



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

Препринты ИПМ • Препринт № 140 за 2018 г.



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

Зипунова Е.В., Иванов А.В.

К вопросу о расчете поля
демагнетизации быстрым
мультипольным методом

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зипунова Е.В., Иванов А.В. К вопросу о расчете поля демагнетизации быстрым мультипольным методом // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 140. 19 с. doi:[10.20948/prepr-2018-140](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-140)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-140>

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

Е.В. Зипунова, А.В. Иванов

**К вопросу о расчете поля демагнетизации
быстрым мультипольным методом**

Москва — 2018

Зипунова Е.В., Иванов А.В.

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

К вопросу о расчете поля демагнетизации быстрым мультипольным методом

При моделировании магнитных материалов самой времязатратной частью является расчет поля демагнетизации. Наиболее известными и часто используемыми являются два метода: быстрый мультипольный метод и метод, основанный на быстром преобразовании Фурье. Каждый метод обладает своими недостатками и ограничениями. В данной работе описываются особенности реализации быстрого мультипольного метода для расчета поля демагнетизации. Кроме того, описаны сложности, возникающие при верификации программного комплекса на стандартных задачах MuMag.

Ключевые слова: уравнение Ландау–Лифшица, численное моделирование, быстрый мультипольный метод, демагнетизация

Elizaveta Vyacheslavovna Zipunova, Anton Valeryevich Ivanov

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

On the question of calculating the demagnetization field by the fast multipole method

The most time consuming part of the modeling of magnetic materials is the calculation of the demagnetization field. There are two most often used methods: a fast multipole method and a method based on a fast Fourier transform. Each method has its own drawbacks and limitations. In this paper, the features of the realization of the fast multipole method for calculating the field of demagnetization with a micromagnetic approach and the atomistic approach were described. Moreover, the difficulties that arise when verifying the software on the standard MuMag tasks were described.

Keywords: Landau–Lifshitz equation, numerical simulation, fast multipole method, demagnetization

Содержание

1	Введение	3
2	Физико-математическая модель для моделирования магнетиков «атом–в–атом»	4
3	Физико-математическая модель при микромагнитном моделировании	5
4	Выбор безразмерной системы единиц	5
5	Поле демагнетизации прямоугольной ячейки	6
6	Поле демагнетизации в мультипольном приближении	8
7	Быстрый мультипольный метод	9
8	Численные схемы	11
9	Проверка расчета поля демагнетизации	12
10	Стандартная постановка μMAG №2	13
11	Стандартная постановка μMAG №4	14
12	Выводы	18
	Список литературы	18

1. Введение

Изучение магнитных материалов представляет большой интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и с точки зрения различных практических приложений — создания новых типов сенсоров, устройств для хранения и обработки информации.

Наиболее адекватным методом моделирования магнитных материалов является моделирование «атом–в–атом» на основе системы уравнений Ландау–Лифшица. К сожалению, для решения инженерных задач такой подход является слишком сложным с вычислительной точки зрения. Оптимальным с точки зрения соотношения корректность модели/вычислительная сложность является микромагнитный подход, при котором образец разбивается на области с однородной намагниченностью. При моделировании магнитных материалов наиболее времязатратной частью является расчет поля демагнетизации. Так как каждая ячейка взаимодействует с каждой, прямой расчет поля демагнетизации предполагает вычисление и суммирование $O(N^2)$ членов, где N — число взаимодействующих ячеек. Существует множество различных алгоритмов для решения этой проблемы [1–4]. Наиболее известными и часто используемыми являются два метода: быстрый мультипольный метод (FMM) [5, 6] и метод, основанный на быстром преобразовании Фурье (FFT) [7, 8]. Оба эти метода приводят к уменьшению вычислительной сложности до $O(N \ln N)$. Метод FFT требует увеличения расчетной области по крайней мере в два раза и плохо согласуется с адаптивными сетками, поэтому в данной работе для реализации был выбран быстрый мультипольный метод.

2. Физико-математическая модель для моделирования магнетиков «АТОМ–В–АТОМ»

Уравнение Ландау–Лифшица для i -го атома записывается следующим образом:

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

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 атомами i и j , K — коэффициент анизотропии, \mathbf{a} — направление анизотропии, \mathbf{R}_i — координата i -го атома, $k_B T$ — температура системы, измеряемая в единицах энергии.

Обменное взаимодействие обусловлено перекрытием электронных облаков между двумя соседними магнитными атомами. Соответственно, при подсчете обменного поля суммирование ведется только по ближайшим ячейкам. В данной работе не учитываются анизотропия и температурные флуктуации.

3. Физико-математическая модель при микромагнитном моделировании

Пусть намагниченность задана непрерывно во всем объеме ферромагнетика. Тогда, согласно модели Гейзенберга [9], эффективное обменное поле:

$$\mathbf{H}^{\text{exch}}(\mathbf{R}) = 2 \frac{A_{\text{ex}}}{M_{\text{sat}}} \Delta \mathbf{m},$$

где \mathbf{m} — единичный вектор направления намагниченности, M_{sat} — намагниченность насыщения на единицу объема, A_{ex} — обменная постоянная. Пусть ферромагнитный материал занимает объем V , тогда поле демагнетизации в точке \mathbf{R} выражается как [10]:

$$\mathbf{H}^{\text{dem}}(\mathbf{R}) = - \int_V \frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{R}')}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^3} dR' + \int_{\partial V} \frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \mathbf{M}(\mathbf{R}') \cdot \mathbf{n}(\mathbf{R}')}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^3} dR',$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор, $\mathbf{M}(\mathbf{R})$ — намагниченность в точке \mathbf{R} , ∂V — граница объема V , \mathbf{n} — единичный вектор, нормаль к ∂V .

При микромагнитном подходе к моделированию магнитного материала материал разбивается на ячейки, достаточно маленькие, чтобы считать ячейки равномерно намагниченными. Тогда магнитный момент отдельной ячейки задаётся вектором постоянной длины, который может ориентироваться произвольным образом. Эволюция магнитного момента i -ой ячейки, аналогично моделированию «атом–в–атом» (1), описывается уравнением Ландау–Лифшица. После дискретизации, при вычислении поля обмена для i -ой ячейки, оператор Лапласа аппроксимируется с помощью значений намагниченности в соседних ячейках:

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}} = 2 \frac{A_{\text{ex}}}{M_{\text{sat}} l_{\text{cell}}^2} \sum_j (\mathbf{m}_j - \mathbf{m}_i),$$

где l_{cell} — размер ячейки сетки дискретизации.

4. Выбор безразмерной системы единиц

При моделировании «атом–в–атом» за единицу магнитного момента принята величина магнитного момента атома $\Delta_M = \mu_s$, за единицу расстояния — характерный размер ячейки кристаллической решетки l_{cell} , за единицу энергии принят модуль обменного интеграла $\Delta_W = |J|$. Соответственно, за единицу поля принято отношение единицы энергии к единице магнитного момента $\Delta_H = \Delta_W / \Delta_M$.

