

LATVIJAS UNIVERSITĀTE
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE
FIZIKAS NODAĻA

**FEROMAGNĒTISKU MIKROPELDĒTĀJU
PĀRVIETOŠANĀS MEHĀNISMS UN TĀ SKAITLISKĀ
MODELĒŠANA**

BAKALaura DARBS

Autors: Rūdolfš Livanovičš

Stud. apl. rl06017

Darba vadītājs:

Prof. Dr. habil. phys. Andrejs Cēbers

RĪGA 2009

Anotācija

Darbā tiek aplūkots feromagnētisks mikropeldētājs, kura dinamika mainīgā magnētiskā laukā tiek pētīta izmantojot modificētu Kirhofa modeli elastīgam stienim. Mikropeldētāja formu raksturojošie vienādojumi tiek skaitliski risināti, diskretizējot tos ar galīgo diferencu metodes palīdzību. Tiek izveidota programma MATLAB vidē skaitlisko simulāciju veikšanai. Rezultāti tiek salīdzināti ar pieejamo literatūru, konstanta lauka gadījumā izmantojot arī analītisku atrisinājumu. Tiek aplūkota izmantotās risinājuma shēmas stabilitāte, precizitāte, iespējamās uzlabošanas iespējas un perspektīvas turpmākiem pētījumiem.

Atslēgas vārdi: magnētisks filaments, feromagnētisks mikropeldētājs, Kirhofa stienis, galīgo diferencu metode.

Abstract

The dynamics of a ferromagnetic microswimmer in a time-varying magnetic field are explored using a modified Kirchoff model for an elastic rod. The equations characterizing the shape of the microswimmer are discretized using a finite difference scheme and numerical simulations are performed using MATLAB. The results are compared with the available literature as well as an analytic solution for the limiting case of a stationary magnetic field. The stability and precision of the numerical scheme is discussed, as well as possible improvements to the numerical algorithm and perspective avenues of further research.

Keywords: magnetic filament, ferromagnetic microswimmer, Kirchoff rod, finite difference method.

Saturs

1	Ievads	1
1.1	Darba struktūra un mērķi	1
1.2	Feromagnētiskā filamenta formu aprakstošie vienādojumi	2
1.3	Feromagnētiskā filamenta masas centra ātruma vienādojumi	5
2	Analītiska atrisinājuma iegūšana stacionāra magnētiskā lauka gadījumā	7
3	Skaitlisko simulāciju veikšana un iegūtie rezultāti	11
3.1	Iegūto vienādojumu risināšanas iespējas	11
3.2	Skaitlisko simulāciju rezultāti	12
3.3	Aprēķinu precizitātes un stabilitātes jautājumi	20
4	Secinājumi un perspektīvas	25
	1. pielikums. Galīgo diferencu shēma filamenta formu raksturojošo vienādojumu tuvinātai risināšanai	28
	2. pielikums. MATLAB programmas kods	32
	3. pielikums. Mathematica programmas kods	38
	Izmantotā literatūra	39

1 Ievads

Viena no konsistentākajām tehnoloģiju attīstības tendencēm 20. gs. laikā ir dažādu iekārtu miniaturizācija, kas pēdējo gadu laikā sasniegusi arī nanometru mērogu. Tādēļ, neizbēgama ir interese par aizvien mazāka izmēra ierīcēm, kas spētu veikt mehānisko darbu un kalpot par dzinējiem [1]. Viena no iespējām šo problēmu risināt ir, izmantojot elastīgus, magnētiskus filamentus, kuri spēj noteiktos apstākļos pārvietoties ar magnētiskā lauka palīdzību kontrolējamā virzienā. Šādiem filamentiem eksistē visai plašs pielietojumu loks un to izpēte ir aktuāls mīksto materiālu fizikas pētījumu lauks. Kā piemērus var minēt pētījumus, kas apsver līdzīgu mehānismu izmantojumu mezoskopisku šķidrumu maisīšanā [2,3], kā sensorus mikromehāniskās ierīcēs [4,5], kā dzinējus [6,7], u.c.

Līdzīgi magnētiski filamentu eksistē arī dabā. Tā piemēram, daudzi mikroorganismi izmanto līdzīgus elastīgus filamentus, lai pārvietotos [6]. Magnetotaktiskās baktērijas, savukārt, izmanto navigācijai dažādas feromagnētiskiem filamentiem analogiskas struktūras [8].

1.1 Darba struktūra un mērķi.

Magnētiskus mikropeldētājus iespējams konstruēt no superparamagnētiskām vai feromagnētiskām mikrodaļiņām. Šī darba sarakstīšanas brīdī superparamagnētiski filamentu ir salīdzinoši labāk izpētīti gan teorētiski, gan eksperimentāli; arī literatūrā tie sastopami biežāk [2,5,7,9]. Tas skaidrojams galvenokārt ar eksperimentiem piemērotu superparamagnētisku daļiņu salīdzinoši plašāko komerciālo pieejamību.

Šajā darbā tiek aplūkots literatūrā apskatīts, nesen izveidots teorētisks modelis feromagnētiska mikropeldētāja dinamikas ārējā magnētiskā laukā raksturošanai, izmantojot modificētu Kirhofa modeli elastīgam stienim [10]. Uz šī modeļa bāzes tika sastādīta galīgo diferencu shēma tuvinātai vienādojumu risināšanai un izveidota programma MATLAB vidē (tās pilns izejas kods atrodams 2. pielikumā) feromagnētiskā mikropeldētāja dinamikas skaitliskām simulācijām.

2. nodaļā tiek iegūts vienādojums konstanta ārējā magnētiskā lauka robežgadījumam, kuram iespējams iegūt precīzu atrisinājumu, un sastādīta programma *Mathematica* vidē nepieciešamo fizikālo lielumu aprēķināšanai (tās pilns izejas kods sniegts 3. pielikumā). Tas paver iespējas konstanta lauka robežgadījumā pārbaudīt veikto simulāciju atbilstību teorijai.

Darba 3. nodaļā tiek apskatīti simulāciju aprēķinos iegūtie rezultāti, kā arī tie tiek iespēju robežās salīdzināti ar pieejamo zinātnisko literatūru. Mikropeldētāja dinamikā atklātas

kvalitatīvi jaunas īpašības. Īpaši jāatzīmē, ka filamenta dinamikā atklāts jauns, līdz šim literatūrā neapskatīts, oscilācijas režīms pie augstām magnetoelastiskā skaitļa vērtībām, kurā sagaidāmās vienas cilpas vietā veidojas divas un vērojams kvalitatīvi atšķirīgs ātruma un masas centra pārvietojuma grafiks. Tāpat izvirzīta arī hipotēze par iespējamu periodu dubultošanos masas centra pārvietojuma grafikā. Šie rezultāti paver plašas iespējas turpmākiem pētījumiem.

Papildus tiek aplūkota arī skaitliskās shēmas precizitāte atkarībā no dažādu simulācijas parametru maiņas (telpas punktu skaits, izmantotais laika solis, magnetoelastiskais skaitlis C_m , u.c.), shēmas stabilitāte, tās uzlabošanas iespējas un perspektīvas.

