1} \mathbf{m}}{dt^{n-k-1}} \times \frac{d^k [\mathbf{m} \times \mathbf{H}]}{dt^k} \right], \\ \frac{d^n [\mathbf{m} \times \mathbf{H}]}{dt^n} &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{n!}{k!(n-k)!} \left[\frac{d^{n-k} \mathbf{m}}{dt^{n-k}} \times \frac{d^k \mathbf{H}}{dt^k} \right]. \end{aligned}$$

Производные поля можно вычислить разными способами.

Вычислив на одну производную больше, можно оценить ошибку при выбранном шаге и, при необходимости, уменьшить шаг. С помощью такого подхода можно получить схему с адаптивным шагом по времени.

7.1. Вычисление поля с использованием уравнения Ландау–Лифшица (Т4).

Производные поля вычисляются через производные магнитного момента того же порядка. Для i -го атома производные записываются как:

$$\mathbf{H}_i = \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j + 2K (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, \quad \frac{d^k \mathbf{H}_i}{dt^k} = \sum_j J_{ij} \frac{d^k \mathbf{m}_j}{dt^k} + 2K \left(\frac{d^k \mathbf{m}_i}{dt^k} \cdot \mathbf{a} \right) \mathbf{a}.$$

Таким образом, на каждой стадии вычисляется следующая производная магнитных моментов и поля для всего образца. Порядок аппроксимации зависит от количества стадий. В данной работе будет рассматриваться схема с четырьмя стадиями.

7.2. Экстраполяция поля полиномом Ньютона (ТЕ4). Экстраполируем поле в любой точке с помощью полинома Ньютона. В данной работе выбран кубический полином Ньютона, обеспечивающий три производные:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(t) = & \mathbf{H}_0 + q(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0) + \frac{q(q-1)}{2}(\mathbf{H}_2 - 2\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_0) + \\ & + \frac{q(q-1)(q-2)}{6}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0), \\ q = & (t - t_0)/h, \end{aligned}$$

где $\mathbf{H}_{0,1,2,3}$ — значения поля с текущего поля и предыдущих трех. Тогда вычислим производные:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{H}(t)}{dt} = & \frac{1}{h}(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0) + \frac{2q-1}{2h}(\mathbf{H}_2 - 2\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_0) + \\ & + \frac{3q^2 - 6q + 2}{6h}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0), \\ \frac{d^2\mathbf{H}(t)}{dt^2} = & \frac{2}{2h^2}(\mathbf{H}_2 - 2\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_0) + \frac{6q-6}{6h^2}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0), \\ \frac{d^3\mathbf{H}(t)}{dt^3} = & \frac{6}{6h^3}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0). \end{aligned}$$

В данном случае нас интересует производная в точке $t_0 + 3h$:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{H}(t)}{dt} = & \frac{1}{h}(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0) + \frac{5}{2h}(\mathbf{H}_2 - 2\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_0) + \frac{11}{6h}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0), \\ \frac{d^2\mathbf{H}(t)}{dt^2} = & \frac{1}{h^2}(\mathbf{H}_2 - 2\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_0) + \frac{2}{h^2}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0), \\ \frac{d^3\mathbf{H}(t)}{dt^3} = & \frac{1}{h^3}(\mathbf{H}_3 - 3\mathbf{H}_2 + 3\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0). \end{aligned}$$

Соответственно, вычисление трех производных для всего образца происходит в одну стадию. Порядок аппроксимации зависит от порядка полинома, в данном случае четвертого порядка. В начале расчета, чтобы получить значения $\mathbf{H}_{0,1,2}$, первые три итерации рассчитываются схемой Рунге–Кутты 4-го порядка. Схема может быть неустойчива при больших значениях шага по времени.

8. Результаты тестов

В работе [11] описан ряд тестов для проверки работы разных компонент программного кода. Из них выбраны только те, для которых можно посчитать и сравнить ошибку — тесты на моделирование динамики системы: учет постоянного внешнего поля в динамике одного магнитного момента (рис. 1 *а, в, д*), учет анизотропии в динамике одного магнитного момента (рис. 1 *б, з, е*), учет обменного взаимодействия в кубе с периодическими границами с ОЦК решеткой (рис. 2 *а, в, д*) и с неполной ГЦК решеткой (рис. 2 *б, з, е*). На рисунках 1, 2 изображена зависимость ошибки ε от шага по времени h для всех схем RK4, RK2, Rot2, T4, TE4 для разных постановок задач. Ошибка считалась как максимальный по времени ($t_{\max} = 100$) модуль разницы между средним по образцу магнитным моментом соответствующей подрешетки, полученным с помощью численного моделирования, и магнитным моментом, полученным из аналитического решения.

