

Simularea dinamicii de magnetizare cu ecuația LLG

Sesiunea de comunicări științifice ale studenților, București, 13 mai 2011

Autor:

Ing. Daniel DAN, masterat NANO, anul II, Fac. de Ing. Electrică

Coordonatori științifici:
Prof. Dr. Ing. Daniel IOAN
Conf. Dr. Ing. Gabriela CIUPRINA

ELTH



CUPRINS

- Introducere
- Formularea problemei
- Abordarea numerică
- Diferențe finite
- Metoda Euler explicită
- Metoda Runge Kutta 4
- Rezultate
- Bibliografie

Introducere

- **Fizica computațională** – studiul și implementarea algoritmilor numerici pentru rezolvarea problemelor în fizică. Reprezintă legătura dintre fizica teoretică și fizica experimentală.
 - Aplicațiile fizicii computaționale:
 - Rezolvarea de ecuații diferențiale;
 - Evaluarea integralelor;
 - Metode pseudo – spectrale;
 - Metode de rezolvare a ecuațiilor diferențiale cu derivate parțiale etc.
- 1935 – Lev Davidovich Landau (1908 - 1968) și Evgeny Lifshitz (1915 - 1985) prezintă ecuația LL - această ecuație fiind un model matematic pentru dinamica de magnetizare ce are loc într-un solid (permalloy).
- 1955 – T.L. Gilbert înlocuiește termenul ce dă amortizarea prin introducerea unei așa numite viteze de viscozitate. Ecuația LL devine ec. LLG.

Introducere

- Ecuația Landau – Lifshitz – Gilbert:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \gamma M_s \vec{m} \times \vec{h}_{ef}(\vec{m}, t) + \gamma M_s \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{h}_{ef}(\vec{m}, t)), \quad (1)$$

pe $\Omega \times (0, T)$;

$$\vec{h}_{ef}(\vec{m}, t) = -\frac{\delta g}{\delta \vec{m}} = \vec{h}_{ex} + \vec{h}_m + \vec{h}_{an} + \vec{h}_a(t) \quad \text{- câmpul efectiv;}$$

$$\vec{h}_{ex} = \frac{A}{\mu_0 M_s^2} (\nabla^2 \vec{m}), \quad \text{- câmpul de schimb; } \quad \gamma\text{-ct. giromagnetica}$$

$$\vec{h}_m = -\frac{1}{4\pi} \nabla \int_{\Omega} \nabla' \cdot \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \cdot \vec{m}(\vec{r}') dV_{\vec{r}'}, \quad \text{câmpul magnetostatic}$$

$$\vec{h}_{an} = \frac{K_1}{\mu_0 M_s^2} \vec{e}_{an}(\vec{r}) (\vec{e}_{an}(\vec{r}) \cdot \vec{m}(\vec{r})), \quad \text{- câmpul de anizotropie}$$

A – constanta de schimb; K_1 – constanta de anizotropie;

K_1 – constanta de anizotropie uniaxială; \vec{e} – versorul axei ușoare;

Formulara problemai

Fie ecuația de forma:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \vec{m} \times \Delta \vec{m} - \alpha \vec{m} \times (\vec{m} \times \Delta \vec{m}) \quad (2), \quad \Omega \times (0, T);$$

$$\vec{m} : \Omega \subset \square^3, \quad \vec{m} = \frac{\vec{M}}{M_s}; \quad \vec{h}_{ef} = \frac{\vec{H}_{ef}}{M_s},$$

Condițiile de unicitate:

1. Condiția inițială: $\vec{m}(\vec{r}, 0) = \vec{m}_0$;
2. Condiții la limită pe $\partial\Omega$.

Abordarea numerică

- Se consideră:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \vec{m} \times \frac{\partial^2 \vec{m}}{\partial x^2} \quad (3),$$

$$\vec{m} : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \Omega' = [a, b] = [-1, 1], T = 1, \Delta \vec{m} = \partial^2 \vec{m} / \partial x^2.$$

care reprezintă ecuația LLG fără amortizare.