1.2 Feromagnētiskā filamenta formu aprakstošie vienādojumi

Par modeļa pamatu tiek izvēlēts Kirhofa modelis elastīgam stienim [11]. Šajā gadījumā nepieciešams tam pievienot papildus locekli, kas raksturo magnētiskā lauka ietekmi uz feromagnētisko filamentu. Tad kopējais enerģijas funkcionālis izsakāms šādi [9]:

$$E = \frac{1}{2} C \int \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl + MH \cos \omega t \int (\vec{h} \cdot \vec{\tau}) dl, \quad (1)$$

kur $\vec{\tau} = (\cos \vartheta, \sin \vartheta)$ -- pieskares vektors, $\vec{n} = (-\sin \vartheta, \cos \vartheta)$ – normāles vektors, ϑ -- leņķis starp pieskares vektoru un ārējo lauku $\vec{h} = (-\cos \omega t, 0)$. C ir materiāla elastības konstante: $C = \frac{\pi}{4} a^4 Y$ (Y – Junga modulis, a – stieņa rādiuss). M ir filamenta magnetizācija uz garuma elementu, kas paralēls vektoram $\vec{\tau}$, H – ārējā magnētiskā lauka amplitūda, ω – lauka frekvence. Filamenta lokālais liekums izsakās kā:

$$\frac{1}{R} = -\frac{d\vartheta}{dl}. \quad (2)$$

Savukārt pieskares un normāles vektorus saista Frenē vienādojums [12]:

$$\frac{d\vec{\tau}}{dl} = -\frac{1}{R}\vec{n}. \quad (3)$$

Lai nodrošinātu filamenta neizstiepjamību (konstantu garumu), nepieciešams ieviest tā saucamo Lagranža reizinātāju Λ . Tādā gadījumā magnetoelastīgā filamenta enerģijas funkcionālis uzrakstāms sekojošā formā:

$$E = \frac{1}{2} C \int \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl + MH \cos \omega t \int (\vec{h} \cdot \vec{\tau}) dl - \int \Lambda dl. \quad (4)$$

No šī funkcionāļa ar variāciju metodēm iespējams iegūt normālās un tangenciālās spēka komponentes:

$$F_n = C \left(\frac{1}{R} \right)_{,l} - M\vec{H} \cdot \vec{n}, \quad (5)$$

$$F_\tau = -\frac{C}{2R^2} - \Lambda. \quad (6)$$

Kopējais, normālais un tangenciālais spēks (uz garuma vienību), kas darbojas uz filamentu izsakāmi sekojošā formā:

$$\vec{K} = \frac{d\vec{F}}{dl} = \frac{d}{dl} (F_n \vec{n} + F_\tau \vec{\tau}), \quad (7)$$

$$K_n = \frac{dF_n}{dl} - \frac{F_\tau}{R} = C \left(\left(\frac{1}{R} \right)_{,ll} + \frac{1}{2} \frac{1}{R^3} \right) + \Lambda \frac{1}{R} + MH (\sin \vartheta)_{,l}, \quad (8)$$

$$K_\tau = \frac{dF_\tau}{dl} + \frac{F_n}{R} = -\Lambda_{,l} + \frac{1}{R} MH \sin \vartheta. \quad (9)$$

Ir spēkā spēka momentu līdzsvara vienādojums, kas izsakāms šādā formā:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial l} + \vec{\tau} \times \vec{F} + \vec{T}_0 = 0. \quad (10)$$

Neņemot vērā hidrodinamisko mijiedarbību (Rouza aproksimācija) starp feromagnētiskajām daļiņām, no kurām sastāv filaments, var rakstīt:

$$\zeta \vec{v} = \vec{K}, \quad (11)$$

kur ζ –berzes koeficients uz filamenta garuma vienību.

Lai filaments pārvietotos un varētu aplūkot mikropeldētāju, nepieciešama berzes koeficienta anizotropija [13]. Šajā gadījumā var rakstīt šādas izteiksmes ātruma normālajai un tangenciālajai komponentei:

$$v_n = \frac{1}{\zeta_\perp} \left(\frac{dF_n}{dl} - \frac{1}{R} F_\tau \right), \quad (12)$$

$$v_\tau = \frac{1}{\zeta_\parallel} \left(\frac{dF_\tau}{dl} + \frac{1}{R} F_n \right). \quad (13)$$

kur ζ_\perp un ζ_\parallel ir berzes koeficienta attiecīgi perpendikulārā un paralēlā (attiecībā pret filamenta lokālu elementu) komponente. Ja $\zeta_\perp = \zeta_\parallel$, filamenta masas centrs ir stacionārs.

Savukārt leņķa ϑ iespējams izteikt šādi (ņemot vērā, ka $\frac{dl}{dt} = 0$, jo filaments ir neizstiepjams):

$$\frac{d\vartheta}{dt} = \frac{\partial v_n}{\partial l} - \frac{v_\tau}{R}. \quad (14)$$

Izmantojot vienādojumu (14) un izsakot nepieciešamās ātruma komponentes pēc izteiksmēm (12) un (13), varam uzrakstīt vienādojumu priekš leņķa ϑ :

$$\vartheta_{,t} = -\vartheta_{,lll} - \frac{1}{2}(\vartheta_{,l})_{,l}^3 - Cm \cos \omega t \cdot (\sin \vartheta)_{,ll} - (\vartheta_{,l} \Lambda)_{,l} - \zeta \vartheta_{,l}(\Lambda_{,l} - \vartheta_{,l} Cm \cos \omega t \cdot (\sin \vartheta)_{,l}), \quad (15)$$

kur vienādojumā izmantotie lielumi uzrakstīti bezdimensionālā formā, kas iegūta pareizinot

laiku ar raksturīgo elastīgās relaksācijas laiku $\tau_e = \zeta_\perp \frac{L^4}{C}$, spēku ar $\frac{C}{L^2}$ un ieviešot šādus

apzīmējumus: magnetoelastiskais skaitlis $Cm = \frac{MHL^2}{C}$, ārējā magnētiskā lauka

bezdimensionālā frekvence $\tilde{\omega} = \frac{L^4}{L_e^4}$ (tildes simbols turpmāk tiek izlaists), kur $L_e = \left(\frac{C}{\omega \zeta_\perp}\right)^{\frac{1}{4}}$ un

$\zeta = \frac{\zeta_\perp}{\zeta_\parallel}$ -- berzes koeficienta anizotropijas faktors. Šajā darbā visur, analogiski kā pieejamajā

literatūrā [6,7], pieņemts, ka $\zeta = 2$. Lielums L_e zinātniskajā literatūrā pazīstams kā „*elastic penetration length*” [10].

Analoģiskā veidā iespējams uzrakstīt arī bezdimensionālo vienādojumu Lagranža reizinātāja Λ noteikšanai:

$$\begin{aligned} & (\vartheta_{,l})^2 \Lambda - \zeta \Lambda_{,ll} + \frac{1}{2}(\vartheta_{,l})^4 + \vartheta_{,l} \vartheta_{,lll} + \zeta Cm \cos \omega t \cdot (\vartheta_{,l} \sin \vartheta)_{,l} \\ & + \vartheta_{,l} Cm \cos \omega t \cdot (\sin \vartheta)_{,l} = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Robežnosacījumus vienādojumiem (15) un (16) iespējams uzrakstīt, ņemot vērā iepriekš minēto uzstādījumu par filamenta neizstiepjamību:

$$\frac{d\vartheta}{dl} \Big|_{l=\pm 1} = 0, \quad (17)$$

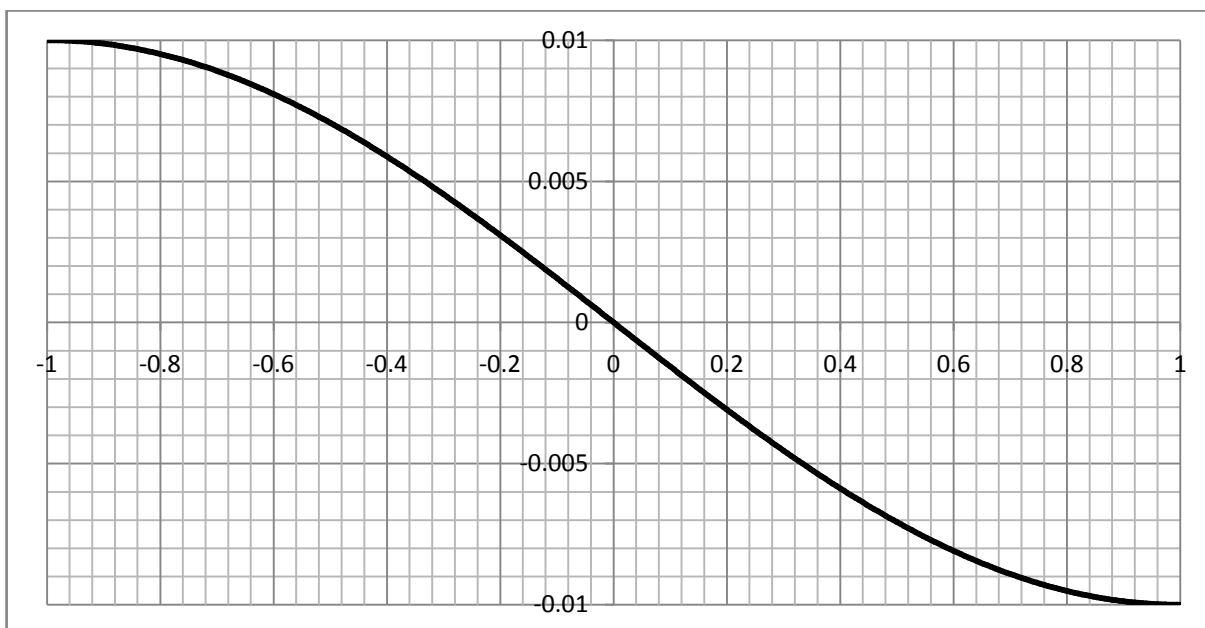
$$\Lambda \Big|_{l=\pm 1} = 0, \quad (18)$$

$$\left(\frac{d^2 \vartheta}{dl^2} + Cm \cos \omega t \cdot \sin \vartheta \right) \Big|_{l=\pm 1} = 0. \quad (19)$$