При микромагнитном моделировании за единицу расстояния принят характерный размер ячейки сетки дискретизации l_{cell} , за единицу намагниченности —

величина намагниченности насыщения $\Delta_M = M_{\text{sat}} l_{\text{cell}}^3$, за единицу поля — отношение, входящее в выражение для обменного поля $\Delta_H = 2 \frac{A_{\text{ex}}}{M_{\text{sat}} l_{\text{cell}}^2}$, единица энергии вычисляется через единицу поля и намагниченности $\Delta_W = \Delta_H \Delta_M$.

За единицу времени принимается обратная частота прецессии магнитного момента в единичном поле $\Delta_t = \frac{1}{\gamma \Delta_H}$.

Уравнение Ландау–Лифшица для i -го атома в выбранной безразмерной системе единиц имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} &= -\gamma^* [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]], \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}^{\text{dip}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{exch}} &= \sum_j J_{ij}^* \mathbf{m}_j, \\ \mathbf{H}_i^{\text{dip}} &= \sum_j D^* \left(\frac{3(\mathbf{m}_j \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i))(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^5} - \frac{\mathbf{m}_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} \right), \end{aligned}$$

где $J_{ij}^* = \frac{J_{ij}}{|J|}$, $D^* = \frac{\mu_s^2}{l_{\text{cell}}^3 |J|}$, $\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i / l_{\text{cell}}$. $\gamma^* = 1$ для учета прецессии и $\gamma^* = 0$, когда прецессия не моделируется.

Для i -ой ячейки уравнение Ландау–Лифшица совпадает с уравнением для i -го атома. В выбранной системе единиц для микромагнитного подхода поле обменного взаимодействия для i -ой ячейки вычисляется как

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j (\mathbf{m}_j - \mathbf{m}_i),$$

поле демагнетизации:

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}} = \sum_j \left(-D^* \int_{V_j} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') \nabla \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^3} dr' + D^* \int_{\partial V_j} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') \mathbf{m}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^3} dr' \right),$$

где $D^* = \Delta_M / l_{\text{cell}}^3 \Delta_H$, $\mathbf{r} = \mathbf{R} / l_{\text{cell}}$, $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{R}) / \Delta_M$. Далее все уравнения и выкладки будут приводиться в выбранных безразмерных системах единиц.

5. Поле демагнетизации прямоугольной ячейки

Вклад j -ой ячейки в поле демагнетизации в центре i -ой ячейки:

$$\mathbf{H}_j(\mathbf{r}_i) = -D \int_{V_j} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') \nabla \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^3} dr' + D \int_{\partial V_j} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') \mathbf{m}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^3} dr'.$$

Пусть размер ячейки достаточно мал, чтобы считать намагниченность внутри ячейки равномерной. Соответственно, $\nabla \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}') = 0$ внутри объема V_j и

$$\mathbf{H}_j(\mathbf{r}_i) = D \int_{\partial V_j} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^3} dr'.$$

Для x компоненты:

$$H_{jx}(\mathbf{r}_i) = D \int_{\partial V_j} \frac{(x - x') \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{n}}{\left(\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2} \right)^3} dx' dy' dz'.$$

Без потери общности, пусть центр ячейки V_j имеет координату $(0,0,0)^T$, тогда:

$$x', y', z' \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right].$$

Аналитически интеграл выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} H_{jx}(\mathbf{r}_i) = & Dm_{jx} \left(\arctan l_{x(1,1,-1)} + \arctan l_{x(1,-1,1)} + \right. \\ & + \arctan l_{x(-1,1,1)} + \arctan l_{x(-1,-1,-1)} - \\ & - \arctan l_{x(1,1,1)} - \arctan l_{x(1,-1,-1)} - \\ & \left. - \arctan l_{x(-1,1,-1)} - \arctan l_{x(-1,-1,1)} \right) + \\ & + Dm_{jy} \ln \frac{l_{y(1,1,1)} l_{y(-1,-1,1)} l_{y(-1,1,-1)} l_{y(1,-1,-1)}}{l_{y(-1,1,1)} l_{y(1,-1,1)} l_{y(1,1,-1)} l_{y(-1,-1,-1)}} + \\ & + Dm_{jz} \ln \frac{l_{z(1,1,1)} l_{z(-1,-1,1)} l_{z(-1,1,-1)} l_{z(1,-1,-1)}}{l_{z(-1,1,1)} l_{z(1,-1,1)} l_{z(1,1,-1)} l_{z(-1,-1,-1)}}, \end{aligned}$$

где:

$$\begin{aligned} l_{x(\lambda,\mu,\nu)} &= \frac{(y + \mu \frac{1}{2})(z + \nu \frac{1}{2})}{(x + \lambda \frac{1}{2}) \sqrt{(x + \lambda \frac{1}{2})^2 + (y + \mu \frac{1}{2})^2 + (z + \nu \frac{1}{2})^2}}, \\ l_{y(\lambda,\mu,\nu)} &= z + \nu \frac{1}{2} + \sqrt{\left(x + \lambda \frac{1}{2}\right)^2 + \left(y + \mu \frac{1}{2}\right)^2 + \left(z + \nu \frac{1}{2}\right)^2}, \\ l_{z(\lambda,\mu,\nu)} &= y + \mu \frac{1}{2} + \sqrt{\left(x + \lambda \frac{1}{2}\right)^2 + \left(y + \mu \frac{1}{2}\right)^2 + \left(z + \nu \frac{1}{2}\right)^2}, \end{aligned}$$

где $\lambda, \mu, \nu = \pm 1$.

Аппроксимация поля демагнетизации полем диполя. Пусть $d_0 \ll |\mathbf{r}|$. Разложим выражение под интегралом в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} & \frac{(x - x')}{\left(\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2} \right)^3} = \\ & = \frac{x}{|r|^3} + \frac{3x^2 - |r|^2}{|r|^3} x' + \frac{3xy}{|r|^3} y' + \frac{3xz}{|r|^3} z' + O\left(\frac{x'^2 + y'^2 + z'^2}{|r|^4} \right). \end{aligned}$$

Теперь проинтегрируем:

$$H_{jx}(\mathbf{r}_i) = D \frac{(3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_j)x - m_{jx}|\mathbf{r}|^2) d_0^3}{|\mathbf{r}|^5},$$

$$\mathbf{H}_j(\mathbf{r}_i) = D \frac{(3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_j)\mathbf{r}_j - \mathbf{m}_j|\mathbf{r}|^2) d_0^3}{|\mathbf{r}|^5}.$$

Таким образом, вклад в поле демагнетизации от ближайших ячеек считается как сумма интегралов, а вклад дальних ячеек — как сумма полей диполя.

