

УДК 537.621, 519.688

## АЛГОРИТМ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ ФЕРРОМАГНЕТИКА НА ОСНОВЕ МЕТОДА МНОЖИТЕЛЕЙ ЛАГРАНЖА

А. В. Изотов<sup>1</sup>, Б. А. Беляев<sup>2</sup>, М. М. Валиханов<sup>1</sup>, С. В. Поленга<sup>1</sup>, А. В. Стефанюк<sup>1</sup>

Описан эффективный подход для расчета равновесного распределения намагниченности в дискретной микромагнитной модели ферромагнетика, основанный на методе неопределенных множителей Лагранжа. Проанализированы проблемы сходимости итерационного процесса и устойчивости полученного решения. Реализация разработанного алгоритма для численного анализа равновесного состояния ферромагнитных объектов показала не только существенное уменьшение объема требуемой памяти, но и значительное ускорение процесса вычислений.

**Ключевые слова:** микромагнитное моделирование, равновесное распределение намагниченности, метод неопределенных множителей Лагранжа, быстрое преобразование Фурье, устойчивость решения.

**1. Введение.** В настоящее время использование компьютерного моделирования стало фундаментальным инструментом для глубокого понимания экспериментальных результатов и сравнения их с теоретическими прогнозами. Это особенно важно для такой области физики, как микромагнетизм, где возможности аналитических вычислений весьма ограничены. Численное микромагнитное моделирование занимает промежуточное положение между теорией и экспериментом. При этом оно является особенно эффективным, а во многих случаях и единственно возможным инструментом изучения физики реальных объектов, когда практически невозможно получить аналитическое решение задачи и существуют большие технические трудности в реализации эксперимента.

В рамках микромагнитной модели решение ряда задач приводит к важной проблеме определения равновесного состояния или равновесной конфигурации распределения магнитных моментов в исследуемом объекте. К числу таких задач относятся задачи исследования статических магнитных характеристик сред, например изучение доменной структуры [1] или петель гистерезиса при перемагничивании образцов [2], а также задачи исследования их динамических свойств, например определение нормальных мод магнитных колебаний наночастиц [3, 4], или расчет спектра поглощения спин-волнового резонанса [5]. В настоящее время наиболее распространенный подход, позволяющий определить равновесную конфигурацию магнитных моментов, основан на различных методах интегрирования динамического уравнения Ландау–Лифшица [6]. Этот подход является наиболее общим и реализован в таких известных пакетах по микромагнитному моделированию, как OOMMF [7] и magpar [8]. Он обладает важными преимуществами: позволяет изучать как статические, так и динамические свойства системы. Однако несмотря на это, данный подход определения равновесного состояния является относительно медленным, поскольку для получения конечного распределения происходит вычисление всей эволюции (прецессионного движения вокруг равновесного положения) магнитной системы во времени [6].

Ранее в [9–11] нами предложен другой подход для определения равновесного состояния намагниченности, основанный на решении системы линейных неоднородных уравнений с неопределенными множителями Лагранжа. В настоящей статье этот подход будет рассмотрен более подробно с акцентированием внимания на численном алгоритме и вычислительных особенностях, а также на ускоряющих процедурах, позволяющих значительно сократить объем затрачиваемых ресурсов ЭВМ при моделировании.

**2. Постановка задачи.** Микромагнетизм — это классическая феноменологическая теория, которая не ставит своей целью объяснения природы спонтанной намагниченности, магнитной анизотропии и

<sup>1</sup> Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования “Сибирский федеральный университет” (ФГАОУ ВПО “Сибирский федеральный университет”), просп. Свободный, 79, 660041, Красноярский край, г. Красноярск; А. В. Изотов, доцент, iztv@mail.ru; М. М. Валиханов, доцент, marat\_valihanov@mail.ru; С. В. Поленга, аспирант, twinlive@gmail.com; А. В. Стефанюк, студент, stef2n@mail.ru

<sup>2</sup> Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (Институт физики СО РАН), Академгородок, 50/38, 660036, Красноярск, зав. лабораторией; Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования “Сибирский государственный аэрокосмический университет им. акад. М. Ф. Решетнева” (ФГБОУ ВПО СибГАУ), просп. им. газеты “Красноярский рабочий”, 31, 660014, Красноярск, профессор; e-mail: belyaev@iph.krasn.ru

других эффектов, присущих магнитоупорядоченным веществам. Такое объяснение можно дать только на микроскопическом квантово-механическом уровне. В теории микромагнетизма эти эффекты постулируются и учитываются соответствующим образом записанными выражениями для свободной энергии. Эта теория ставит своей задачей найти, исходя только из выражения свободной энергии и общего уравнения движения намагниченности, зависимость намагниченности  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$  от координаты и времени [12].