Poate fi ușor de verificat că:

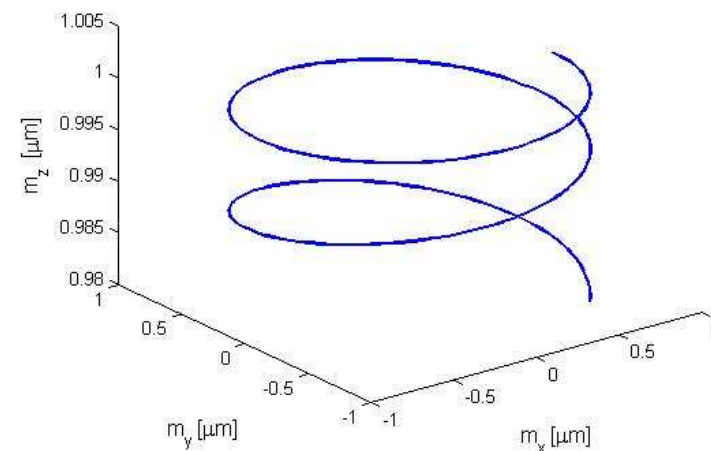
$$m_x(x, t) = \sin \beta \cos \left(kx - \left(|k|^2 \cos \beta \right) t \right),$$

$$m_y(x, t) = \sin \beta \sin \left(kx - \left(|k|^2 \cos \beta \right) t \right),$$

$$m_z(x, t) = \cos \beta.$$

este soluția exactă pentru (3).

Miscarea de precesie a vectorului moment magnetic



Abordare numerică

Sistemul :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial m_x}{\partial t} \\ \frac{\partial m_y}{\partial t} \\ \frac{\partial m_z}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 m_y}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 m_z}{\partial x^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ m_x & m_y & m_z \\ \frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 m_y}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 m_z}{\partial x^2} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial m_x}{\partial t} = m_y \frac{\partial^2 m_z}{\partial x^2} - m_z \frac{\partial^2 m_y}{\partial x^2} \\ \frac{\partial m_y}{\partial t} = m_z \frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} - m_x \frac{\partial^2 m_z}{\partial x^2} \\ \frac{\partial m_z}{\partial t} = m_x \frac{\partial^2 m_y}{\partial x^2} - m_y \frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} \end{cases} \quad (4)$$

Abordarea numerică

- Discretizare spațială:

$$\frac{\partial^2 \bar{m}}{\partial x^2} = \frac{\bar{m}_{i+1}^j - 2\bar{m}_i^j + \bar{m}_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} = \frac{\bar{h}_{x,i}^j \hat{x} + \bar{h}_{y,i}^j \hat{y} + \bar{h}_{z,i}^j \hat{z}}{(\Delta x)^2} \quad (5),$$

$$x_i = a + (i-1)\Delta x, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad a + N\Delta x = b;$$

$$h_{x,i}^j = m_{x,i+1}^j - 2m_{x,i}^j + m_{x,i-1}^j;$$

$$h_{y,i}^j = m_{y,i+1}^j - 2m_{y,i}^j + m_{y,i-1}^j; \quad (6)$$

$$h_{z,i}^j = m_{z,i+1}^j - 2m_{z,i}^j + m_{z,i-1}^j.$$

- Discretizarea temporală:

$$\frac{\partial \bar{m}}{\partial t} = \frac{\bar{m}_i^{j+1} - \bar{m}_i^j}{\Delta t} \quad (7), \quad t_j = (j-1)\Delta t, \quad i = \overline{1, M+1}, \quad M\Delta t = T;$$