6. Поле демагнетизации в мультипольном приближении

Посчитаем поле демагнетизации в точке \mathbf{r} от группы достаточно удалённых ячеек, в случае микромагнитного подхода, или атомов, в случае подхода «атом–в–атом»:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{H}_i(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{H}_i(\mathbf{r}) = \frac{3(\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i))(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^5} - \frac{\mathbf{m}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}.$$

Без потери общности предположим, что средний радиус-вектор группы ячеек $\mathbf{r}_0 = (0,0,0)^T$. Если $\mathbf{r} \ll \mathbf{r}_i$, то $\mathbf{H}_i(\mathbf{r})$ можно разложить в ряд Тейлора по $\frac{|\mathbf{r}_i|}{|\mathbf{r}|}$. Сумма по ячейкам членов ряда Тейлора нулевого порядка даст поле диполя. Дипольный момент:

$$\mathbf{M}_1 = \sum_i \mathbf{m}_i.$$

Тогда диполь-дипольное поле рассчитывается как функция от \mathbf{M}_1 и \mathbf{r} :

$$\mathbf{H}_{\text{dip}}(\mathbf{M}_1, \mathbf{r}) = \frac{3(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^5} - \frac{\mathbf{M}_1}{|\mathbf{r}|^3}.$$

Сумма по ячейкам членов ряда Тейлора первого порядка даст поле квадрупольного поля. Найдем поле квадрупольного поля от группы ячеек. β -компонента поля от i -ой ячейки:

$$H_{i\beta}(\mathbf{r}) = \frac{3 \sum_{\gamma} m_{i\gamma} (r_{\gamma} - r_{i\gamma})(r_{\beta} - r_{i\beta})}{(\sum_{\gamma} (r_{\gamma} - r_{i\gamma})^2)^{5/2}} - \frac{m_{i\beta}}{(\sum_{\gamma} (r_{\gamma} - r_{i\gamma})^2)^{3/2}}.$$

Частная производная по $r_{i\alpha}$ β компоненты поля от i -ой ячейки:

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_{i\beta}}{\partial r_{i\alpha}} &= -\frac{3m_{i\alpha}(r_\beta - r_{i\beta})}{(\sum_\gamma (r_\gamma - r_{i\gamma})^2)^{5/2}} - \frac{3\sum_\gamma m_{i\gamma}(r_\gamma - r_{i\gamma})\delta_{\alpha\beta}}{(\sum_\gamma (r_\gamma - r_{i\gamma})^2)^{5/2}} + \\ &+ \frac{15\sum_\gamma m_{i\gamma}(r_\gamma - r_{i\gamma})(r_\beta - r_{i\beta})(r_\alpha - r_{i\alpha})}{(\sum_\gamma (r_\gamma - r_{i\gamma})^2)^{7/2}} - \frac{3m_{i\beta}(r_\alpha - r_{i\alpha})}{(\sum_\gamma (r_\gamma - r_{i\gamma})^2)^{5/2}}, \\ \left. \frac{\partial H_{i\beta}}{\partial r_{i\alpha}} \right|_{r_i=0} &= -\frac{3m_{i\alpha}r_\beta}{r^5} - \frac{3\sum_\gamma m_{i\gamma}r_\gamma\delta_{\alpha\beta}}{r^5} + \frac{15\sum_\gamma m_{i\gamma}r_\gamma r_\beta r_\alpha}{r^7} - \frac{3m_{i\beta}r_\alpha}{r^5}.\end{aligned}$$

Поле квадруполья рассчитывается по формуле:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_2(\mathbf{r}) &= \sum_i \left(\sum_\alpha \left. \frac{\partial \mathbf{H}_i}{\partial r_{i\alpha}} \right|_{r_i=0} r_{i\alpha} \right), \\ \mathbf{H}_{2\beta}(\mathbf{r}) &= -\frac{3\sum_\alpha \sum_i m_{i\alpha}r_\beta r_{i\alpha}}{r^5} - \frac{3\sum_\alpha \sum_i \sum_\gamma m_{i\gamma}r_\gamma\delta_{\alpha\beta}r_{i\alpha}}{r^5} + \\ &+ \frac{15\sum_\alpha \sum_i \sum_\gamma m_{i\gamma}r_\gamma r_\beta r_\alpha r_{i\alpha}}{r^7} - \frac{3\sum_\alpha \sum_i m_{i\beta}r_\alpha r_{i\alpha}}{r^5}, \\ \mathbf{H}_{2\beta}(\mathbf{r}) &= -\frac{3\sum_\alpha \sum_i m_{i\alpha}r_{i\alpha}r_\beta}{r^5} - \frac{3\sum_\gamma \sum_i m_{i\gamma}r_{i\beta}r_\gamma}{r^5} + \\ &+ \frac{15\sum_\alpha \sum_\gamma \sum_i m_{i\gamma}r_{i\alpha}r_\alpha r_\gamma r_\beta}{r^7} - \frac{3\sum_\alpha \sum_i m_{i\beta}r_{i\alpha}r_\alpha}{r^5}.\end{aligned}$$

Квадрупольный момент:

$$M_2 = \begin{pmatrix} \sum_i m_{ix}r_{ix} & \sum_i m_{ix}r_{iy} & \sum_i m_{ix}r_{iz} \\ \sum_i m_{iy}r_{ix} & \sum_i m_{iy}r_{iy} & \sum_i m_{iy}r_{iz} \\ \sum_i m_{iz}r_{ix} & \sum_i m_{iz}r_{iy} & \sum_i m_{iz}r_{iz} \end{pmatrix}.$$

В итоге, поле квадруполья записывается как

$$\mathbf{H}_{\text{quadr}}(M_2, \mathbf{r}) = -\frac{3}{r^5}(M_2 E + M_2^T + M_2)\mathbf{r} + \frac{15}{r^7}(\mathbf{r}^T M_2 \mathbf{r})\mathbf{r}.$$

7. Быстрый мультипольный метод

Сетки. Пусть L_{\max} — максимальный ранг. Строится сетка нулевого ранга — прямоугольная сетка размером $2^{L_{\max}} \times 2^{L_{\max}} \times 2^{L_{\max}}$. В случае моделирования «атом–атом» каждая ячейка сетки нулевого ранга — ячейка кристаллической решетки. Количество и расположение атомов в ячейке кристаллической решетки зависит от типа кристаллической решетки: для ОЦК — два, для ГЦК — четыре, для неполной ГЦК — три. В случае микромагнитного моделирования ячейка сетки

нулевого ранга — ячейка сетки микромагнитной дискретизации непрерывной расчетной области.

Далее создаётся сетка первого ранга размером $2^{L_{\max}-1} \times 2^{L_{\max}-1} \times 2^{L_{\max}-1}$, каждая ячейка которой включает в себя 8 ячеек нулевого ранга. И так далее до сетки, которая состоит из одной ячейки, включающей всю расчетную область — сетка L_{\max} ранга (рис. 1).