Protams, vienādojumam (15) nepieciešams arī sākumnosacījums. No literatūras (10) zināms, ka tas jāizvēlas tā, lai sākuma konfigurācijā filamenta gali jau būtu nedaudz ieliekti. Šajā darbā par sākuma nosacījumu tika izmantota šāda konfigurācija:

$$\vartheta = -0,01 \sin\left(\frac{\pi l}{2}\right). \quad (20)$$

Vienādojumi (15) un (16) kopā ar robežnosacījumiem (17), (18), (19) un sākumnosacījumu (20) pilnībā nosaka feromagnētiskā filamenta formu mainīgā magnētiskā laukā.



1.1.att. Filamenta sākuma konfigurācija

Jāatzīmē, ka pieejamajā literatūrā [13] ar lineārās stabilitātes un Floka reizinātāju metožu palīdzību izpētīts, ka, stacionāra lauka gadījumā, eksistē divu principiāli atšķirīgu veidu apskatāmā filamenta stacionārie stāvokļi, literatūrā pazīstami kā S un U deformāciju modas. Šīs modas kā metastabili stāvokļi mikropeldētāja dinamikā novērojamas arī mainīga lauka gadījumā. Tā kā no literatūras zināms, ka S modas nav derīgas mikropeldētāju izveidošanai (nenotiek masas centra kustība), šajā darbā tiek apskatītas tikai U tipa metastabilās formas.

1.3 Feromagnētiskā filamenta masas centra ātruma vienādojumi

Nodaļā 1.2 iegūtā vienādojuma (15) atrisinājumi ir leņķa ϑ vērtības, kas nosaka filamenta formu. Lai raksturotu mikropeldētāja dinamiku, nepieciešams uzrakstīt arī vienādojumus masas centra pārvietojumam. Lai to izdarītu, tiek izmantotas nodaļā 1.2 iegūtās

filamenta ātruma un spēka, kas uz to darbojas, izteiksmes. Tad, saskaņā ar izteiksmēm (12) un (13), filamenta masas centra ātrumu iespējams uzrakstīt šādā formā:

$$\vec{v} = \frac{1}{\zeta_{\perp}} \vec{F}_{,l} + \left(\frac{1}{\zeta_{\parallel}} - \frac{1}{\zeta_{\perp}} \right) \left(F_{\tau,l} + \frac{1}{R} F_n \right) \vec{\tau}. \quad (21)$$

Turklāt, tā kā spēks, kas darbojas uz filamenta galiem identiski vienāds ar nulli, no izteiksmes (21) seko:

$$\zeta_{\perp} 2L \vec{v}_c = \left(\frac{\zeta_{\perp}}{\zeta_{\parallel}} - 1 \right) \int_{-L}^L \left(F_{\tau,l} + \frac{1}{R} F_n \right) \vec{\tau} dl. \quad (22)$$

Parciāli nointegrējot vienādojumu (22) un pārejot uz bezdimensionāliem lielumiem (analoģiski kā nodaļā 1.2), iegūst:

$$\begin{aligned} \frac{dx_c}{dt} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\perp}}{\zeta_{\parallel}} - 1 \right) (-Cm \cos(\omega t) \cdot \cos^2 \vartheta) \Big|_{-1}^{+1} \\ &- \int_{-1}^1 ((\Lambda + Cm \cos(\omega t) \cdot \cos \vartheta) \sin \vartheta \vartheta_{,l}) dl, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{dy_c}{dt} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\perp}}{\zeta_{\parallel}} - 1 \right) (-Cm \cos(\omega t) \cdot \cos \vartheta \sin \vartheta) \Big|_{-1}^{+1} \\ &+ \int_{-1}^1 ((\Lambda + Cm \cos(\omega t) \cdot \cos \vartheta) \cos \vartheta \vartheta_{,l}) dl. \end{aligned} \quad (24)$$

Vienādojumi (23) un (24) pilnībā raksturo masas centra pārvietojumu, mikropeldētājam kustoties mainīgā magnētiskā lauka ietekmē. Vienādojumā (22) arī uzskatāmi redzams, kāpēc izotropa berzes koeficienta gadījumā masas centra kustība nenotiek.

Kopā ar vienādojumiem (15) un (16) un to attiecīgajiem robežnosacījumiem, un sākumnosacījumu, šajā nodaļā iegūtās izteiksmes (23) un (24) viennozīmīgi raksturo feromagnētiskā mikropeldētāja dinamiku mainīgā magnētiskā laukā. Šo vienādojumu risināšanas un ar tās palīdzību veikto simulāciju rezultātu apskats sniegts 3. nodaļā.

2 Analītiska atrisinājuma iegūšana stacionāra magnētiskā lauka gadījumā

Nodaļā 1.2 iegūtos vienādojumus vispārīgā gadījumā atrisināt analītiski nav iespējams. Tomēr iespējams iegūt dažādus analītiskus atrisinājumus vienkāršotiem problēmas formulējumiem. Tas ir būtiski, jo nepieciešams pārliecināties, ka skaitlisko simulāciju rezultātā iegūtie dati patiešām kalpo par atrisinājumu uzstādītajai problēmai. Tā kā šajā gadījumā neeksistē pietiekoši detalizēti eksperimentāli rezultāti, kas ļautu kvalitatīvi pārbaudīt iegūto rezultātu kvantitatīvu atbilstību fizikālajai realitātei, tiek iegūts analītisks atrisinājums vienkāršotam problēmas robežgadījumam.

Šajā gadījumā tiek pieņemts, ka ārējā magnētiskā lauka $\vec{H} = (-\cos \omega t, 0)$ frekvence ω ir nulle. Šādā gadījumā filamenta forma tieksies uz stacionāru stāvokli un masas centra ātrums būs identiski vienāds ar nulli. Skaitlisko aprēķinu precizitāti tad iespējams novērtēt, salīdzinot filamenta formu (leņķa ϑ vērtības) ar šajā nodaļā iegūto analītisko atrisinājumu.

Identiski kā nodaļā 1.2, par izveduma sākumpunktu tiek pieņemts modificēts Kirhofa modelis elastīgam stienim ar magnētiskā lauka efektu raksturojošo locekli, kura enerģija izsakāma kā:

$$E = \frac{1}{2} C \int \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl + MH \cos \omega t \int (\vec{h} \cdot \vec{\tau}) dl. \quad (25)$$

Viegli saprast, ka filamenta meklējamā stacionārā forma atbilst šī enerģijas funkcionāla minimumam. Pirmkārt, formulu iespējams pārrakstīt ekvivalentā formā, izmantojot nodaļā 1.2 ieviestās definīcijas, un ņemot vērā, ka tiek apskatīts stacionārs magnētiskais lauks:

$$E = \frac{1}{2} C \int \left(\frac{d\vartheta}{dl}\right)^2 dl + MH \int \cos \vartheta dl. \quad (26)$$

Turpmāk apzīmējot: $F(l, \vartheta, \vartheta') \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} C \left(\frac{d\vartheta}{dl}\right)^2 + MH \cos \vartheta$ un $\vartheta' = \frac{d\vartheta}{dl}$, iespējams uzrakstīt enerģijas funkcionāla variāciju [14]:

$$\delta E = \delta \int F(l, \vartheta, \vartheta') dl = \int \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta} \delta \vartheta + \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \delta \vartheta' \right) dl. \quad (27)$$

Ņemot vērā to, ka $\delta \vartheta' = \frac{d(\delta \vartheta)}{dl}$, iespējams pārrakstīt formulu (27) šādā veidā:

$$\delta E = \int \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta} \delta \vartheta + \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \frac{d(\delta \vartheta)}{dl} \right) dl. \quad (28)$$