Diferențe finite

- Ecuația discretizată:

$$\frac{\vec{m}_i^{j+1} - \vec{m}_i^j}{\Delta t} = \vec{m}_i^j \times \frac{\vec{m}_{i+1}^j - 2\vec{m}_i^j + \vec{m}_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} \quad (7),$$

- sau

$$\frac{m_{x,i}^{j+1} - m_{x,i}^j}{\Delta t} = -m_{y,i}^j \frac{m_{z,i-1}^j - 2m_{z,i}^j + m_{z,i+1}^j}{\Delta x^2} + m_{z,i}^j \frac{m_{y,i-1}^j - 2m_{y,i}^j + m_{y,i+1}^j}{\Delta x^2}$$

$$\frac{m_{y,i}^{j+1} - m_{y,i}^j}{\Delta t} = -m_{z,i}^j \frac{m_{x,i-1}^j - 2m_{x,i}^j + m_{x,i+1}^j}{\Delta x^2} + m_{x,i}^j \frac{m_{z,i-1}^j - 2m_{z,i}^j + m_{z,i+1}^j}{\Delta x^2}$$

$$\frac{m_{z,i}^{j+1} - m_{z,i}^j}{\Delta t} = -m_{x,i}^j \frac{m_{y,i-1}^j - 2m_{y,i}^j + m_{y,i+1}^j}{\Delta x^2} + m_{y,i}^j \frac{m_{x,i-1}^j - 2m_{x,i}^j + m_{x,i+1}^j}{\Delta x^2}$$

Metoda Euler Explicită

- Notând cu $h = \Delta t / \Delta x^2$, discretizarea:

$$m_{x,i}^{j+1} = m_{x,i}^j + hF_1(m_{y,i}^j, m_{z,i}^j, t_j), \quad F_1(m_{y,i}^j, m_{z,i}^j, t_j) = m_{y,i}^j h_{z,i}^j - m_{z,i}^j h_{y,i}^j;$$

$$m_{y,i}^{j+1} = m_{y,i}^j + hF_2(m_{z,i}^j, m_{x,i}^j, t_j), \quad F_2(m_{z,i}^j, m_{x,i}^j, t_j) = m_{z,i}^j h_{x,i}^j - m_{x,i}^j h_{z,i}^j;$$

$$m_{z,i}^{j+1} = m_{z,i}^j + hF_3(m_{y,i}^j, m_{x,i}^j, t_j), \quad F_3(m_{y,i}^j, m_{x,i}^j, t_j) = m_{x,i}^j h_{y,i}^j - m_{y,i}^j h_{x,i}^j;$$

$$h_{x,i}^j = m_{x,i+1}^j - 2m_{x,i}^j + m_{x,i-1}^j;$$

$$h_{y,i}^j = m_{y,i+1}^j - 2m_{y,i}^j + m_{y,i-1}^j;$$

$$h_{z,i}^j = m_{z,i+1}^j - 2m_{z,i}^j + m_{z,i-1}^j.$$

Metoda Runge - Kutta 4

Sistemul :

Momentul magnetic

redus t_{j+1} la este dat:

$$\vec{K}_1 = \vec{F}(\vec{m}_i^j, t_j),$$

$$\vec{K}_2 = \vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{h}{2}\vec{K}_1, t_j + \frac{h}{2}\right),$$

$$\vec{K}_3 = \vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{h}{2}\vec{K}_2, t_j + \frac{h}{2}\right),$$

$$\vec{K}_4 = \vec{F}(\vec{m}_i^j + h\vec{K}_3, t_j + h).$$

$$\vec{K}_n = [K_{n1}, K_{n2}, K_{n3}]^T, n = 1, 2, 3, 4.$$

sau:

$$\vec{m}_i^{j+1} = \vec{m}_i^j + \frac{h}{6}(\vec{K}_1 + 2\vec{K}_2 + 2\vec{K}_3 + \vec{K}_4)$$

$$m_{x,i}^{j+1} = m_{x,i}^j + \frac{h}{6}(K_{11} + 2K_{21} + 2K_{31} + K_{41}),$$

$$m_{y,i}^{j+1} = m_{y,i}^j + \frac{h}{6}(K_{12} + 2K_{22} + 2K_{32} + K_{42}),$$

$$m_{z,i}^{j+1} = m_{z,i}^j + \frac{h}{6}(K_{13} + 2K_{23} + 2K_{33} + K_{43}).$$