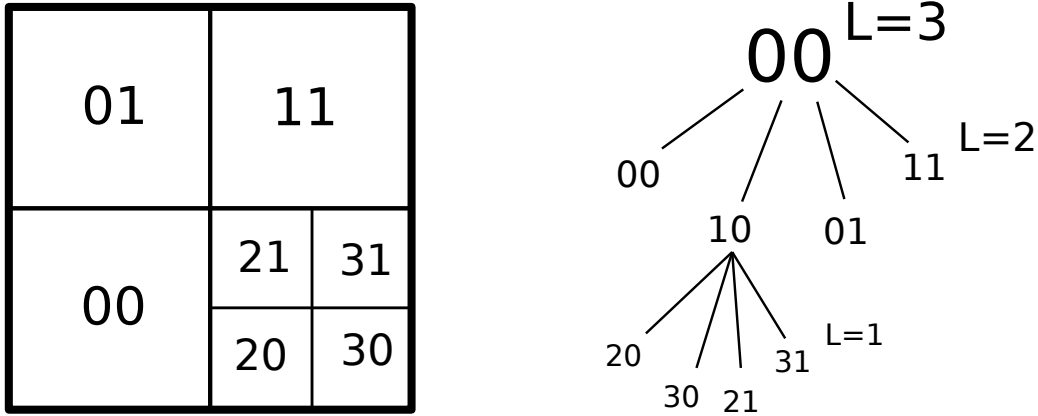


Рис. 1. Пример разбиения расчетной области с помощью сеток разного ранга L и дерево зависимости ячеек.

Для ячейки сетки любого ранга L определено два значения: координата центра масс ячейки \mathbf{r}_c^L и средний дипольный и квадрупольный момент $\mathbf{M}_{1,2}^L$. Вместо координаты геометрического центра ячейки берется координата центра масс ячейки, что способствует коррекции поля края. Эти значения нужны для вычисления поля диполя и квадруполя от ячейки. Переход от ячейки меньшего ранга к ячейке большего ранга совершается таким образом:

$$\mathbf{M}_1^L = \sum_j \mathbf{M}_{1j}^{L-1}, \quad \mathbf{M}_2^L = \sum_j (\mathbf{M}_{2j}^{L-1} + \mathbf{M}_{1j}^{L-1} \times (\mathbf{r}_{cj}^{L-1} - \mathbf{r}_c^L)).$$

Пусть $\mathbf{r}'_i^L = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c^L$ (рис. 2), тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_c^L + \mathbf{r}'_i^L &= \mathbf{r}_c^{L-1} + \mathbf{r}'_i^{L-1}, \quad \mathbf{M}_{2\alpha\beta}^{L-1} = \sum_i \mathbf{m}_{i\beta} \mathbf{r}'_{i\alpha}{}^{L-1}, \\ \mathbf{M}_{2\alpha\beta}^L &= \sum_i \mathbf{m}_{i\beta} \mathbf{r}'_{i\alpha}{}^L = \sum_i \mathbf{m}_{i\beta} (\mathbf{r}'_{i\alpha}{}^{L-1} + (\mathbf{r}_{c\alpha}^{L-1} - \mathbf{r}_{c\alpha}^L)) = \\ &= \sum_j \mathbf{M}_{2j\alpha\beta}^L + \sum_j \mathbf{M}_{1j\beta}^{L-1} (\mathbf{r}_{cj\alpha}^{L-1} - \mathbf{r}_{c\alpha}^L). \end{aligned}$$

Для программной реализации сеток используется трехмерный массив с обходом по Z -кривой Мортон из библиотеки aiwlib [11].

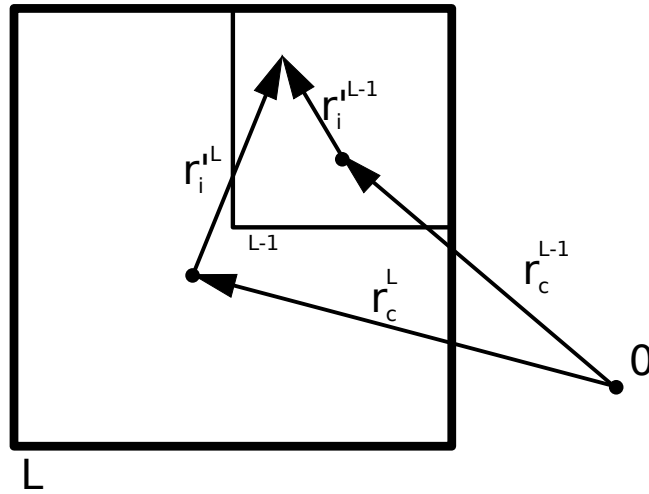


Рис. 2. Соотношение координат $\mathbf{r}_c^L, \mathbf{r}_c^{L-1}, \mathbf{r}_i^L, \mathbf{r}_i^{L-1}$.

Обход сеток для расчета поля демагнетизации в точке. Расчет вклада в поле демагнетизации одной j -ой ячейки ранга L производится следующим образом:

- Если $L = 0$, посчитать вклад в поле демагнетизации ячеек ранга L точно: как поле диполя при моделировании «атом–в–атом» или как сумму интегралов по ячейкам при микромагнитном моделировании.
- Если $L > 0$, сравним $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{cj}|$ с критическим радиусом на данном ранге $R_{cr}2^L$.
 - Если для j -ой ячейки $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{cj}| > R_{cr}2^L$, то вклад в поле демагнетизации данной ячейки считается как сумма поля диполя и квадруполь от j -ой ячейки: $\mathbf{H}_{demagj} = \mathbf{H}_{dip}(\mathbf{M}_{1j}, \mathbf{r}_j) + \mathbf{H}_{quadr}(M_{2j}, \mathbf{r}_j)$.
 - Если для j -ой ячейки $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{cj}| < R_{cr}2^L$, то вклад j -ой ячейки ранга L считается как сумма вкладов в поле демагнетизации ячеек $L - 1$ ранга, лежащих в j -ой ячейке.

Алгоритм стартует с расчета вклада в поле демагнетизации одной ячейки сетки максимального ранга $L = L_{max}$, включающей всю область. Описанный алгоритм расчета поля демагнетизации был реализован в виде программного комплекса на языках C++ и Python с использованием библиотеки aiwlib [11].

8. Численные схемы

Для моделирования релаксации и динамики магнитной системы использовались две разные численные схемы.

Для поиска энергетического минимума системы решается система уравнений Ландау–Лифшица, где член, отвечающий за прецессию, зануляется ($\gamma = 0$). Так как прецессия не учитывается, то шаг по времени может быть увеличен. В данной работе $\alpha = 0.1$, $h = 1$ в выбранной безразмерной системе единиц.