Как можно судить по рисункам (1, 2), порядок зависимости ошибки расчета от шага по времени для рассмотренных постановок совпадает с заявленным порядком аппроксимации: для RK2 и Rot2 — второй, для RK4, T4 и TE4 — четвертый.

Для постановок с обменным взаимодействием (рис. 2) результаты схем T4 и RK4 совпали. Пусть наибольшая допустимая ошибка равна $\varepsilon_{\max} = 10^{-2}$. Тогда из рисунка 2 видно, что область актуальных шагов для схем T4 и RK4 определяется неравенством $h < 0.1$. Как видно на рисунке 1, при шаге $h < 0.1$ схемы T4 и RK4 дают ошибку, сравнимую с ошибкой округления. Таким образом, для актуальных значений шага схемы T4 и RK4 показывают одинаково хорошие результаты.

Как и предполагалось при построении схемы, Rot2 моделирует прецессию на порядок лучше, чем RK2 (рис. 1 *в, з, д, е, 2 в, з, д, е*), но моделирование диссипации осталось на том же уровне (рис. 1 *а, б, 2 а, б*).

Сравним результаты тестирования для схем TE4 и RK4. В большинстве случаев ошибка у TE4 значительно больше, чем у схемы RK4 (рис. 1 *б, з, е, 2 в, з, д, е*), или немного меньше (рис. 1 *в, д*). Резкий рост ошибки на рисунках 2 *а, б* связан с неустойчивостью схемы TE4. В итоге, TE4 не даёт самый точный расчет. В то же время, в отличие от других, в схеме TE4 расчет значения эффективного поля за итерацию происходит только один раз. В случае расчетов для задач с демагнетизацией это даёт схеме TE4 большое преимущество в темпе счета перед

другими схемами.