Otro zemintegrāļa saskaitāmo iespējams nointegrēt parciāli, iegūstot:

$$\int \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \frac{d(\delta\vartheta)}{dl} dl = \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \delta\vartheta \Big|_{l_1}^{l_2} - \int_{l_1}^{l_2} \frac{d}{dl} \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} dl \delta\vartheta. \quad (29)$$

Ievietojot iegūto izteiksmi (29) formulā (28), enerģijas funkcionāļa variāciju iespējams uzrakstīt šādi:

$$\delta E = \int_{l_1}^{l_2} \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta} - \frac{d}{dl} \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \right) \delta\vartheta dl + \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \delta\vartheta \Big|_{l_1}^{l_2}. \quad (30)$$

Ņemot vērā, ka $\vartheta'(l_1) = \vartheta'(l_2) = 0$, seko:

$$\delta E = \int_{l_1}^{l_2} \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta} - \frac{d}{dl} \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} \right) \delta\vartheta dl. \quad (31)$$

Taču, jau pēc uzdevuma formulējuma, proti, fakta, ka tiek meklēts tieši stacionārs stāvoklis, skaidrs, ka $\delta E = 0$. Tāpēc, lai filaments atrastos stacionārā stāvoklī, faktiski pietiek ar to, ka izpildās vienādojums (jo variācija $\delta\vartheta$ ir patvaļīga):

$$\frac{\partial F}{\partial \vartheta} - \frac{d}{dl} \frac{\partial F}{\partial \vartheta'} = 0. \quad (32)$$

Ņemot vērā funkcijas F definīciju un izpildot atvasināšanu, iegūst:

$$\frac{d^2\vartheta}{dl^2} + Cm \sin \vartheta = 0, \quad (33)$$

kur $Cm = \frac{MHL^2}{c}$, M – magnetizācija uz filamenta garuma vienību, H_0 – ārējā magnētiskā lauka amplitūda, $2L$ – filamenta garums un C – materiāla elastības konstante.

Pareizinot vienādojumu ar $\frac{d\vartheta}{dl}$ un nointegrējot, iegūst vienādojuma (33) pirmo integrāli:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dl} \right)^2 - Cm \cos \vartheta = C_1, \quad (34)$$

kur C_1 – patvaļīga konstante.

Ieviešot maksimālo nolieces leņķi ϑ_m , patvaļīgo konstanti var uzrakstīt kā:

$$C_1 = -Cm \cos \vartheta_m, \quad (35)$$

un pārrakstīt vienādojumu (34) šādā formā:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dl} \right)^2 = Cm(\cos \vartheta - \cos \vartheta_m). \quad (36)$$

Izmantojot trigonometriskos pārveidojumus ($\cos \vartheta = 1 - 2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$) un savelkot līdzīgos locekļus, iegūst izteiksmi:

$$\left(\frac{d\vartheta}{dl}\right)^2 = 4Cm \left(\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} - \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right). \quad (37)$$

Vienādojumu (37) iespējams pārveidot ar sekojošas substitūcijas palīdzību:

$$\sin \frac{\vartheta}{2} = \sin \frac{\vartheta_m}{2} \sin y, \quad (38)$$

iegūstot šādu izteiksmi:

$$\left(\frac{d\vartheta}{dl}\right)^2 = 4Cm \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \cos^2 y. \quad (39)$$

Savukārt, atvasinot vienādojumu (39) pēc l , iegūst:

$$\frac{1}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \frac{d\vartheta}{dl} = \sin \frac{\vartheta_m}{2} \cos y \frac{dy}{dl}. \quad (40)$$

Paceļot abas vienādojuma (40) puses kvadrātā un pārkārtojot tā locekļus, var rakstīt:

$$\left(\frac{dy}{dl}\right)^2 = \frac{1}{4} \frac{\cos^2 \frac{\vartheta}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dl}\right)^2}{\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \cos^2 y}. \quad (41)$$

Izsakot no izteiksmes (41) meklējamā leņķa atvasinājumu pēc l , ievietojot to vienādojumā (39) un ņemot vērā substitūciju (38), iegūst izteiksmi y atvasinājumam pēc l :

$$\frac{dy}{dl} = \sqrt{Cm} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}. \quad (42)$$

Izteiksmi (42) iespējams pārveidot ērti integrējamā formā:

$$\frac{dy}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}} = \sqrt{Cm} dl. \quad (43)$$

Nointegrējot vienādojuma abas puses, var rakstīt:

$$\int_0^y \frac{dy}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}} + \int_{\frac{\pi}{2}}^0 \frac{dy}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}} = \sqrt{Cm} (l - 1). \quad (44)$$

Izteiksmi (44) iespējams pārrakstīt ekvivalentā formā izmantojot Jakobi eliptiskās funkcijas [15], iegūstot vienādojumu:

$$F(y | \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}) - K(\sin \frac{\vartheta_m}{2}) = \sqrt{Cm} (l - 1), \quad (45)$$

kur $F\left(y \middle| \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}\right) = \int_0^y \frac{dy}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}}$ ir pirmā veida nepilnais eliptiskais integrālis un

$K\left(\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}\right) = -\int_{\frac{\pi}{2}}^0 \frac{dy}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \sin^2 y}} = F\left(\frac{\pi}{2} \middle| \sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}\right)$ ir pirmā veida pilnais eliptiskais

integrālis.

No izteiksmes (45) un eliptisko funkciju teorijas seko, ka y var izteikt kā:

$$y = am \left[K\left(\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}\right) + \sqrt{Cm} (l - 1) \right], \quad (46)$$

kur ar $am(x)$ apzīmēta Jakobi amplitūdas funkcija [15].

Tāpat no eliptisko funkciju teorijas zināma Jakobi eliptiskā sinusa funkcija:

$$sn(x) \stackrel{\text{def}}{=} \sin am(x). \quad (47)$$

Ņemot vērā izteiksmes (45), (46) un (47), tagad iespējams uzrakstīt meklēto izteiksmi filamenta stacionāro formu raksturojošajam leņķim ϑ :

$$\vartheta = 2 \sin^{-1} \left[\sin \frac{\vartheta_m}{2} sn \left(K \left(\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2} \right) + \sqrt{Cm} (l - 1) \right) \right]. \quad (48)$$

Savukārt, lai noteiktu ϑ_m , kas nepieciešams meklētā leņķa aprēķināšanai, pietiek atrisināt sekojošu vienādojumu un iegūto rezultātu ievietot izteiksmē (48):

$$K\left(\sin^2 \frac{\vartheta_m}{2}\right) = \sqrt{Cm}. \quad (49)$$

Tā kā vienādojuma (49) sakni analītiski atrast nav iespējams, vienīgā iespēja ir to darīt ar kādu skaitlisko metodi. Šajā darbā tas darīts ar *Mathematica* vidē pieejamās funkcijas *FindRoot* palīdzību. Šai funkcijai iespējams noteikt pietiekami stingrus precizitātes kritērijus (*AccuracyGoal* – „Infinity”, *PrecisionGoal* – 250, *WorkingPrecision* – 500, *MaxIterations* – 10000), lai iegūto rezultātu, salīdzinoši ar skaitlisko simulāciju ceļā iegūtajiem datiem (par to precizitāti skat. nodaļu 3.3), varētu uzskatīt par precīzu. Pilns izveidotās programmas izejas kods sniegts 3. pielikumā, savukārt, šādā ceļā iegūtie rezultāti ar skaitliskajām simulācijām salīdzināti nodaļā 3.3.

3 Skaitlisko simulāciju veikšana un iegūtie rezultāti

3.1 Iegūto vienādojumu risināšanas iespējas

Lai kvantitatīvi pētītu feromagnētiskā mikropeldētāja dinamiku, nepieciešams atrisināt nodaļā 1.2 iegūtos filamenta formu raksturojošos vienādojumus (15) un (16) ar to robežnosacījumiem (17), (18), (19), un sākumnosacījumu (20), kā arī nodaļā 1.3 iegūtos masas centra koordinātu vienādojumus (23) un (24). Viegli saprast, ka šādus vienādojumus praktiski iespējams risināt tikai skaitliski, ar tuvinātu metožu palīdzību. Ja masas centra kustības vienādojumus, zinot visus nepieciešamos parametrus, iespējams salīdzinoši vienkārši atrisināt ar skaitliskās integrēšanas metožu palīdzību (nodaļā 3.3 aplūkots jautājums par konkrētās tuvinātās integrēšanas metodes izvēles nozīmību – salīdzinātas aprēķinu kļūdas starp nosacīti visvienkāršāko – trapeču – un salīdzinoši daudz precīzāko kubisko spline interpolācijas metodi), tad formu raksturojošās diferenciālvienādojumu sistēmas tuvināta risināšana ir salīdzinoši netriviāls jautājums.