Возможность такой феноменологической теории основывается на том, что в результате обменного взаимодействия направление спинов на соседних узлах решетки может изменяться лишь на малый угол. Поэтому можно аппроксимировать углы, характеризующие направления спинов, непрерывными функциями координат совершенно аналогично замене индивидуальных атомных масс непрерывной плотностью массы в механике: суммы по узлам решетки заменяются интегралами по объему. Искомой величиной становится вектор намагниченности  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ , компоненты которого непрерывно меняются в пространстве и времени. Экспериментально установлено, что в ферромагнитном образце при заданной температуре ниже точки Кюри величина  $|\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)| = M_s$  является постоянной и не зависит от пространственных координат, если образец находится в сравнительно небольшом постоянном магнитном поле.

Согласно феноменологической теории, используемой в микромагнетизме, свободная энергия  $F$  ферромагнитного тела с конфигурацией намагниченности  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  в большинстве случаев может быть записана как сумма энергии внешнего постоянного поля  $\mathbf{H}$  (энергии Зеемана), энергии обменного взаимодействия (обменной жесткости), энергии размагничивающего поля (или магнитостатической энергии), а также энергии магнитной анизотропии

$$F = \int_V \left[ -\mathbf{H} \cdot \mathbf{M} + \frac{A}{M_s^2} (\nabla \mathbf{M})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{H}^m \cdot \mathbf{M} - \frac{K}{M_s^2} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{n})^2 \right] dV. \quad (1)$$

Параметры ферромагнитного образца заданы константой обменной жесткости  $A$ , намагниченностью насыщения  $M_s$ , константой одноосной магнитной анизотропии  $K$ , единичным вектором  $\mathbf{n}$ , совпадающим с направлением оси легкого намагничивания. Поле размагничивания  $\mathbf{H}^m$  определяется из условий магнитостатического приближения уравнений Максвелла  $\text{rot}(\mathbf{H}^m) = 0$  и  $\text{div}(\mathbf{H}^m) = -4\pi \text{div}(\mathbf{M})$ . При этом интегрирование распространяется на весь объем образца  $V$ .

Размагничивающее поле обусловлено наличием объемных и поверхностных “магнитных зарядов” в образце и для заданной конфигурации намагниченности  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  может быть вычислено интегрированием по всем магнитным полям элементарных диполей, на которые всегда можно разбить объект. С учетом обозначения  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , поле размагничивания может быть записано в виде

$$\mathbf{H}^m(\mathbf{M}, \mathbf{r}) = \int_V \left[ \frac{3(\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}'))\boldsymbol{\rho}}{\rho^5} - \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{\rho^3} \right] dV', \quad (2)$$

а также может быть выражено через симметричный тензор, описывающий магнитостатическое взаимодействие  $G^m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  [13]:

$$\mathbf{H}^m(\mathbf{M}, \mathbf{r}) = \int_V G^m(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{M}(\mathbf{r}') dV'. \quad (3)$$

При микромагнитном моделировании не всегда требуется включать в функционал свободной энергии все члены, записанные в (1). Например, при изучении изотропных ферромагнетиков энергию анизотропии можно не учитывать или в случае однородно намагниченных тел энергия обменного взаимодействия обращается в нуль. В то же время, учет или неучет какого-либо члена энергии сильно сказывается на вычислительных возможностях алгоритма. Мы должны различать два важных случая.

*Локальное взаимодействие.* Составляющие энергии, включая обмен, анизотропию и энергию Зеемана, описывают локальный (в пространстве) характер взаимодействия. Значит, локальное изменение намагниченности влияет на соответствующее поле вблизи точки, где это изменение произошло.

*Дальнодействующее взаимодействие.* С другой стороны, магнитостатическая энергия по определению описывается далекодействующим взаимодействием. Поэтому любое локальное изменение намагниченности приводит к глобальному изменению  $\mathbf{H}^m$ , что делает решение задачи серьезной проблемой, главным образом, из-за большого количества требуемых вычислений.

Для того чтобы найти равновесное распределение намагниченности, необходимо минимизировать полную энергию ферромагнетика (1) при условии, что абсолютное значение намагниченности является

постоянной величиной  $M^2(\mathbf{r}) = M_s^2$ . Это нелинейное ограничение вместе с нелокальностью магнито-статического взаимодействия приводит к довольно сложной задаче минимизации, которая может быть аналитически решена только для некоторых простых случаев, таких как, например, вычисление критического поля перемагничивания в однородно намагниченных эллипсоидальных частицах или бесконечных цилиндрах [12]. Поэтому фактически во всех практически важных случаях решение этой задачи возможно только численными методами.

**3. Дискретная модель ферромагнетика.** При решении микромагнитных задач, как правило, используют два основных метода дискретизации исследуемого объекта: метод конечных разностей и метод конечных элементов, при этом выбор метода дискретизации не тривиален и зависит от многих факторов. В настоящее время нет единой точки зрения, какой из методов лучше для численного решения задач теории микромагнетизма. Мы остановились на конечно-разностном методе, который по сравнению с методом конечных элементов хуже подходит для аппроксимации искривленных поверхностей образцов, но в то же время обладает более высоким быстродействием при расчете размагничивающего поля [14].