Уравнения Ландау–Лифшица для i -ой ячейки или атома без прецессии:

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]].$$

Для решения системы ОДУ использовалась схема Рунге–Кутты второго порядка:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_i^{n+1} &= \mathbf{m}_i^n - \frac{1}{2}h\alpha [\mathbf{m}_i^n \times [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i^n]] - \frac{1}{2}h\alpha [\mathbf{m}_i^* \times [\mathbf{m}_i^* \times \mathbf{H}_i^*]], \\ \mathbf{H}_i^n &= \mathbf{H}^{\text{eff}}(t^n, \mathbf{m}_0^n, \mathbf{m}_1^n \dots), \\ \mathbf{m}_i^* &= \mathbf{m}_i^n - h\alpha [\mathbf{m}_i^n \times [\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_i^n]], \quad \mathbf{H}_i^* = \mathbf{H}^{\text{eff}}(t^n + h, \mathbf{m}_0^*, \mathbf{m}_1^* \dots). \end{aligned}$$

Для моделирования динамики системы решается система уравнений Ландау–Лифшица:

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]].$$

Система ОДУ решается с помощью схемы Рунге–Кутты второго порядка в поворотах [12]:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_i^{n+1} &= \mathbf{m}_i^n \circlearrowleft \frac{1}{2}h(\gamma\mathbf{H}_i^n + \alpha[\mathbf{m}_i^n + \mathbf{H}_i^n]) \circlearrowleft \frac{1}{2}h(\gamma\mathbf{H}_i^* + \alpha[\mathbf{m}_i^* + \mathbf{H}_i^*]), \\ \mathbf{H}_i^n &= \mathbf{H}^{\text{eff}}(t^n, \mathbf{m}_0^n, \mathbf{m}_1^n \dots), \\ \mathbf{m}_i^* &= \mathbf{m}_i^n \circlearrowleft h(\gamma\mathbf{H}_i^n + \alpha[\mathbf{m}_i^n + \mathbf{H}_i^n]), \quad \mathbf{H}_i^* = \mathbf{H}^{\text{eff}}(t^n + h, \mathbf{m}_0^*, \mathbf{m}_1^* \dots), \end{aligned}$$

где $\mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b}$ — оператор поворота \mathbf{a} вокруг оси, параллельной вектору \mathbf{b} , на угол $|\mathbf{b}|$:

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b} = \mathbf{a} \cos b - [\mathbf{a} \times \mathbf{n}_b] \sin b + \mathbf{n}_b(\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_b)(1 - \cos b), \quad \mathbf{n}_b = \mathbf{b}/b.$$

Описанные выше алгоритм расчета поля демагнетизации и численные схемы интегрирования уравнений Ландау–Лифшица реализованы в виде программного комплекса на языках C++ и Python для OS Linux с использованием библиотеки aiwlib [11, 13].

9. Проверка расчета поля демагнетизации

Сравним поле демагнетизации от куба со стороной 3 нм, посчитанное с помощью программного комплекса с реализацией быстрого мультипольного метода (ФММ) и программного пакета MuMax3 [14] при намагниченности насыщения $M_{\text{sat}} = 8.0 \cdot 10^5 \text{ А/м}$ (рис. 3). Пусть обменная постоянная равна: $A_{\text{ex}} = 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ Дж/м}$. Безразмерная единица поля в СИ вычисляется как

$$\Delta_H = \frac{2A_{\text{ex}}}{M_{\text{sat}}a^2\mu_0} = 14.2 \cdot 10^5 \text{ А/м}.$$

Тогда:

$$D^* = \frac{\Delta_M}{4\pi l_{\text{cell}}^3 \Delta_H} = \frac{M_{\text{sat}}^2 l_{\text{cell}}^2 \mu_0}{4\pi 2 A_{\text{ex}}} = 0.0221.$$

Как видно из рисунка 3, поля демагнетизации, посчитанные с помощью реализации быстрого мультипольного метода (FMM) и магнитной программы MumMax3, совпадают.

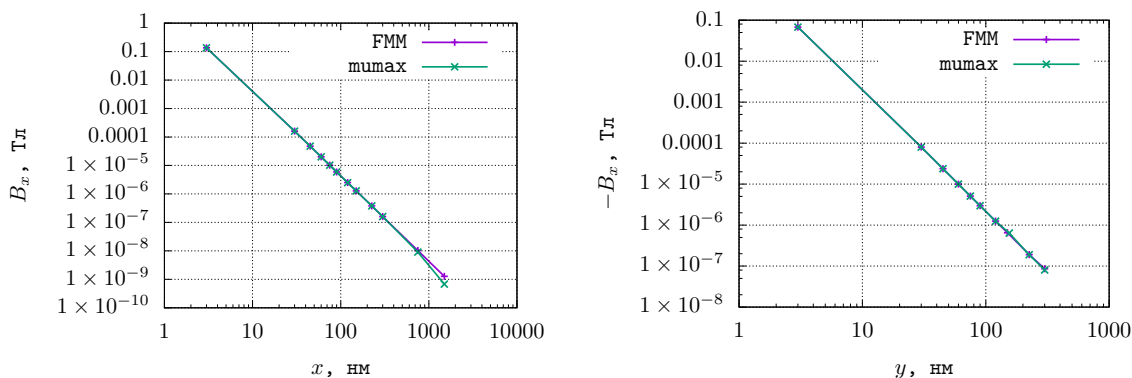


Рис. 3. Зависимость поля демагнетизации B_x ферромагнитного куба со стороны 3 нм от расстояния по оси OX и OY .

10. Стандартная постановка μMAG №2

μMAG (Micromagnetic Modeling Activity Group) была создана для решения фундаментальных вопросов микромагнитного моделирования. Одна из целей μMAG — создание стандартных постановок, которые бы позволили сравнивать и верифицировать разные программные комплексы [15].

В данной постановке учитывается обмен и поле размагничивания. Для удобства постановки вводится длина обмена:

$$l_{\text{ex}} = \sqrt{\frac{A_{\text{ex}}}{\frac{1}{2}\mu_0 M_{\text{sat}}^2}}.$$

Форма моделируемого образца ферромагнетика — прямоугольный параллелепипед с отношениями сторон $5 \times 1 \times 0.1$. Размер моделируемого образца ферромагнетика задается параметром d . Рассматривается зависимость спонтанной намагниченности от параметра d . При этом для некоторого значения d рассматривается образец размером $5l_{\text{ex}}d \times l_{\text{ex}}d \times 0.1l_{\text{ex}}d$ (рис. 4), равномерно намагниченный по направлению $(1, 0.3, 0)^T$, и моделируется релаксация до стационарного состояния. Средняя намагниченность образца в полученном стационарном состоянии и есть спонтанная намагниченность.