Skaitlisko metožu literatūrā [16] iespējams izdalīt vairākus parciāldiferenciālvienādojumu skaitliskās risināšanas metožu pamatveidus. Nosacīti iespējams izdalīt dažas pazīstamākās metožu grupas:

1. galīgo diferencu metodes,
2. galīgo elementu metodes,
3. galīgo tilpumu metodes.

Galīgo diferencu metodes ir fundamentāli vienkāršākas par pārējām, taču arī sliktāk piemērotas noteiktu problēmu modelēšanai, īpaši tas attiecas uz problēmām, kas definētas apgabalos ar kompleksu ģeometriju. Šajā darbā vienādojumu (15) un (16) risināšanai tiek izmantota galīgo diferencu metode, ne tikai dēļ tās salīdzinošās vienkāršības un ātrdarbības (zemas kārtas diferencu gadījumā), bet arī tāpēc, ka dotās problēmas gadījumā nevienai no pārējām metodēm nav acīmredzamu priekšrocību pār galīgo diferencu metodi.

Vienādojumi (15) un (16) tiek diskretizēti, izmantojot otrās kārtas centrālās diferences telpā un, vienādojuma (15) gadījumā, pirmās kārtas diferenci laikā atpakaļ. Aizstājot atvasinājumus ar to galīgo diferencu analogiem (iegūtās galīgo diferencu formulas apskatāmajiem vienādojumiem sniegtas 1. pielikumā), tiek iegūta lineāra algebrisku vienādojumu sistēma vienādojumam (16), kā arī nelineāra algebrisku vienādojumu sistēma vienādojumam (15), kas tālāk tiek risināta ar Ņūtona metodi [17]. Shēmas precizitāte formāli ir pirmās kārtas pēc laika un otrās kārtas pēc telpas (izņemot uz galapunktiem), taču jāņem vērā arī fakts, ka programmā meklēto rezultātu iegūšanai papildus notiek arī skaitliskā

integrēšana, kas arī ietekmē gala rezultātu precizitāti. Sīkāk precizitātes jautājumi apskatīti nodaļā 3.3.

3.2 Skaitlisko simulāciju rezultāti

Ar nodaļā 3.1 aprakstītās programmas palīdzību tika veiktas feromagnētiskā mikropeldētāja dinamikas simulācijas pie dažādām parametru vērtībām. Iegūtie rezultāti sniegti šādu grafiku formā:

1. masas centra ātruma y koordināte (mikropeldētāja kustība notiek y koordinātes virzienā – perpendikulāri ārējam magnētiskajam laukam), kā funkcija no bezdimensionālā laika,
2. masas centra pārvietojuma y koordināte, kā funkcija no bezdimensionālā laika,
3. masas centra ātruma y koordinātes vidējā vērtība, kā funkcija no ārējā magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ceturtais saknes. Šis grafiks ļauj pie fiksētas magnetoelastiskā skaitļa C_m vērtības noteikt maksimālajam kustības ātrumam atbilstošo optimālo ārējā lauka bezdimensionālo frekvenci.

Papildus sniegti arī simulācijās iegūto feromagnētiskajam mikropeldētājam perioda laikā raksturīgo formu attēli. Tā kā mikropeldētāja dinamikai raksturīgs stabilizācijas periods kustības sākumā (tā raksturs un ilgums atkarīgs no magnetoelastiskā skaitļa C_m un ārējā magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ω), iepriekš minētajos ātruma grafikos attēlota kustības periodiskā daļa, kas iestājas pēc stabilizācijas perioda beigām, savukārt, stabilizācijas periods attēlots kā atsevišķs grafiks. Šī darba mērķi faktiski attiecas uz mikropeldētāja kustības periodisko daļu – stabilizācijas periods atsevišķi pētīts netiek. Protams, vietas ierobežojumu dēļ, sniegti tikai grafiki, kas visspilgtāk ataino no iegūtajiem rezultātiem izdarītos secinājumus.

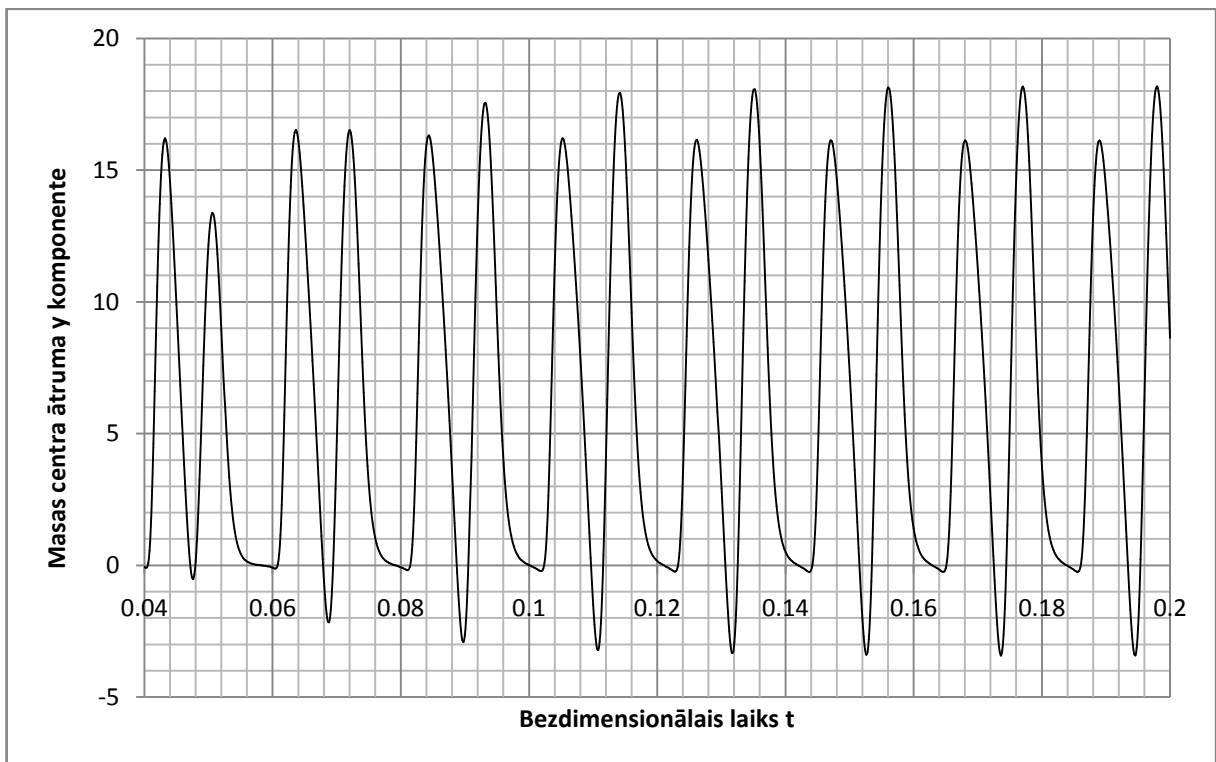
Salīdzinot attēlus 2.1 un 2.2, viegli novērtēt magnetoelastiskā skaitļa C_m vērtības ietekmi uz dinamikas raksturu – C_m pieaugot, pieaug arī ātruma absolūtās vērtības un, līdz ar to, palielinās masas centra pārvietojums. Jāatzīmē, ka šāda saistība starp C_m un mikropeldētāja ātrumu pastāv tikai noteiktā C_m vērtību intervālā $C_{m_{kr}} < C_m < C_{m_p}$, kur kritiskā C_m vērtība (magnetoelastiskā skaitļa vērtība, kas jāpārsniedz, lai vispār izveidotos U-tipa metastabīlā forma – šajā gadījumā cilpa) ar 2. nodaļā aprakstītā analītiskā risinājuma palīdzību noteikta kā $C_{m_{kr}} \approx 2,46741$ (jāatzīmē, ka, lai gan literatūrā [13] šī kritiskā vērtība iepriekš noteikta kā $C_{m_{kr}} \approx 2,597$, šajā darbā iegūtā vērtība uzskatāma par precīzāku, jo literatūras avotā minētā vērtība iegūta lineārā tuvinājumā). Vērtība $72 < C_{m_p} < 100$, savukārt, ir pārejas vērtība, kuru pārsniedzot šajā darbā pirmo reizi novērots kvalitatīvi jauns,

atšķirīgs mikropeldētāja dinamikas režīms, kas agrāk literatūrā nav aprakstīts. Tas redzams attēlos 2.4 un 2.7.