Metoda Runge – Kutta Fehlberg

- Fiecare pas de timp cere utilizarea următoarelor expresii:

$$\vec{K}_1 = h\vec{F}(\vec{m}_i^j, t_j), \quad \vec{K}_n = [K_{n1}, K_{n2}, K_{n3}]^T, \quad n=1,2,3,4.$$

$$\vec{K}_2 = h\vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{1}{4}\vec{K}_1, t_j + \frac{1}{4}h\right),$$

$$\vec{K}_3 = h\vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{3}{32}\vec{K}_1 + \frac{9}{32}\vec{K}_2, t_j + \frac{3}{8}h\right),$$

$$\vec{K}_4 = h\vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{1932}{2197}\vec{K}_1 + \frac{7200}{2197}\vec{K}_2 + \frac{7296}{2197}\vec{K}_3, t_j + \frac{12}{13}h\right),$$

$$\vec{K}_5 = h\vec{F}\left(\vec{m}_i^j + \frac{439}{216}\vec{K}_1 - 8\vec{K}_2 + \frac{3680}{513}\vec{K}_3 - \frac{845}{4104}\vec{K}_4, t_j + h\right),$$

$$\vec{K}_6 = h\vec{F}\left(\vec{m}_i^j - \frac{8}{27}\vec{K}_1 + 2\vec{K}_2 - \frac{3544}{2565}\vec{K}_3 + \frac{1859}{4104}\vec{K}_4 - \frac{11}{40}\vec{K}_5, t_j + h\right).$$



Metoda Runge – Kutta Fehlberg

O aproximare a soluției problemei cu valori la limită este făcută folosind o metoda RK 4:

$$\vec{m}_i^{j+1} = \vec{m}_i^j + \left(\frac{25}{216} \vec{K}_1 + \frac{1408}{2565} \vec{K}_3 + \frac{2197}{4101} \vec{K}_4 - \frac{1}{5} \vec{K}_5 \right).$$

O soluție mai bună este obținută dacă aplicăm RK5:

$$\vec{m}_i^{j+1} = \vec{m}_i^j + \left(\frac{16}{135} \vec{K}_1 + \frac{6656}{12825} \vec{K}_3 + \frac{28561}{56430} \vec{K}_4 - \frac{9}{50} \vec{K}_5 + \frac{2}{55} \vec{K}_6 \right).$$

Pasul optim $\delta \Delta t$ poate fi determinat prin înmulțirea scalarului δ cu pasul curent Δt . Scalarul este:

$$\delta = \left(\frac{tol \cdot h}{2 |\vec{m}_i^{j+1} - \vec{m}_i^{j+1}|} \right)^{1/4} \approx 0.84 \left(\frac{tol \cdot h}{|\vec{m}_i^{j+1} - \vec{m}_i^{j+1}|} \right)^{1/4}$$