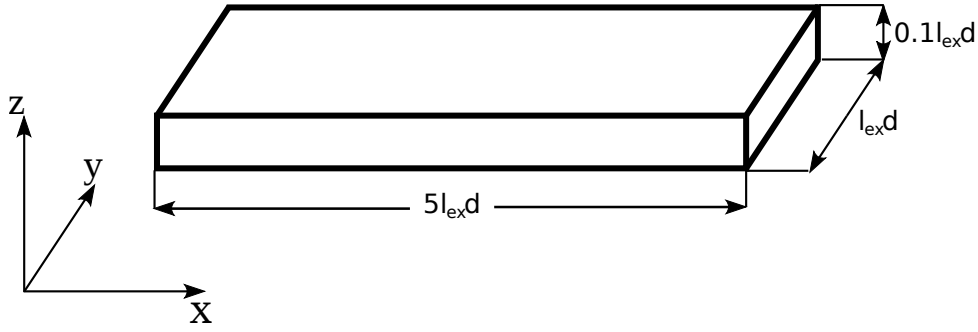


Рис. 4. Образец ферромагнетика для μ MAG стандартной постановки №2.

Заданы параметры материала (в СИ):

$$A_{\text{ex}} = 10^{-11} \text{ Дж/м}, \quad M_{\text{sat}} = 10^6 \text{ А/м}, \quad \gamma = 2.2 \cdot 10^5 \text{ м/А с.}$$

Длина обмена:

$$l_{\text{ex}} = \sqrt{\frac{A}{0.5\mu_0 M_{\text{sat}}^2}} = \sqrt{\frac{1.0 \cdot 10^{-11} \text{ Дж/м}}{0.5 \cdot 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ Н/А}^2 \cdot 10^{12} \text{ А}^2/\text{м}^2}} = 4 \text{ нм.}$$

Значение d меняется от 1 до 30.

Для получения адекватных результатов крайне важны параметры сетки. Размер ячейки не должен быть больше $0.5l_{\text{ex}}$. В данной работе выбрана сетка с кубическими ячейками с длиной стороны $a = \frac{0.1l_{\text{ex}}d}{\lceil d/5 \rceil + 1}$.

Для расчета быстрым мультипольным методом максимальный ранг определяется по длинной стороне расчетной сетки $L_{\text{max}} = \lceil \log_2 \left(\frac{5l_{\text{ex}}d}{a} \right) \rceil$:

- $d \in [1; 4]$ сетка $50 \times 10 \times 1$ ячеек размером $a = 0.1l_{\text{ex}}d$, $L_{\text{max}} = 6$,
- $d \in [5; 9]$ сетка $100 \times 20 \times 2$ ячеек размером $a = \frac{0.1}{2}l_{\text{ex}}d$, $L_{\text{max}} = 7$,
- $d \in [10; 14]$ сетка $150 \times 30 \times 3$ ячеек размером $a = \frac{0.1}{3}l_{\text{ex}}d$, $L_{\text{max}} = 8$, и т.д.

Критический радиус быстрого мультипольного метода был выбран: $R_{\text{cr}} = 4a$.

В безразмерной системе единиц:

$$\Delta_{\mu_s} = M_{\text{sat}}a^3, \quad \Delta_H = \frac{2A_{\text{ex}}}{M_{\text{sat}}a^2\mu_0}, \quad D^* = \frac{\Delta_{\mu_s}}{a^3\Delta_H4\pi}.$$

Как видно из рисунка (рис. 5), кривые, полученные с помощью быстрого мультипольного метода и с помощью MuMax3, совпадают достаточно точно.

11. Стандартная постановка μ MAG №4

Ферромагнитный образец $500 \text{ нм} \times 125 \text{ нм} \times 3 \text{ нм}$, равномерно намагниченный по направлению $(1, 0.1, 0)^T$, релаксирует к стационарному состоянию. После чего к образцу в стационарном состоянии прикладывается постоянное внешнее поле и исследуется динамика средней намагниченности.

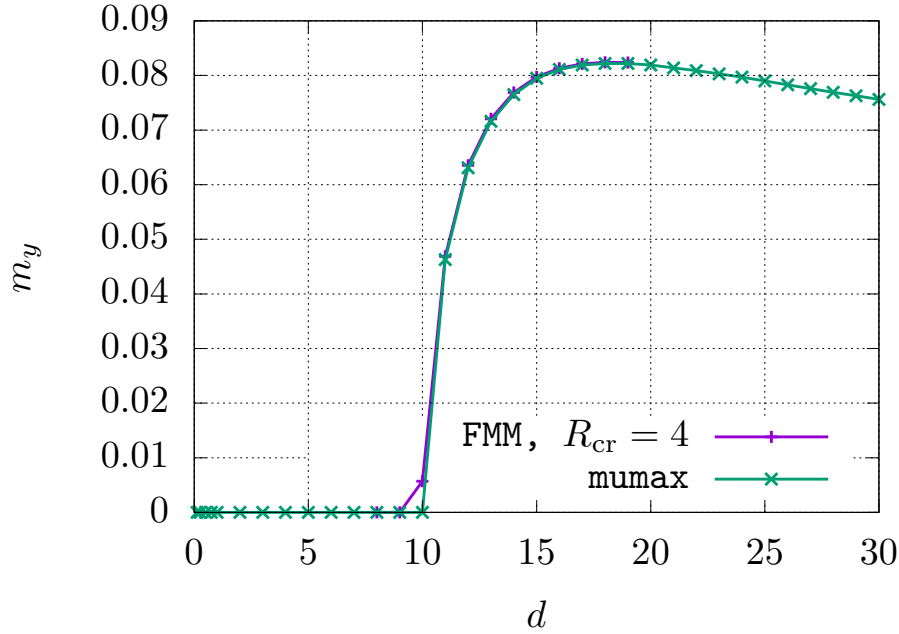


Рис. 5. Зависимость y компоненты спонтанной намагниченности M_y от параметра d .