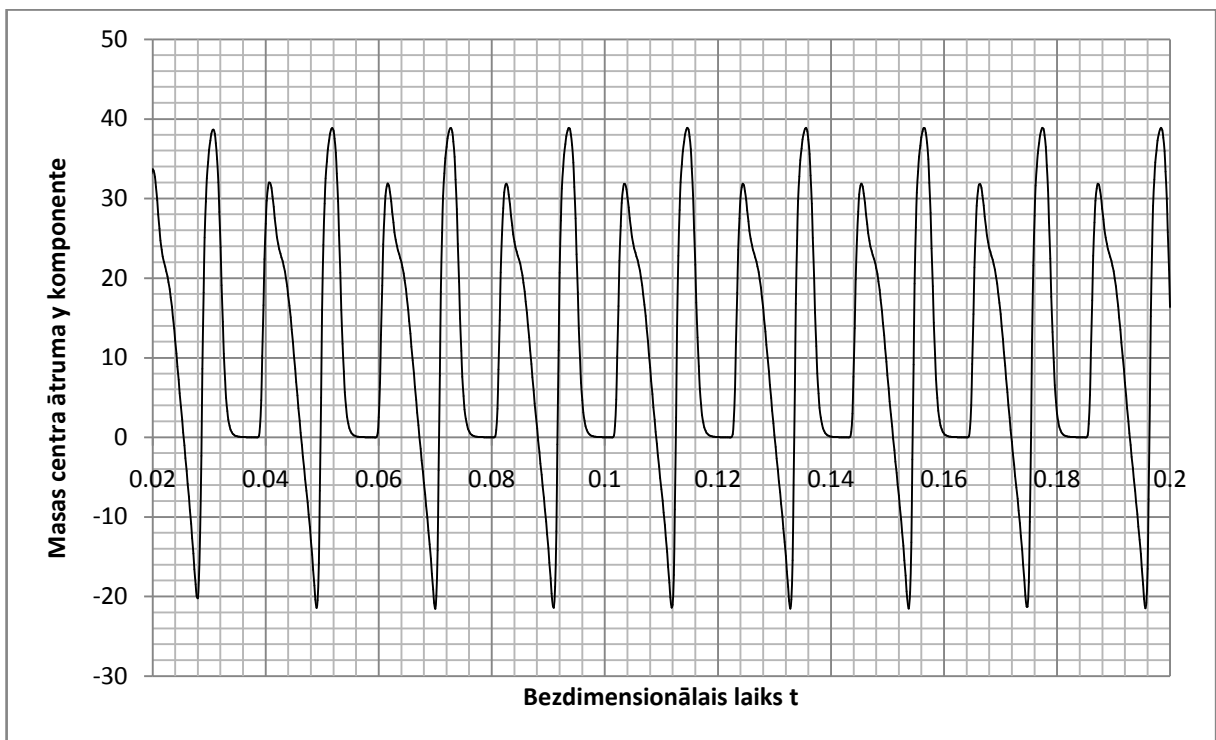
Savukārt, pēc attēliem 2.2 un 2.3 viegli noteikt ārējā magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ietekmi uz mikropeldētāja kustību. Redzams, ka lineāri pieaugot magnētiskā lauka bezdimensionālajai frekvencei, lineāri pieaug arī mikropeldētāja oscilācijas frekvence. Tā kā praktiski tas saistīts arī ar tādu situāciju izveidošanos, kurās mikropeldētājam raksturīgās metastabilās formas nepaspēj pilnībā izveidoties augstās lauka frekvences dēļ, viegli saprast, ka ārējā magnētiskā lauka frekvence tiešā veidā ietekmēs mikropeldētāja vidējo ātrumu. Tādēļ, tika veikti augstas precizitātes (telpas punktu skaits $N = 2000$) vidējo ātrumu aprēķini pie dažādām ārējā magnētiskā lauka frekvencēm un parādīts (skat. att. 2.9), ka mikropeldētāja vidējam ātrumam eksistē aptuveni kvadrātiska atkarība no ārējā magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ceturtās saknes ($\omega^{\frac{1}{4}} = \frac{L}{L_e}$, skat. nodaļu 1.2).

Attēlos 2.10, 2.11 un 2.12 attēlotas filamentam raksturīgās metastabilās formas. Līdz šim literatūrā aprakstīts gadījums, kad izveidojas U-tipa forma ar vienu cilpu [13], savukārt forma ar divām vienā virzienā vērstām cilpām šajā darbā konstatēta pirmo reizi.

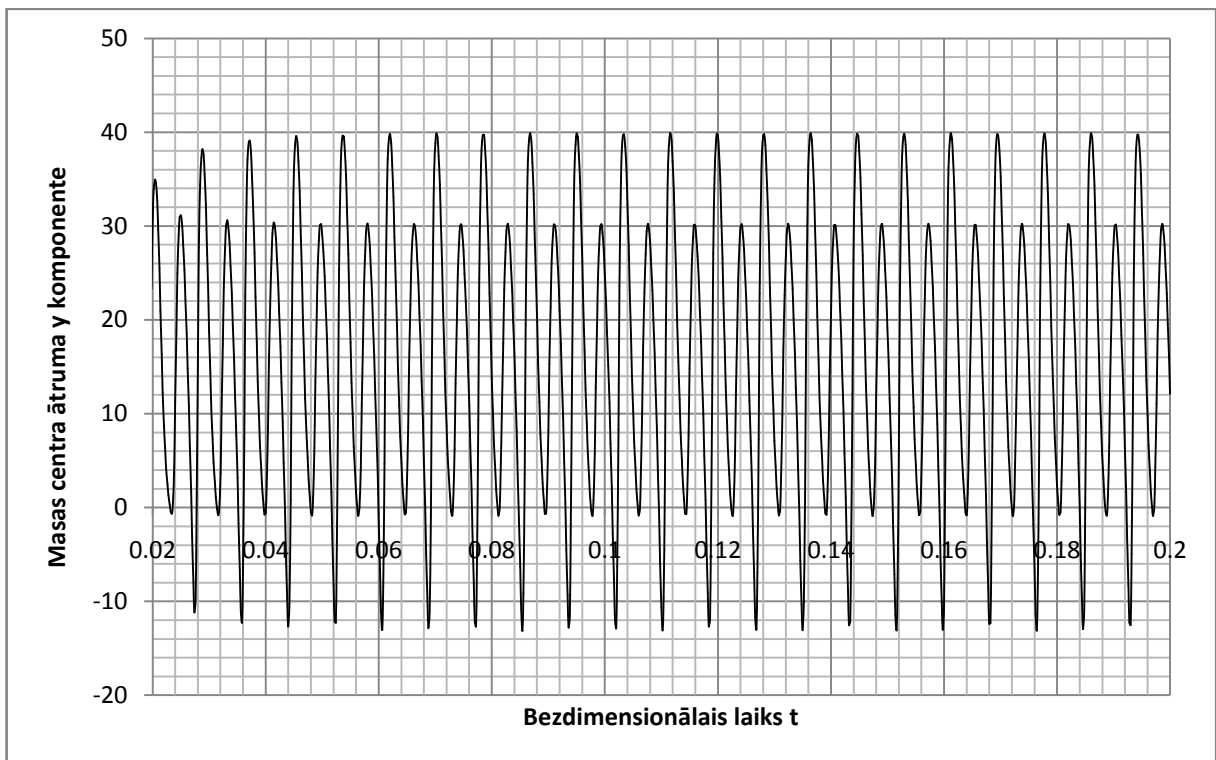
Savukārt aplūkojot masas centra pārvietojuma grafikus (attēli 2.6, 2.7, 2.8 un īpaši 2.9), tika izvirzīta hipotēze par to, ka šajos grafikos, iespējams, novērojama periodu dubultošanās parādība [18]. Lai šo hipotēzi pārbaudītu, būtu nepieciešams veikt aprēķinus pie vēl augstākām C_m vērtībām un pārbaudīt vai ir novērojama arī periodu četrkāršošanās un eventuāla pāreja uz haotisku dinamikas režīmu. Šādas pārbaudes iespējas ierobežo izmantotās skaitliskās shēmas īpašības (skat. nodaļas 3.3 un 4) un pagaidām tās paliek turpmākiem pētījumiem.