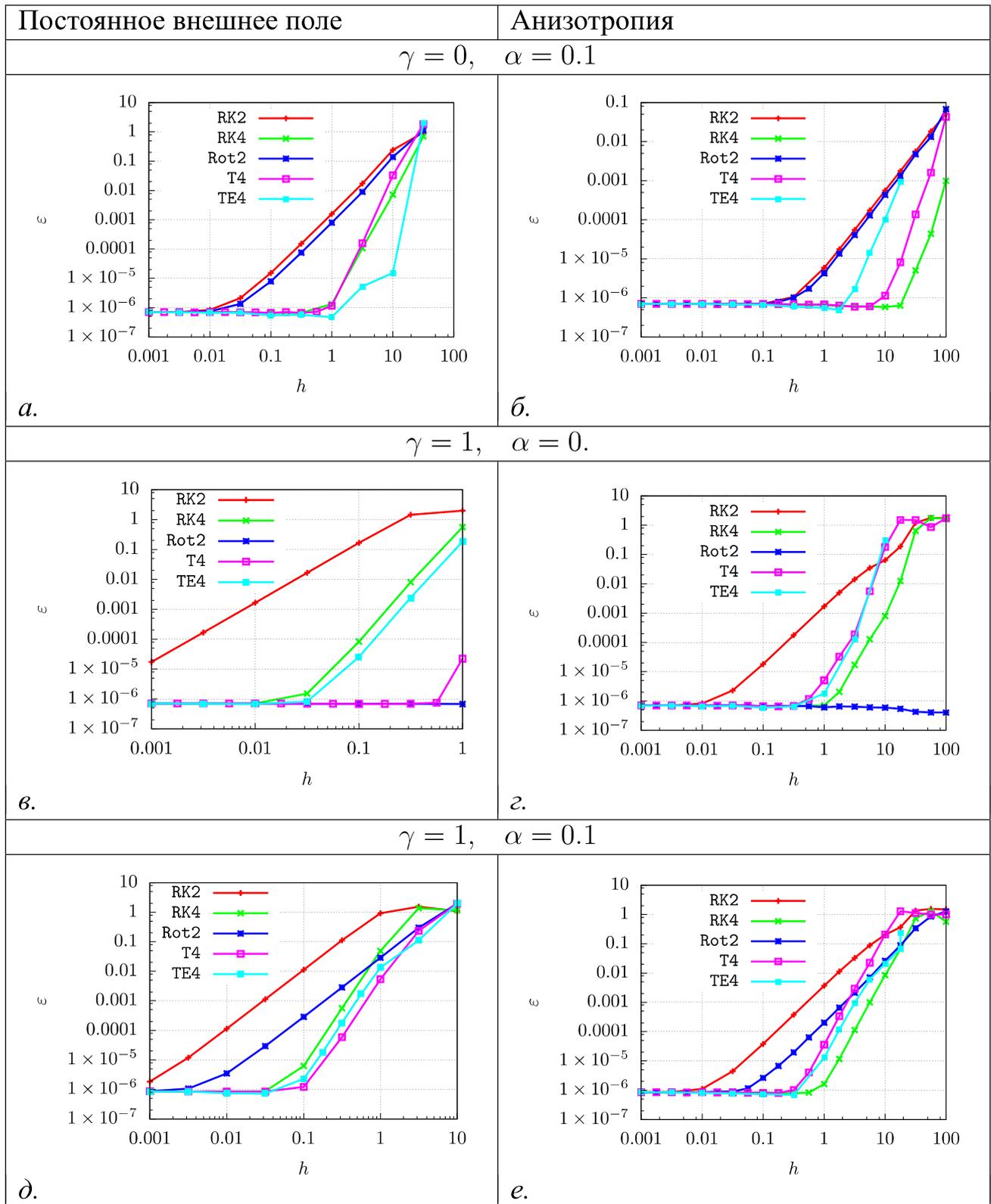


Рис. 1. Зависимость максимальной ошибки от шага по времени для постановок задач с постоянным внешним полем и анизотропией.