В случае пространственной дискретизации методом конечных разностей ферромагнетик представляется дискретной средой, состоящей из  $N$  одинаковых (объемом  $V_0 = \Delta x \Delta y \Delta z$ ) прямоугольных параллелепипедов с образующими  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  и  $\Delta z$ , параллельными координатным осям. Предполагается, что в пределах каждой ячейки намагниченность однородна и описывается вектором  $\mathbf{M}_i = (M_i^{(x)}, M_i^{(y)}, M_i^{(z)})$ , где  $i = 1, \dots, N$ . Здесь и далее мы будем использовать следующую индексацию векторных и тензорных величин: нижний индекс всегда будет указывать на определенный дискретный элемент системы, в то время как верхний (в круглых скобках) — на соответствующую компоненту данной величины. С учетом обозначения  $J = A/d^2$ , где  $d^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2$  — квадрат расстояния между соседними дискретными элементами, функционал свободной энергии (1) будет иметь вид

$$F = -V_0 \sum_{i=1}^N \left[ \mathbf{H}_i \mathbf{M}_i - \frac{J}{M_s^2} \sum_{j=1}^{N_i} (1 - \mathbf{M}_i \mathbf{M}_j) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \mathbf{M}_i G_{ij}^m \mathbf{M}_j + \frac{K_i}{M_s^2} (\mathbf{M}_i \mathbf{n}_i)^2 \right]. \quad (4)$$

Здесь  $J$  — постоянная обменного взаимодействия (при этом второй знак суммы по  $j$  в обменной энергии распространяется только на ближайших  $N_i$  соседей  $i$ -го дискретного элемента),  $K_i$  — константа одноосной магнитной анизотропии, а  $\mathbf{n}_i$  — единичный вектор, совпадающий с направлением оси легкого намагничивания в соответствующей ячейке.

Энергия размагничивающего поля, обусловленная магнито-статическим взаимодействием между  $i$ -м и  $j$ -м дискретными элементами, описывается симметричным тензором

$$G_{ij}^m \equiv G^m(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \begin{bmatrix} G_{ij}^{m(xx)} & G_{ij}^{m(xy)} & G_{ij}^{m(xz)} \\ G_{ij}^{m(xy)} & G_{ij}^{m(yy)} & G_{ij}^{m(yz)} \\ G_{ij}^{m(xz)} & G_{ij}^{m(yz)} & G_{ij}^{m(zz)} \end{bmatrix}.$$

Для вычисления его компонент обычно пользуются либо приближением, основанным на учете взаимодействия пары точечных магнитных диполей [11]  $G_{ij}^m = -\frac{V_0}{|\boldsymbol{\rho}_{ij}|^3} \left[ E - \frac{3}{|\boldsymbol{\rho}_{ij}|^2} \boldsymbol{\rho}_{ij} \otimes \boldsymbol{\rho}_{ij} \right]$  (где  $E$  — единичная матрица размером  $3 \times 3$ ,  $\boldsymbol{\rho}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  — вектор расстояния между  $i$ -м и  $j$ -м диполями, а знак  $\otimes$  обозначает тензорное произведение), либо точным аналитическим выражением, полученным в работе [13], которое с точки зрения вычислений более трудоемкое.

По аналогии с тензором магнито-статического взаимодействия  $G_{ij}^m$  можно ввести симметричные тензоры, описывающие обменное взаимодействие  $G_{ij}^e \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  и магнитную анизотропию  $G_{ij}^a \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ , элементы которых определяются следующими выражениями:

$$G_{ij}^e = \frac{2J}{M_s^2} E \quad (\text{для соседних } i \text{ и } j), \quad G_{ij}^a = \begin{cases} \frac{2K_i}{M_s^2} \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (5)$$

Обозначим  $G_{ij} = G_{ij}^e + G_{ij}^m + G_{ij}^a$  — суммарный тензор взаимодействия между  $i$ -м и  $j$ -м дискретными элементами. Тогда выражение для свободной энергии (4) с точностью до членов, не зависящих от  $\mathbf{M}_i$ , может быть представлено в виде

$$F = -V_0 \sum_{i=1}^N \left[ \mathbf{H}_i \mathbf{M}_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \mathbf{M}_i G_{ij} \mathbf{M}_j \right]. \quad (6)$$

Данное выражение удобно записать в компактной матричной форме  $F(G, x, b) = -V_0 \left( \frac{1}{2} x^T G x + b^T x \right)$ , где  $G = (G_{ij}) \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$  — симметричная матрица,  $x = (M_i) \in \mathbb{R}^{3N \times 1}$ ,  $b = (H_i) \in \mathbb{R}^{3N \times 1}$ , а символ “Т” означает транспонирование.

Таким образом, моделируемая среда описывается обобщенной матрицей  $G$ , значения элементов которой характеризуют только магнитные свойства самой среды и не зависят от внешних условий, заданных вектором  $b$ , и от распределения в ней намагниченности, заданного вектором  $x$ .