2.1 att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no bezdimensionālā laika
 $C_m = 36, \omega = 300$

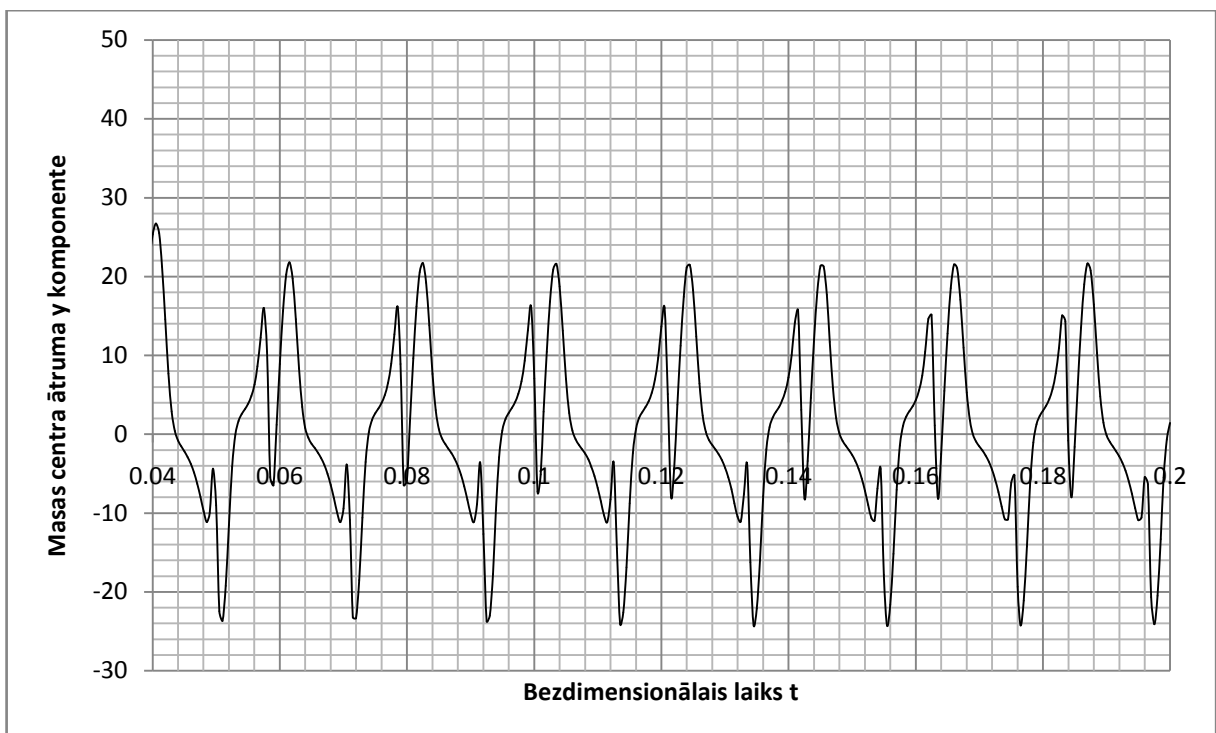


2.2 att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no bezdimensionālā laika
 $C_m = 72, \omega = 300$



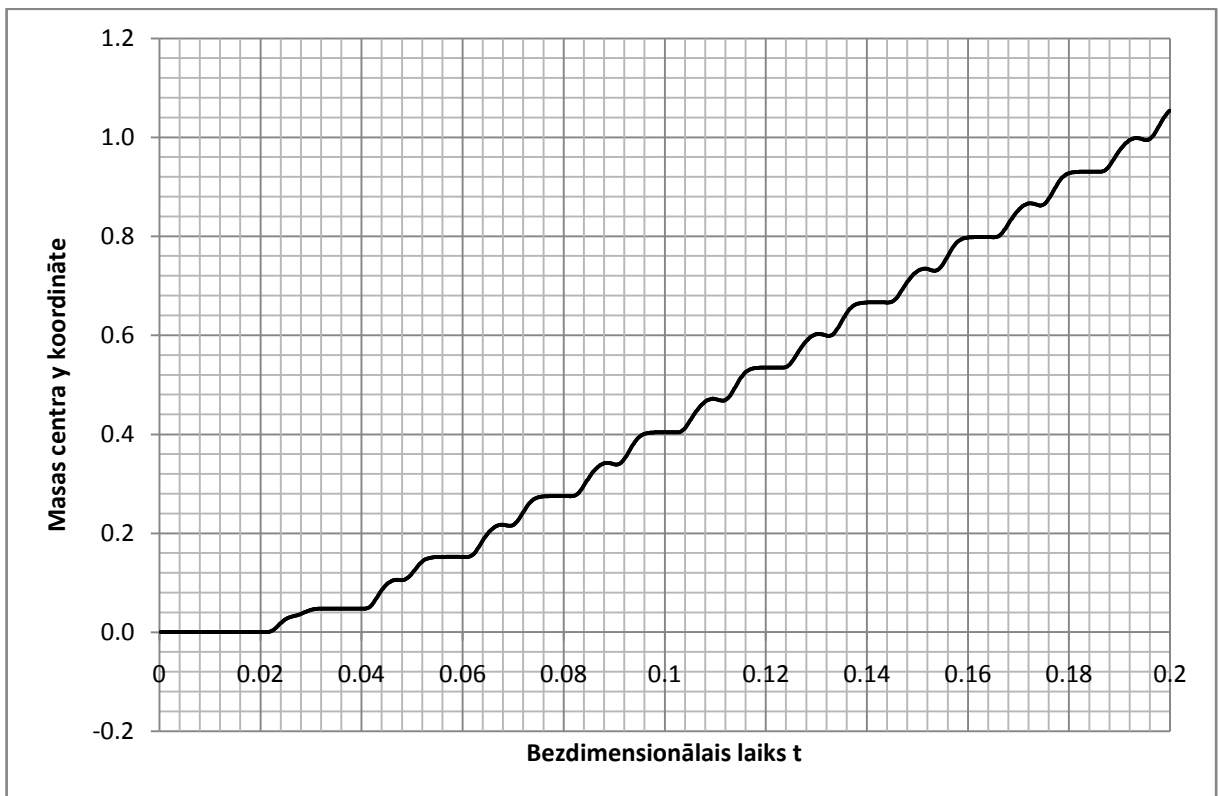
2.3 att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 72, \omega \approx 760$$