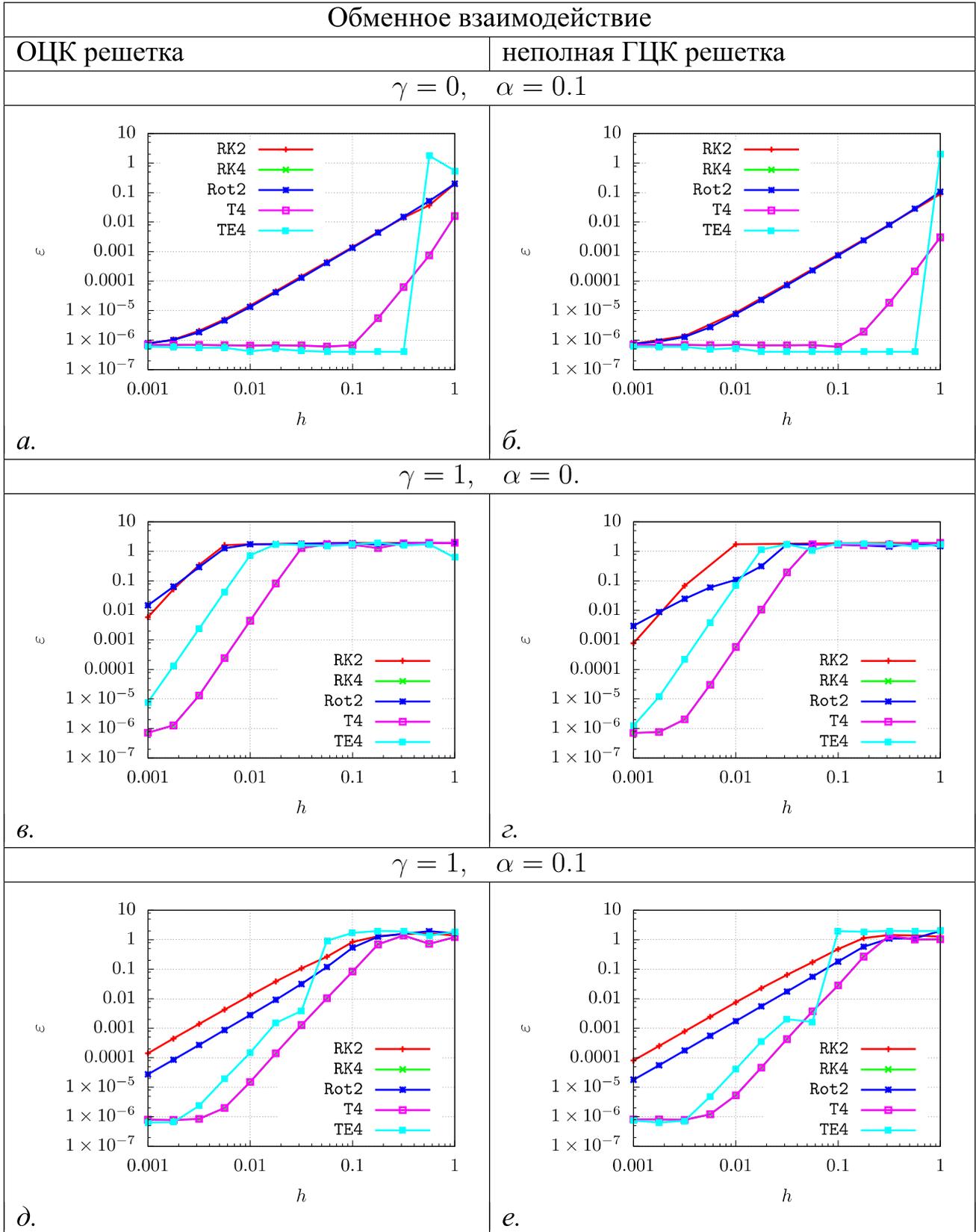


Рис. 2. Зависимость максимальной ошибки от шага по времени для постановок задач с обменным взаимодействием для ОЦК и неполной ГЦК решетки. Линии RK4 и T4 совпали на всех графиках, RK2 и Rot2 совпали на графиках с диссипацией без прецессии (*а, б*).

Для актуальных задач не так важна эволюция каждого отдельного магнитного момента, как эволюция макропараметров: средних намагниченностей, энергии и т.д. Для постановки с обменным взаимодействием и прецессией, без диссипации, можно проследить за ошибкой по энергии, так как энергия должна сохраняться. На рисунке 3 изображена зависимость ошибки по энергии к моменту времени $t = 1$ от шага по времени. Для любого значения шага по времени ошибка схемы T4 самая маленькая, RK4 — в разы больше, TE4 — на два порядка больше. Схема Rot2 существенно превосходит RK2: ошибка меньше на два порядка.

Сравним темп счета Rot2 и RK4 при моделировании диссипации и прецессии для разных значений допустимой ошибки. Для схемы можно сопоставить значение максимальной допустимой ошибки со значением максимального допустимого шага. Если отношение максимальных допустимых шагов для RK4 и Rot2 меньше двух, то темп счета схемы Rot2 больше, чем у RK4, за счет меньшего количества стадий.

Например, пусть максимальная ошибка по энергии равна 0.0001, тогда, судя по рисунку 3(д, e), для RK4 $h < 0.03$ и для Rot2 $h < 0.016$. То есть отношение максимальных допустимых шагов по времени $0.03/0.016$ меньше двух. Соответственно, при такой максимальной допустимой ошибке и больше расчет лучше вести с помощью схемы Rot2.