**4. Определение равновесного состояния.** Условием равновесия намагниченности в ферромагнитной среде является стационарность (минимум) свободной энергии (6), т.е. равенство нулю ее вариации  $\delta F(M_1, \dots, M_N) = 0$ , при заданном ограничении  $M_i^2 = M_s^2$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Несложно показать, что этот функционал ограничен снизу, поэтому среди всех его минимумов имеется абсолютный. Прочие же локальные минимумы соответствуют метастабильным состояниям намагниченности. Как известно, относительная устойчивость метастабильных состояний функционала (6) приводит к магнитному гистерезису, т.е. к зависимости состояния системы от ее предыстории. Используя метод неопределенных множителей Лагранжа [15], необходимое условие равновесия может быть записано в виде системы уравнений  $\frac{\delta}{\delta M_k} \left[ F + V_0 \frac{\nu_k}{2} M_k^2 \right] = 0$ , где  $k = 1, \dots, N$ ,  $\nu_k$  — постоянные множители Лагранжа, а  $\delta/\delta M_k$  — вариационная производная, которая в нашем случае равна  $\partial/\partial M_k$ . Вводя эффективное локальное магнитное поле

$$H_k^{\text{eff}} = -\frac{1}{V_0} \frac{\delta F}{\delta M_k}, \quad (7)$$

получаем систему уравнений, которой должно удовлетворять любое равновесное распределение вектора  $M_0$  в ферромагнитной среде:

$$H_k^{\text{eff}}(M_{01}, \dots, M_{0N}) = \nu_k M_{0k} \quad (k = 1, \dots, N). \quad (8)$$

Физический смысл последних уравнений заключается в том, что в состоянии равновесия каждый магнитный момент  $M_{0k}$  совпадает по направлению с эффективным локальным магнитным полем, создаваемым как внешним полем, так и эффективными полями, обусловленными анизотропией, обменным и магнитостатическим взаимодействием дискретных элементов, входящих в состав рассматриваемой системы. Коэффициент пропорциональности  $\nu_k$  при этом обеспечивает постоянство длины магнитного момента.

Заметим, что входящие в выражение для свободной энергии (4) члены, учитывающие различные виды взаимодействия (за исключением энергии Зеемана), являются квадратичными формами относительно  $M_i$ , а поэтому система уравнений (8) является линейной. При этом связанный с наличием внешнего магнитного поля линейный член в (4) приводит к тому, что эта система становится неоднородной.

Эффективное локальное магнитное поле с учетом (7) принимает вид

$$H_k^{\text{eff}}(M_1, \dots, M_N) = H_k + H_k^e + H_k^m + H_k^a = H_k + \sum_{j=1}^N (G_{kj}^e + G_{kj}^m + G_{kj}^a) M_j = H_k + \sum_{j=1}^N G_{kj} M_j.$$

Если ввести диагональную матрицу  $D = \text{diag}(\nu_1, \nu_1, \nu_1, \nu_2, \nu_2, \dots, \nu_{3N})$ , состоящую из неопределенных множителей Лагранжа, то систему (8) можем записать в матричной форме

$$Gx - Dx = -b. \quad (9)$$

Следует отметить, что уравнения (8) и (9) автоматически не обеспечивают устойчивость равновесного распределения вектора  $M_0$ . Для этого необходимо, чтобы вторая вариация функционала свободной энергии (4) была больше нуля:  $\frac{\delta^2}{\delta M_k^2} \left[ F + V_0 \frac{\nu_k}{2} M_k^2 \right] > 0$ . Это неравенство позволяет сформулировать следующее условие устойчивости равновесного состояния: для полученного на основании уравнений (8) распределения  $M_0$  матрица  $C = G - D$  должна быть положительно определенной.

**5. Алгоритм решения.** Для решения матричного уравнения (9) мы использовали численный алгоритм, представляющий собой модификацию степенного метода, используемого в линейной алгебре при решении частичной проблемы собственных значений [16]. Для описания алгоритма сначала перепишем (9) в виде  $Dx = Gx + b$ . Обозначая  $y = Dx$ , запишем следующую итерационную схему:  $y_{i+1} = Gx_i + b$ ,  $x_{i+1} = D_{i+1}^{-1} y_{i+1}$ . Коэффициенты диагональной матрицы  $D_{i+1}^{-1}$  являются нормирующими множителями для  $x$  и подбираются таким образом, чтобы выполнялось условие нормировки  $|M| = M_s$ . Вычисления прекращались, если максимальное отклонение элементов вектора  $x$  не превышало заданное значение.

С физической точки зрения данный алгоритм основан на релаксации системы в соответствии с внутренними эффективными магнитными полями, действующими на каждый магнитный момент. Для текущего распределения намагниченности  $x_i$  вычисляется эффективное локальное поле  $y_{i+1}$  и в направлении действующей силы устанавливается новое распределение  $x_{i+1}$ .