Физические параметры:

$$A_{\text{ex}} = 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ Дж/м}, \quad M_{\text{sat}} = 8.0 \cdot 10^5 \text{ А/м}, \quad \gamma = 2.2 \cdot 10^5 \text{ м/Ас}, \quad \alpha = 0.02.$$

В данной работе расчеты велись с сеткой $128 \times 32 \times 1$ ячеек. Характерные размеры ячейки: $a = 125 \text{ нм}/32$, $a_z = 3 \text{ нм}$. Единица времени:

$$\Delta_t = \frac{1}{\Delta_H \gamma} = \frac{M_{\text{sat}} a^2 \mu_0}{A_{\text{ex}} \gamma} = 5.41 \cdot 10^{-12} \text{ с}.$$

Коэффициент поля демагнетизации в безразмерных единицах:

$$D^* = \frac{\Delta_{\mu_s}}{a^3 \Delta_H 4\pi} = \frac{M_{\text{sat}}^2 a^2 \mu_0}{4\pi 2 A_{\text{ex}}} = 0.037.$$

Постоянное внешнее поле:

$$\mu_0 H_x^{\text{ext}} = -24.6 \text{ мТл}, \quad \mu_0 H_y^{\text{ext}} = 4.3 \text{ мТл}, \quad \mu_0 H_z^{\text{ext}} = 0.0 \text{ мТл},$$

динамика наблюдается в течение $t_{\text{max}} = 1 \text{ нс}$.

$$t_{\text{max}} = \frac{1 \cdot 10^{-9} \text{ с}}{5.41 \cdot 10^{-12} \text{ с}} \Delta_t = 184 \Delta_t, \quad H^{\text{ext}} = \frac{25 \text{ мТл} M_{\text{sat}} a^2}{A_{\text{ex}}} = 2.34 \times 10^{-3} \Delta_H.$$

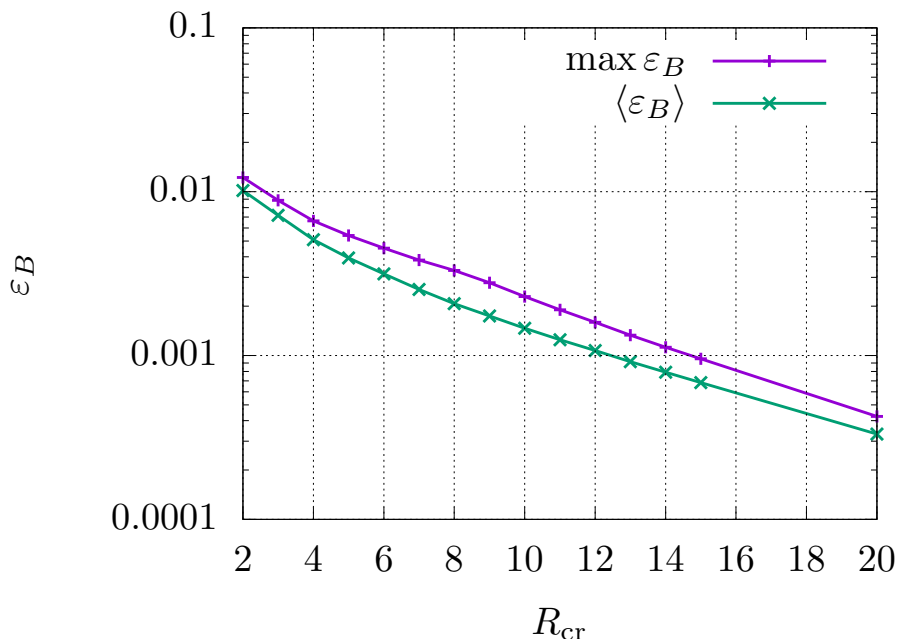


Рис. 6. Зависимость максимальной $\max \varepsilon_B$ и средней $\langle \varepsilon_B \rangle$ ошибки по образцу для поля демагнетизации, рассчитанного FMM, от значения критического радиуса R_{cr} .

На рисунке 6 показана зависимость разницы между полем демагнетизации системы в стационарном состоянии, посчитанным с помощью быстрого мультипольного метода и с помощью MuMax3, от критического радиуса:

$$\varepsilon_B(\mathbf{r}) = |\mathbf{B}_{FMM}(\mathbf{r}) - \mathbf{B}_{MuMax3}(\mathbf{r})|.$$

На рисунке 7 изображена зависимость компоненты средней намагниченности от времени для динамической части задачи, полученная с помощью MuMax3 и с помощью разработанного программного кода, где поле демагнетизации рассчитывалось быстрым мультипольным методом с разными значениями критического радиуса. Зависимость средней и максимальной ошибки по времени, вычисляемая как:

$$\varepsilon(t) = |\mathbf{m}_{FMM}(t) - \mathbf{m}_{MuMax3}(t)|,$$

при расчете динамики от критического радиуса изображена на рисунке 8. Видно, что с увеличением критического радиуса точность моделирования динамики повышается.

В зависимости от поставленной задачи, критический радиус может выбираться на основе максимальной допустимой ошибки при моделировании динамики среднего магнитного момента или максимальной допустимой ошибки при расчете поля демагнетизации.

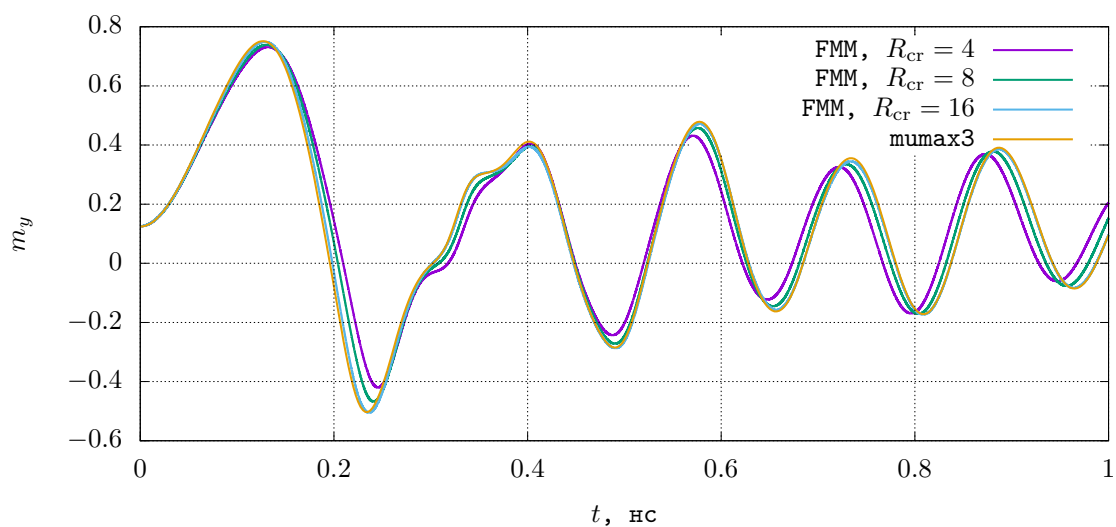


Рис. 7. Зависимость y -компоненты средней намагниченности от времени для разных значений критического радиуса R_{cr} .