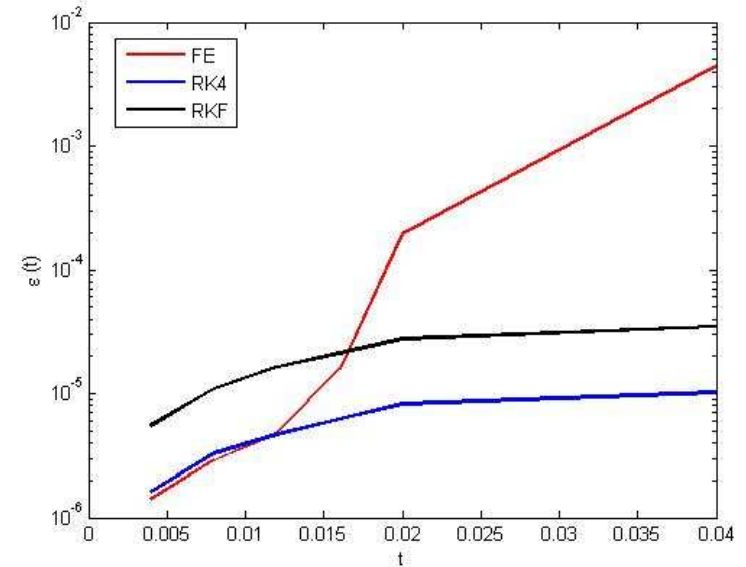
Rezultate – Erori

Eroarea absolută

Pasul spațial: $\Delta x = 0.01$

Pasul temporal: $\Delta t = 10^{-4}$

Pasul: $h = \Delta t / \Delta x^2$



t	FE	RK4	RKF
	$\ \vec{m}_h - \vec{m}_e\ _\infty$	$\ \vec{m}_h - \vec{m}_e\ _\infty$	$\ \vec{m}_h - \vec{m}_e\ _\infty$
4.0 E-03	1.4093E-6	1.6257 E-6	5.4923 E-6
8.0 E-03	2.8944E-6	3.2848 E-6	1.0953 E-5
1.2 E-02	4.7824E-6	4.6468 E-6	1.6295 E-5
1.6 E-02	1.5620E-5	6.1965 E-6	2.1226 E-5
2.0 E-02	1.9470E-4	8.1937 E-6	2.7513 E-5
2.4 E-02	4.5000E-3	1.0195 E-5	3.4596 E-5