Проблема, с которой приходится сталкиваться при реализации данного алгоритма, это закливание итераций при вычислении, сопровождающееся скачками между двумя неустойчивыми состояниями. Можно показать, что необходимым условием сходимости (в том числе отсутствия закливания) этого итерационного процесса является положительная определенность матрицы  $G$ . В нашем случае этого всегда можно добиться, если вместо матричного уравнения (9) решать уравнение  $G'x - D'x = -b$ , где  $G' = G + \xi E$ ,  $D' = D + \xi E$ , а  $E$  — единичная матрица соответствующего порядка. Выбрав подходящим образом  $\xi > 0$  (например,  $\xi = -\lambda_{\min}$ , где  $\lambda_{\min}$  — минимальное собственное значение матрицы  $G$ ), получим положительно определенную матрицу  $G'$ . С физической точки зрения мы увеличиваем энергию системы (4) на постоянную величину  $VM_s^2\xi$ , которая не зависит от распределения намагниченности  $M_i$ , поэтому эта добавка не влияет на определение равновесного состояния.

Полученное решение  $x_0$ , отвечающее равновесному распределению намагниченности  $M_0$ , необходимо проверить на устойчивость. Если распределению  $x_0$  соответствует диагональная матрица нормировочных коэффициентов (множителей Лагранжа)  $D_0'$ , то, как уже было показано, необходимым условием устойчивости полученного решения является положительная определенность матрицы  $C = G' - D_0'$ . Если  $\lambda_c$  — минимальное собственное значение матрицы  $C$ , а  $z_c$  — соответствующий ему собственный вектор, то условие устойчивости полученного решения можно записать как  $\lambda_c > 0$ . Если это условие не выполняется, то распределение намагниченности неустойчиво, а вектор  $z_c$  определяет направление релаксации системы.

**6. Ускоряющие процедуры.** Подавляющая часть машинного времени при анализе любой микромагнитной модели необходима для вычисления поля или энергии размагничивания. Вычисление этого поля для одной ячейки требует суммирования вкладов по всем другим ячейкам (2). Поэтому в простом алгоритме требуется  $O(N)$  операций для каждой ячейки (где  $N$  — общее количество ячеек), а для всей системы требуется  $O(N^2)$  операций. Все другие части эффективного поля могут быть вычислены непосредственно с использованием только намагниченности в соответствующем элементе и, возможно, плюс один или два соседних слоя, которые требуют порядка  $O(N)$  операций на одну итерацию для всего тела. Поэтому очень важно рассмотреть методы, позволяющие ускорить процесс вычисления поля размагничивания.

**6.1. Усечение радиуса магнитоэстатического взаимодействия.** В силу дальнедействующей природы, присущей магнитоэстатическому взаимодействию, матрица  $G^m = (G_{ij}^m) \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$  является плотной в отличие от матриц, отвечающих обменному взаимодействию  $G^e = (G_{ij}^e) \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$  и магнитной анизотропии  $G^a = (G_{ij}^a) \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$ , у которых в соответствии с (5) лишь относительно небольшое число элементов будет отлично от нуля. Однако в ряде случаев при моделировании магнитных сред радиус магнитоэстатического взаимодействия можно ограничить и учитывать влияние только некоторого небольшого количества соседних дискретных элементов, попадающих в усеченную область [11]. В результате матрица  $G^m$  и, как следствие, обобщенная матрица взаимодействий  $G$  будут ленточными и большая часть их элементов станет нулями. Это дает возможность при реализации программ численного моделирования использовать стандартные математические библиотеки линейной алгебры, в которых реализована поддержка работы с разреженными матрицами. В этом случае число операций и количество элементов, требующих хранения в оперативной памяти, будет порядка  $O(kN)$ , где  $k$  — количество ненулевых диагоналей матрицы  $G$ , определяемое радиусом магнитоэстатического взаимодействия.

Вопрос, когда такая аппроксимация является допустимой, очень важен. Неполный учет магнитоэстатического взаимодействия приводит к недостоверным результатам. В случае объемных трехмерных объектов при вычислении поля размагничивания магнитное диполь-дипольное взаимодействие в соответствии с (2) убывает обратно пропорционально третьей степени расстояния между дискретными элементами, т.е. как  $\rho^{-3}$ . В то же время, если элемент объема трехмерного тела в сферических координатах  $dV \sim \rho^2 d\rho$  подставить в (2), интегрирование, очевидно, приведет к логарифмической зависимости поля размагничивания  $\sim \ln(\rho)$ . Это означает, что поле магнитного диполя, убывающее с расстоянием как  $\rho^{-3}$ , компенсируется за счет роста числа диполей, пропорционального  $\rho^3$ . Поэтому вклады от всех ячеек независимо от расстояния между ними являются одинаково существенными и в общем случае должны быть учтены.

При исследовании одномерных и двумерных магнитных структур, например, таких как нанонити, нанопроволоки, двумерные массивы наночастиц, тонкопленочные нано- и гетероструктуры, такое приближение оказывается оправданным. Элемент объема  $dV$  для одномерных и двумерных структур будет

пропорционален  $d\rho$  и  $\rho d\rho$  соответственно, что приведет к зависимости размагничивающего поля от  $\rho$  как  $\sim \rho^{-2}$  и  $\sim \rho^{-1}$ . Это дает нам возможность при решении микромагнитных задач ограничить радиус магнитостатического взаимодействия, что приведет к значительному сокращению времени расчета и уменьшению объема требуемой оперативной памяти. Эффективность и правомерность такого приближения нами исследовались в работе [11] при изучении магнитной микроструктуры и процессов перемагничивания в тонких нанокристаллических пленках со случайным разбросом осей анизотропии в дискретных ячейках.