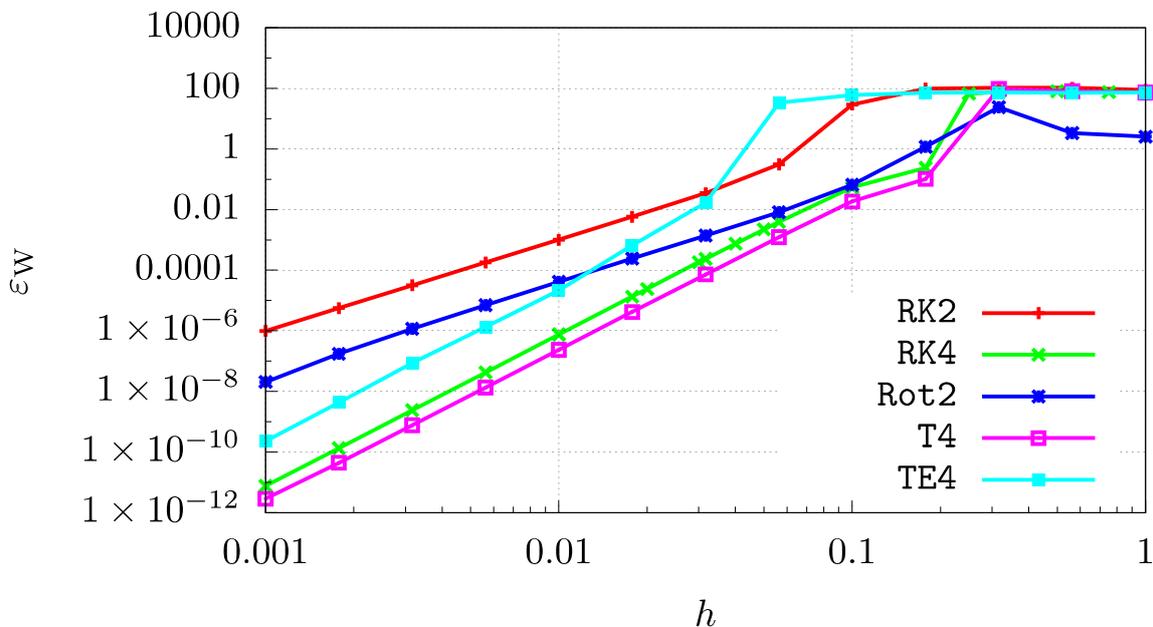


Рис. 3. Зависимость ошибки по энергии от шага по времени для прецессии без диссипации с обменным взаимодействием для ГЦК решетки.

9. Выводы

Схема на основе ряда Тейлора с вычислением производных поля через уравнение Ландау–Лифшица (Т4) для актуальных значений параметров имеет точность и темп счета не хуже схемы Рунге–Кутты четвертого порядка. Схема Рунге–Кутты четвертого порядка легче в реализации. Но Т4 допускает простую реализацию адаптивного подбора значения шага по времени для каждой итерации, что может значительно ускорить расчеты.

При достаточно большой допустимой ошибке схема в поворотах второго порядка (Rot2) имеет более высокий темп счета, чем все рассмотренные в статье схемы.

При учете поля демагнетизации для достижения наибольшего темпа счета схемы на основе ряда Тейлора предлагается сократить количество расчетов поля демагнетизации с помощью экстраполяции полиномом Ньютона (TE4). Для увеличения точности все остальные составляющие эффективного поля рассчитываются через уравнение Ландау–Лифшица (Т4).

Список литературы

- [1] Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials / R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart et al. // J. Phys.: Condens. Matter. — 2014. — Vol. 26.
- [2] Vansteenkiste A., de Wieleb B. Van. MuMax: A new high-performance micro-magnetic simulation tool // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2011. — Vol. 323. — P. 2585–2591.
- [3] OOMMF User's Guide. — Access mode: <http://math.nist.gov/oommf/doc/>.
- [4] Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. — Новосибирск: Наука, 1997.
- [5] Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. — М.: Мир, 1999.
- [6] Xiaobo T., Baras J. S., Krishnaprasad P. S. Fast Evaluation of Demagnetizing Field in Three Dimensional // Technical Research Report. — 2001.
- [7] Lashuk I. A Massively Parallel Adaptive Fast Multipole Method on Heterogeneous Architectures // Communications of the acm. — 2012. — Vol. 55.
- [8] Nonlinear magnetic stochastic resonance: Noise-strengthconstant-force diagrams / Yu.L. Raikher, V.I. Stepanov, A.N. Grigorenko, P.I. Nikitin // Phys. Rev. E. — 1997. — Dec. — Vol. 56. — P. 6400–6409.

- [9] Стохастический резонанс в однодоменных наночастицах с кубической анизотропией / Ю.П. Калмыков, Ю.Л. Райхер, У.Т. Кофии, С.В. Титов // Физика твердого тела. — 2005. — Т. 47, № 12. — С. 2232–2238.
- [10] Иванов А. В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104.
- [11] Зипунова Е.В., Иванов А.В. К вопросу о тестировании программных комплексов для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2017. — № 98. — С. 30.