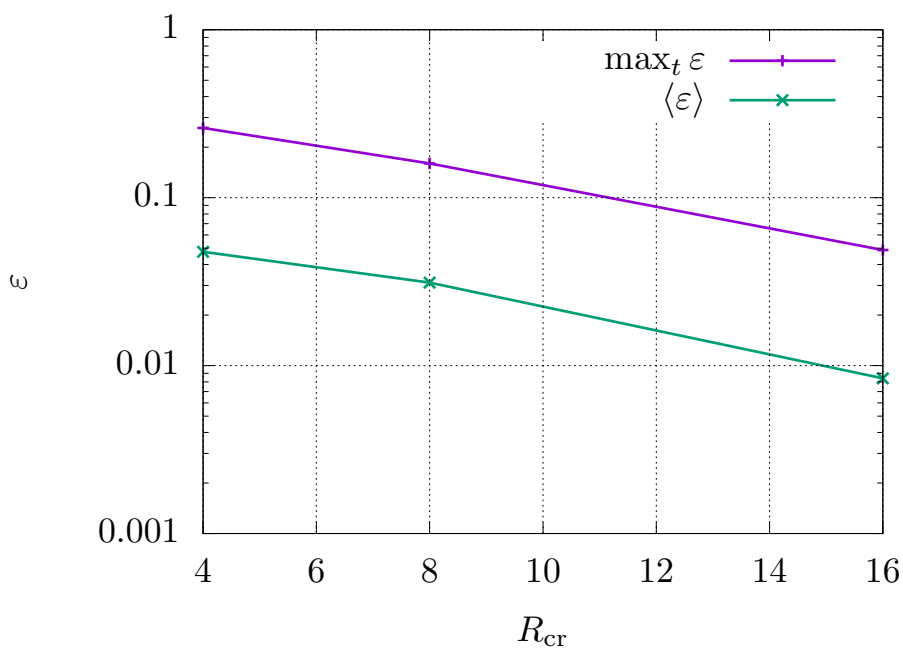


Рис. 8. Зависимость максимальной $\max_t \varepsilon$ и средней $\langle \varepsilon \rangle$ ошибки по времени для средней намагниченности для разных значений критического радиуса R_{cr} .

На рисунке 9 изображена зависимость длительности расчета для динамики от критического радиуса R_{cr} . Расчеты велись на одном 28-ядерном узле вычислительного кластера К-60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

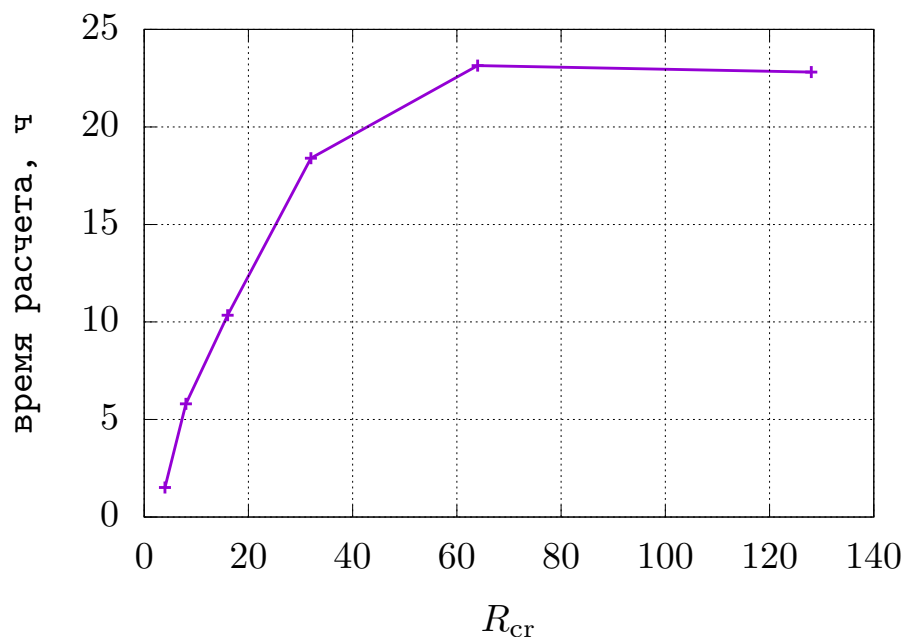


Рис. 9. Зависимость времени моделирования динамики системы от критического радиуса.

12. Выводы

В данной работе разработан и в деталях описан алгоритм расчета поля демагнетизации с помощью быстрого мультипольного метода.

Алгоритм реализован в виде программного комплекса на языках C++ и Python под OS Linux с применением библиотеки aiwlib.

Для верификации программного комплекса были выбраны стандартные постановки μMag , при этом результаты с хорошей точностью совпали с результатами моделирования с помощью программного пакета MuMax3. Особое внимание в работе уделено выбору сетки дискретизации и выбору безразмерной системы единиц при верификации на стандартных постановках μMag , что играет большую роль для обеспечения совпадения результатов.

За счет изменения ключевого параметра — критического радиуса — быстрый мультипольный метод позволяет достигать оптимального баланса между точностью расчета поля демагнетизации и производительностью кода в зависимости от постановки задачи.

Список литературы

- [1] A fast finite-difference method for micromagnetics using the magnetic scalar potential / C. Abert, G. Selke, B. Krüger, A. Drews // *Magnetics, IEEE Transactions.* — 2012. — Vol. 48, no. 3. — P. 1105–1109.

- [2] Fredkin D.R., Koehler T.R. Hybrid method for computing demagnetizing fields // IEEE Transactions on Magnetics. — 1990. — Vol. 26, no. 415.
- [3] Popović N., Praetorius. D. Applications of -Matrix Techniques in Micromagnetics // Computing. — 2004. — Vol. 74, no. 3. — P. 177–204.
- [4] FastMag: Fast micromagnetic simulator for complex magnetic structures / R. Chang, S. Li, M. V. Lubarda et al. // Journal of applied physics. — 2011. — Vol. 109.
- [5] Greengard L., Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations. // J. Comput. Phys. — 1987. — Vol. 73. — P. 325–348.
- [6] Carrier J., Greengard L., Rokhlin V. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. // SIAM J. Sci. Stat. Comput. — 1988. — Vol. 9, no. 4. — P. 669–686.
- [7] The design and verification of Mumax3 / A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik et al. // AIP Advances. — 2014. — Vol. 4.
- [8] Fast Fourier transform on multipoles for rapid calculation of magnetostatic fields / H. H. Long, E. T. Ong, Z. J. Liu, E. P. Li // Magnetics, IEEE Transactions. — 2006. — Vol. 42, no. 2. — P. 295–300.
- [9] Brown W. F. Micromagnetic. — New York: Wiley, 1963.
- [10] Xiaobo T., Baras J. S., Krishnaprasad P. S. Fast Evaluation of Demagnetizing Field in Three Dimensional // Technical Research Report. — 2001.
- [11] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib — инструмент для создания приложений численного моделирования, визуализации и анализа результатов // Научная визуализация. — 2018. — Т. 10, № 1. — С. 110–127.
- [12] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2017. — № 140. — С. 1–18.
- [13] Иванов А.В. Использование библиотеки aiwlib на примере численного моделирования стохастического резонанса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2018. — № 89. — С. 1–30.
- [14] mumax³ GPU-accelerated micromagnetism. — <http://mumax.github.io/>.
- [15] μ MAG — Micromagnetic Modeling Activity Group. — <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.html>.