В случае трехмерных объектов, как было уже отмечено, усечение радиуса магнитостатического взаимодействия недопустимо, поэтому необходимо использовать другие подходящие методы при расчете размагничивающего поля. Одним из наиболее удачных решений является подход, основанный на методе быстрого преобразования Фурье [17, 18], рассмотренный в следующем разделе.

**6.2. Использование метода быстрого преобразования Фурье.** Возможность существенно ускорить критическую часть расчета поля размагничивания состоит в применении алгоритма быстрого преобразования Фурье (БПФ). В случае если сетка дискретизации была выбрана трансляционно инвариантной (регулярной), то матричные элементы  $G_{ij}^m \equiv G^m(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  зависят только от вектора разности между центрами ячеек  $i$  и  $j$ . В самом деле, размагничивающее поле в  $i$ -й ячейке

$$\mathbf{H}_i^m = \sum_j G_{ij}^m \mathbf{M}_j, \quad (10)$$

представляет собой дискретный аналог свертки (3), где произведение  $G^m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathbf{M}(\mathbf{r}')dV'$  определяет поле размагничивания, создаваемое в точке  $\mathbf{r}$  элементарным магнитным моментом, расположенным в точке  $\mathbf{r}'$ . Дискретная свертка (10) может быть вычислена с помощью дискретного преобразования Фурье, которое очень эффективно может быть реализовано известным алгоритмом, называемым быстрым преобразованием Фурье. Фактически с помощью преобразования Фурье свертка в пространственно-временной области может быть преобразована в скалярное произведение в частотной области.

Реализация этой, на первый взгляд, простой идеи осложняется из-за условий, накладываемых теоремой о свертке. Первое условие требует, чтобы конфигурация намагниченности была пространственно-периодической функцией. Второе условие требует, чтобы функция магнитостатического взаимодействия имела конечный радиус действия или, по крайней мере, могла бы быть “обрезана” на некотором конечном расстоянии.

Концептуально самый простой способ разрешить эти трудности для конечных (ограниченных) систем известен. А именно, можно рассмотреть пространственно-периодическую систему, состоящую из бесконечного числа абсолютно одинаковых копий исследуемой системы, разделенных областями того же самого размера, но с нулевой намагниченностью. Такой подход часто используется в радиотехнике при обработке непериодических сигналов. В результате обеспечивается не только пространственная периодичность изучаемой системы, но и отсутствие взаимодействия между различными копиями системы. Следовательно, все свойства этой искусственной периодической структуры полностью определяются взаимодействиями в пределах отдельной копии, являющейся изначально объектом исследования. Таким образом, оба условия теоремы о свертке выполнены, что дает нам возможность использовать ее для вычисления размагничивающего поля.

Например, если изучаемый образец разбивается на  $N = n_x n_y n_z$  прямоугольных параллелепипедов с образующими, параллельными координатным осям, с  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  ячеек вдоль осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  соответственно, то размеры дополненной нулями сетки дискретизации в каждом направлении будут равны  $2n_x$ ,  $2n_y$ ,  $2n_z$ . Заметим, что каждая ячейка в пространстве может быть также однозначно определена посредством трех индексов  $i, j, k$  вдоль соответствующих осей  $x, y, z$ . Тогда дискретную свертку (10) можно представить в виде  $\mathbf{H}_{i,j,k}^m = \sum_{i',j',k'} G_{i-i',j-j',k-k'}^m \mathbf{M}_{i',j',k'}$ , а свертка, например,  $x$ -компоненты  $\mathbf{H}_{i,j,k}^m$  может быть записана следующим образом:

$$H_{i,j,k}^{m(x)} = \sum_{i',j',k'} \left( G_{i-i',j-j',k-k'}^{m(xx)} M_{i',j',k'}^{(x)} + G_{i-i',j-j',k-k'}^{m(xy)} M_{i',j',k'}^{(y)} + G_{i-i',j-j',k-k'}^{m(xz)} M_{i',j',k'}^{(z)} \right).$$

Если обозначить пространственные координаты через  $\alpha, \beta = \{x, y, z\}$ , то в общем виде свертка компонент

поля размагничивания приобретает вид  $H_{i,j,k}^{m(\alpha)} = \sum_{i',j',k'} \sum_{\beta} G_{i-i',j-j',k-k'}^{m(\alpha\beta)} M_{i',j',k'}^{(\beta)}$ , или в компактной

матричной форме

$$H^{m(\alpha)} = \sum_{\beta}^{\{x,y,z\}} G^{m(\alpha\beta)} M^{(\beta)}, \tag{11}$$