Tabela I

ACURATEȚEA CELOR TREI SCHEME

Rezultate - Erori

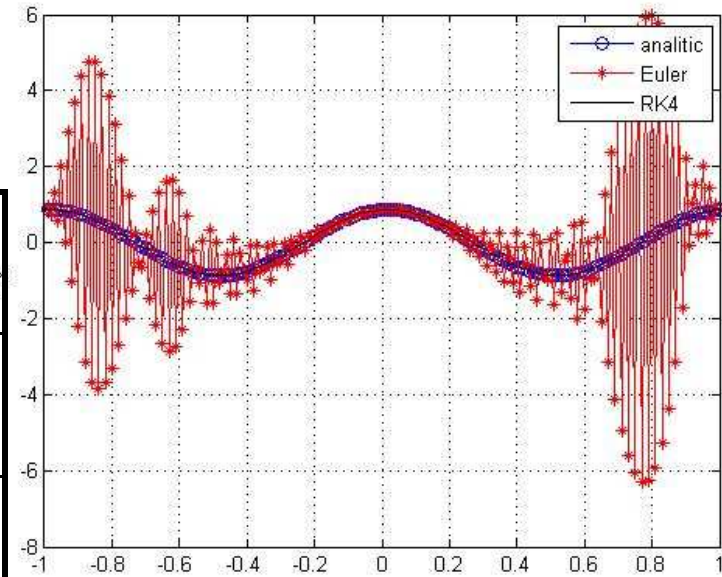
Grafic 3

$$\Delta t = 5 \cdot 10^{-6}, \quad \Delta x = 0,01,$$

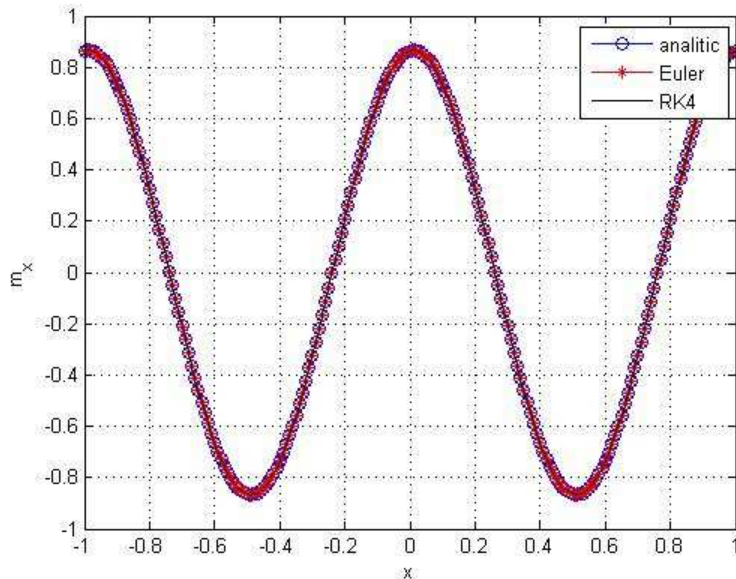
$$h = \Delta t / \Delta x^2 = 5E-4, \quad k = 2\pi, \beta = \pi/3$$

Erori absolute:

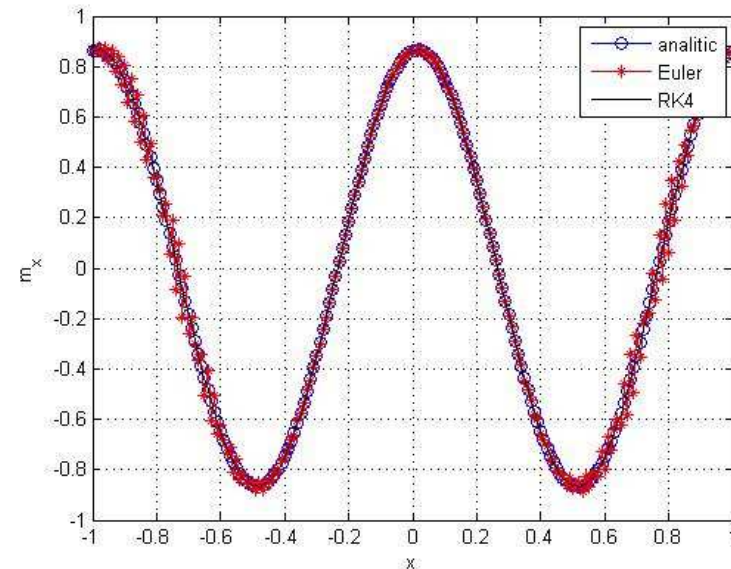
Nr. Iter.	700	1000	1200
\Rightarrow			
FE	5E-4	0,1246	6,3633
RK4	2,9E-5	4,1E-5	4,8E-5