где  $H^{m(\alpha)}$  и  $M^{(\beta)} \in \mathbb{R}^{8N \times 1}$  — векторы, а  $G^{m(\alpha\beta)} \in \mathbb{R}^{8N \times 8N}$  — симметричная матрица. Дискретное преобразование Фурье  $\widehat{H}^{m(\alpha)} \in \mathbb{C}^{8N \times 1}$  вектора  $H^{m(\alpha)}$  может быть представлено в форме

$$\widehat{H}^{m(\alpha)} = \sum_{i=1}^{2n_x-1} \sum_{j=1}^{2n_y-1} \sum_{k=1}^{2n_z-1} H_{i,j,k}^{m(\alpha)} \exp \left[ 2\pi i_m \left( \frac{k_x i}{2n_x} + \frac{k_y j}{2n_y} + \frac{k_z k}{2n_z} \right) \right],$$

где  $i_m$  — мнимая единица и  $k_x, k_y, k_z$  — переменные пространственной частоты. Аналогичные выражения могут быть записаны для  $\widehat{M}^{(\beta)} \in \mathbb{C}^{8N \times 1}$  и  $\widehat{G}^{m(\alpha\beta)} \in \mathbb{C}^{8N \times 1}$ . Тогда в соответствии с теоремой о свертке выражение (11) может быть записано в частотной области как покомпонентное произведение двух векторов:

$$\widehat{H}^{m(\alpha)}(k_x, k_y, k_z) = \sum_{\beta}^{\{x,y,z\}} \widehat{G}^{m(\alpha\beta)}(k_x, k_y, k_z) \widehat{M}^{(\beta)}(k_x, k_y, k_z), \tag{12}$$

при этом  $\alpha$ -компонента  $H^m(\alpha = \{x, y, z\})$  может быть получена обратным преобразованием Фурье выражения (12).

В результате требуемые вычислительные затраты на определение размагничивающего поля можно обобщить в следующих пунктах.

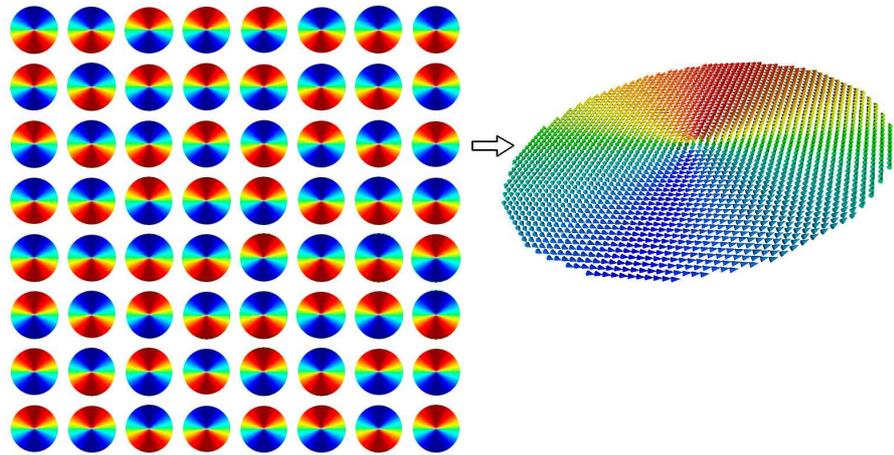
1. На стадии предварительной обработки моделирования должны быть определены и сохранены в памяти шесть из девяти (в силу симметрии) фурье-образов  $\widehat{G}^{m(\alpha\beta)}$  матриц магнитостатического взаимодействия

$$G^{m(\alpha\beta)}(\alpha, \beta = \{x, y, z\}).$$

2. При расчете размагничивающего поля на каждой итерации необходимо методом БПФ вычислить шесть преобразований: три преобразования  $\widehat{M}^{(x)}, \widehat{M}^{(y)}$  и  $\widehat{M}^{(z)}$ , связанные с вектором намагниченности, и три обратных преобразования компонентов размагничивающего поля  $\widehat{H}^{m(x)}, \widehat{H}^{m(y)}$  и  $\widehat{H}^{m(z)}$ , полученных в частотной области с помощью (12).

Использование метода БПФ для определения размагничивающего поля приводит к числу операций порядка  $O(N \log N)$ . Это позволяет значительно снизить вычислительную трудоемкость по сравнению с прямым методом расчета поля по формуле (10), для реализации которого требуется  $O(N^2)$  операций. Кроме того, использование метода БПФ приводит к существенному уменьшению объема требуемой памяти, так как вместо хранения элементов матрицы магнитостатического взаимодействия  $G^m$ , число которых составляет  $(3N)^2$ , требуется хранение только  $6 \times 2^3 \times N$  элементов фурье-образов  $\widehat{G}^{m(\alpha\beta)}$ .

В качестве примера на рисунке представлен результат расчета равновесной конфигурации намагниченности двумерного массива, состоящего из 64 магнитостатически связанных пермалловых нанодисков толщиной 20 нм и диаметром 275 нм. Магнитные параметры наночастиц в расчете были следующими: намагниченность насыщения  $M_s = 860$  Гс, константа обменного взаимодействия  $A = 1.3 \times 10^{-6}$  эрг/см, константа магнитной анизотропии  $K = 0$ . Размер дискретной ячейки 5 нм, при этом общее количество дискретных элементов изучаемой системы составило  $N = 1048576$ . Расчет производился для случайного начального распределения магнитных моментов в дискретных ячейках при отсутствии внешнего постоянного магнитного поля. Видно, что все нанодиски имеют сложное вихревое распределение намагниченности, причем магнитные моменты в основном лежат в плоскости за исключением области вблизи



Вихревая микромагнитная структура массива из 64 магнитостатически связанных пермалловых нанодисков толщиной 20 нм и диаметром 275 нм

центра каждого диска. Здесь магнитные моменты ориентируются ортогонально плоскости нанодиска и могут быть направлены вверх или вниз.

**7. Заключение.** Таким образом, для расчета равновесного распределения намагниченности в дискретной микромагнитной модели ферромагнетика разработан эффективный алгоритм, основанный на методе неопределенных множителей Лагранжа. Проанализированы проблемы сходимости итерационного процесса и сформулирован критерий устойчивости полученного решения. Возможность использования предложенного алгоритма для расчета равновесного состояния сложных магнитных систем продемонстрирована на примере двумерного массива из 64 магнитоэстатически связанных пермаллоевых нанодисков толщиной 20 нм и диаметром 275 нм. Размер дискретной ячейки в микромагнитной модели 5 нм, при этом общее количество дискретных элементов во всей изучаемой системе составляло более миллиона. Важным результатом является тот факт, что реализация разработанного алгоритма позволяет не только существенно уменьшить объем требуемой памяти при численном анализе сложных магнитных объектов, но и значительно ускорить процесс вычислений.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. и при поддержке Интеграционного проекта № 109 СО РАН.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ильющенко Д.С., Козуб В.И., Ясиевич И.Н.* Формирование доменов в пленках магнитных наночастиц со случайным распределением осей анизотропии // *Физика твердого тела*. 2007. **49**, вып. 10. 1853–1857.
2. *Комогорцев С.В., Исхаков Р.С.* Кривая намагничивания и магнитные корреляции в нанопепочке ферромагнитных зерен со случайной анизотропией // *Физика твердого тела*. 2005. **47**, вып. 3. 480–486.
3. *Grimsditch M., Giovannini L., Monotcello F., Nizzoli F., Leaf G.K., Kaper H.G.* Magnetic normal modes in ferromagnetic nanoparticles: A dynamical matrix approach // *Phys. Rev. B*. 2004. **70**. 054409.
4. *Rivkin K., DeLong L.E., Ketterson J.B.* Microscopic study of magnetostatic spin waves // *J. Appl. Phys.* 2005. **97**. 10E309.
5. *Rivkin K., Ketterson J.B.* Micromagnetic simulations of absorption spectra // *J. Magn. Magn. Mater.* 2006. **306**. 204–210.
6. *Cimrák I.* A survey on the numerics and computations for the Landau-Lifshitz equation of micromagnetism // *Arch. Comput. Methods Eng.* 2008. **15**. 277–309.
7. *Donahue M.J., Porter D.G.* OOMMF user's guide. National Institute of Standards and Technology. Interagency Report NISTIR 6376. Gaithersburg, 1999.
8. *Scholz W., Fidler J., et al.* Scalable parallel micromagnetic solvers for magnetic nanostructures // *Comput. Mater. Sci.* 2003. **28**. 366–383.
9. *Изотов А.В., Беляев Б.А.* Метод расчета равновесного распределения магнитных моментов в дискретной модели ферромагнетика // *Известия ВУЗов. Физика*. 2008. **51**, № 9/2. 180–185.
10. *Izotov A.V., Belyaev B.A., Leksikov An.A.* A new approach to determination of equilibrium magnetization in magnetic nanostructures // *J. of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*. 2010. **3**, N 1. 64–69.
11. *Беляев Б.А., Изотов А.В., Лексиков Ан.А.* Микромагнитный расчет равновесного распределения магнитных моментов тонких пленок // *Физика твердого тела*. 2010. **52**, № 8. 1549–1556.
12. *Браун У.Ф.* Микромагнетизм. М.: Наука, 1979.
13. *Newell A.J., Williams W., Dunlop D.J.* A generalization of the demagnetizing tensor for nonuniform magnetization // *J. Geophys. Res.* 1993. **98**, N 17. 9551–9555.
14. *van de Wiele B., Manzin A., Dupre L., Olyslager F., Bottauscio O., Chiampì M.* Comparison of finite-difference and finite-element schemes for magnetization processes in 3-D particles // *IEEE Trans. Magn.* 2009. **45**, N 3. 1614–1617.
15. *Морс Ф.М., Феербах Г.* Методы теоретической физики. Т. 1. М.: ИЛ, 1958.
16. *Голуб Дж., ван Лоун Ч.* Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.
17. *Greengard L., Rokhlin V.* A fast algorithm for particle simulations // *J. Comput. Phys.* 1987. **73**. 325–348.
18. *van de Wiele B., Olyslager F., Dupre L., de Zutter D.* On the accuracy of FFT based magnetostatic field evaluation schemes in micromagnetic hysteresis modeling // *J. Magn. Magn. Mater.* 2010. **322**, N 4. 469–476.

Поступила в редакцию  
17.10.2012