Grafic 2

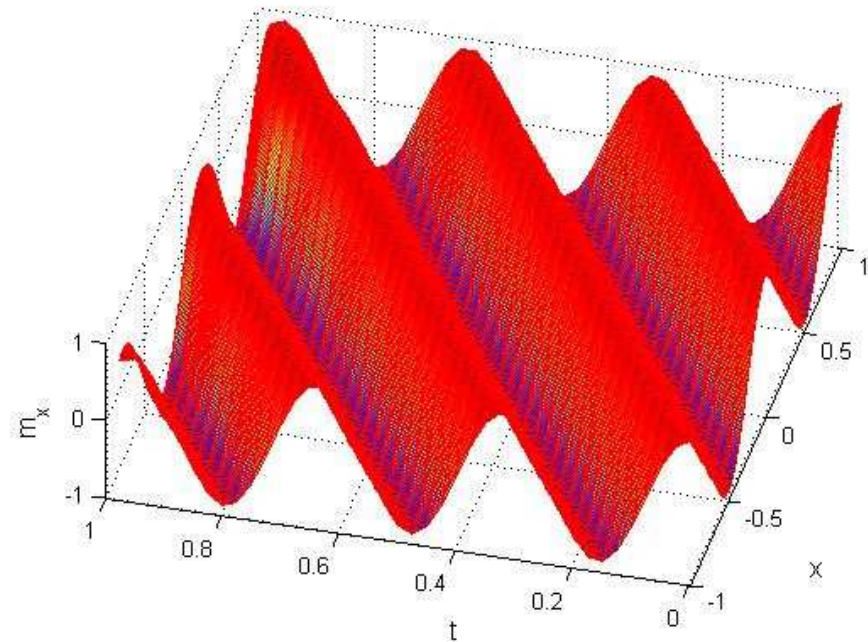
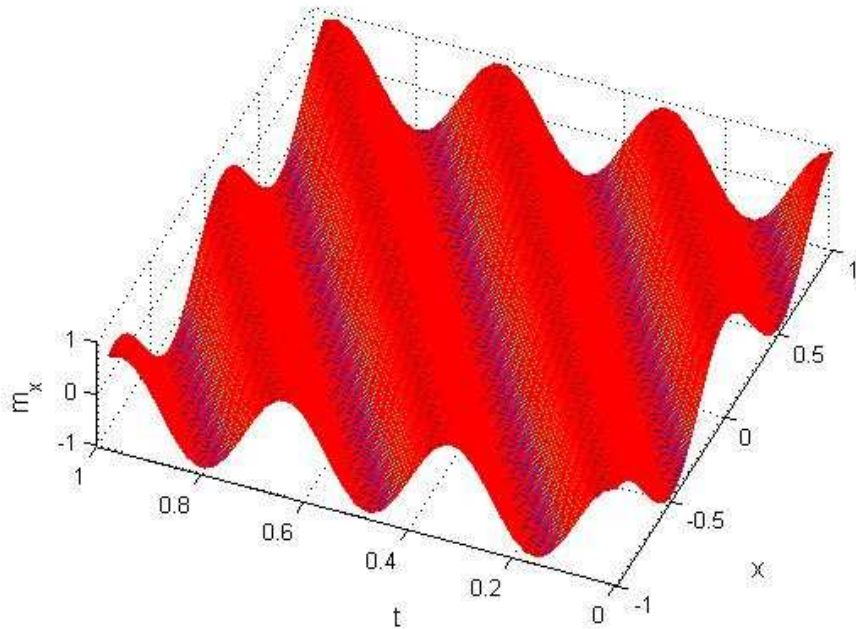


Grafic 1



Rezultate – Metoda RK4

Soluția analitică



Soluția numerică



Concluzii

- Schema în diferențe finite este aplicabilă ecuației LLG în forma considerată.
- Dintre metodele cu pas considerate, metoda RK4 este cea mai buna metoda cu autostart.
- Metodele cu autostart explicite sunt preferabile metodelor implicite deoarece primele sunt mult mai stabile numeric.
- Dezavantajul metodelor cu pas este dependența lor de pasul de discretizare cât și de raportul h .



Bibliografie

- [1] D. Dan, S. Malureanu, “Modelling of the magnetization process based on the Landau - Lifshitz - Gilbert equation”, ATEE, 2011, Bucharest.
- [2] D.L.wen, H.X. zhong, Z.K. sheng, and Y.B. chu, “Micromagnetic simulation and experimental study on microwave permeability of nano-magnetic films”,2007.
- [3] F.Ciubotaru, A.Stancu and L.Stoleriu,”LLG study of the precessional switching process in pulsed magnetic fields”, Journal of Optoelectronics and Advanced materials, vol.6, nr. 3, p.1017 – 1021, 2004.
- [4] W.F.B. Jr., Micromagnetics. Interscience Publishers, 1963.
- [5] M. d’Aquino, “Nonlinear magnetization dynamics in thin- films and nanoparticles”, Ph.D. dissertation, Facolta di Ingineria, 2005.



MULȚUMESC!