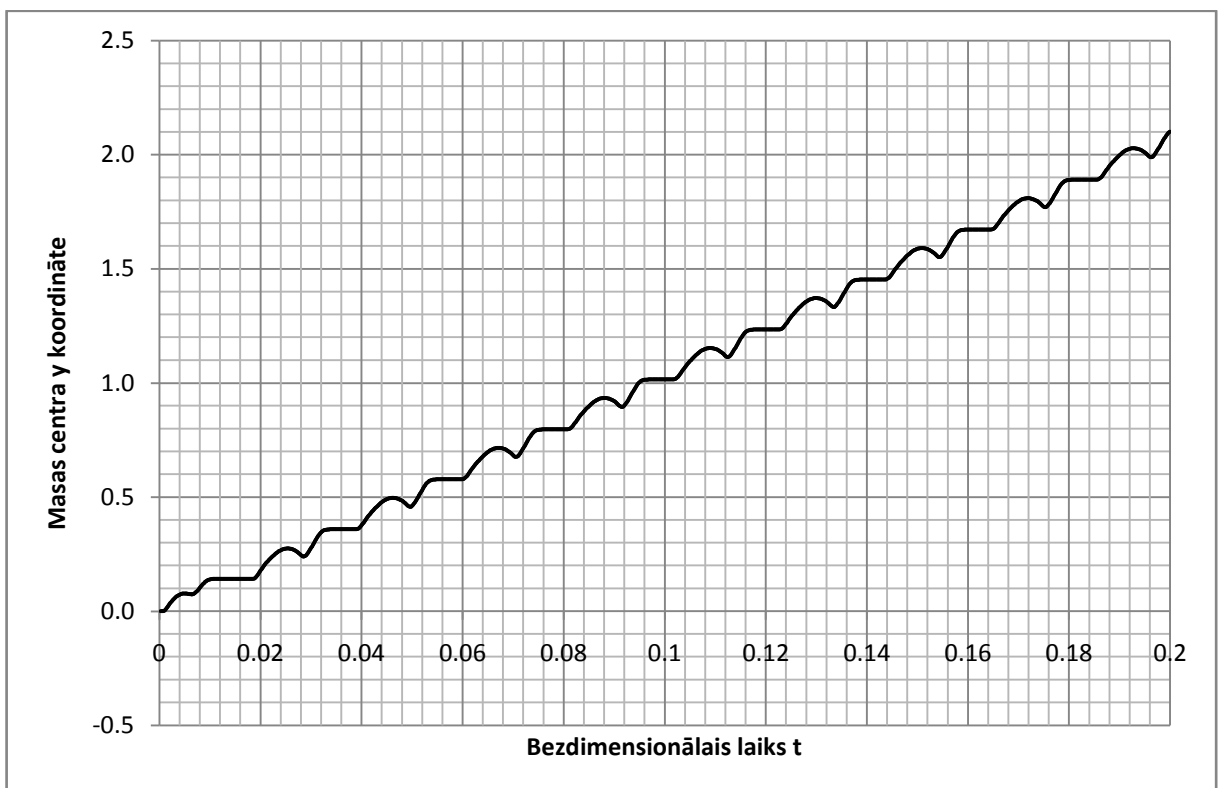
2.4 att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 100, \omega = 300$$



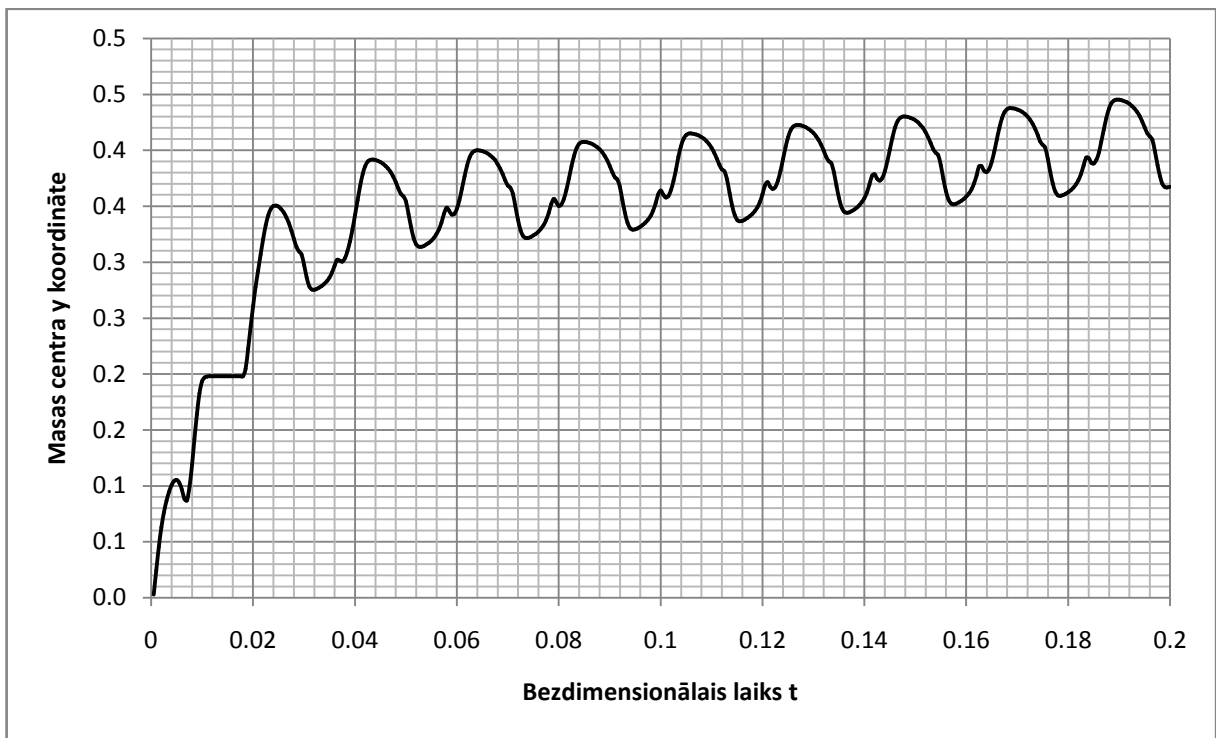
2.5 att. Masas centra y koordinātes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 36, \omega = 300$$



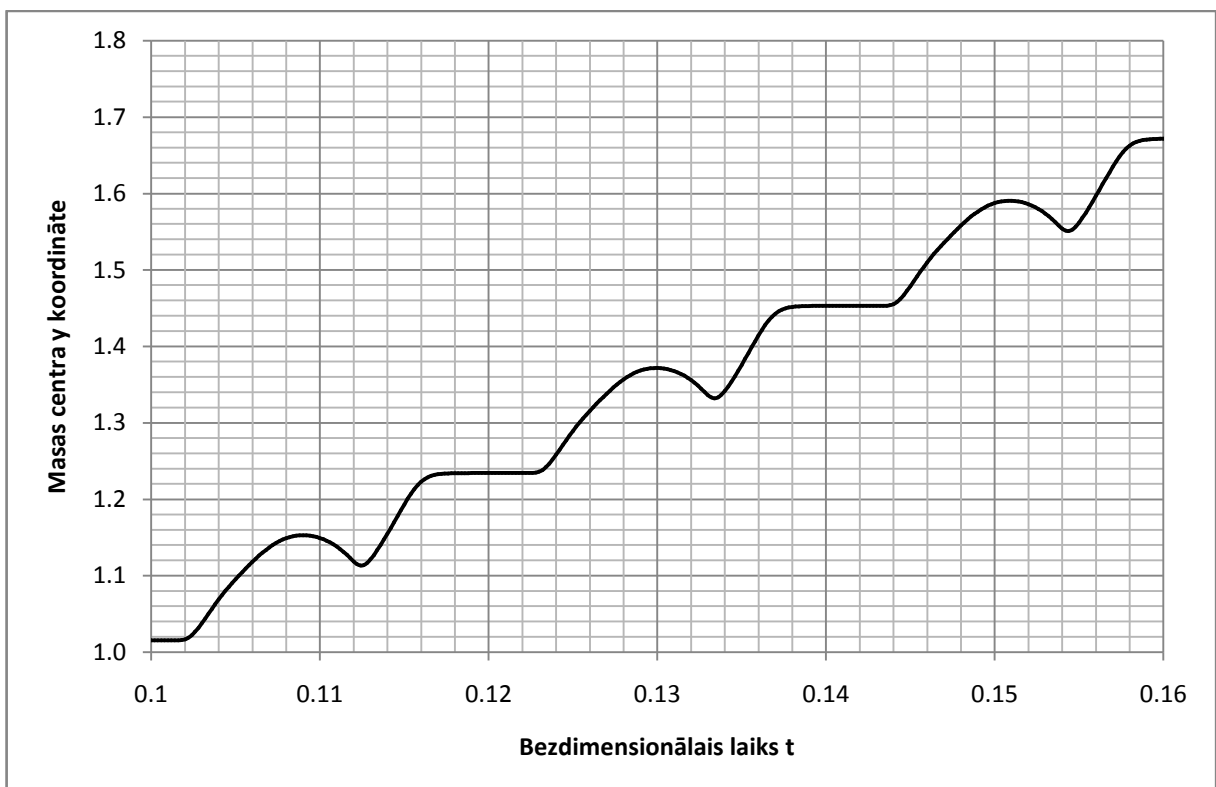
2.6 att. Masas centra y koordinātes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 72, \omega = 300$$



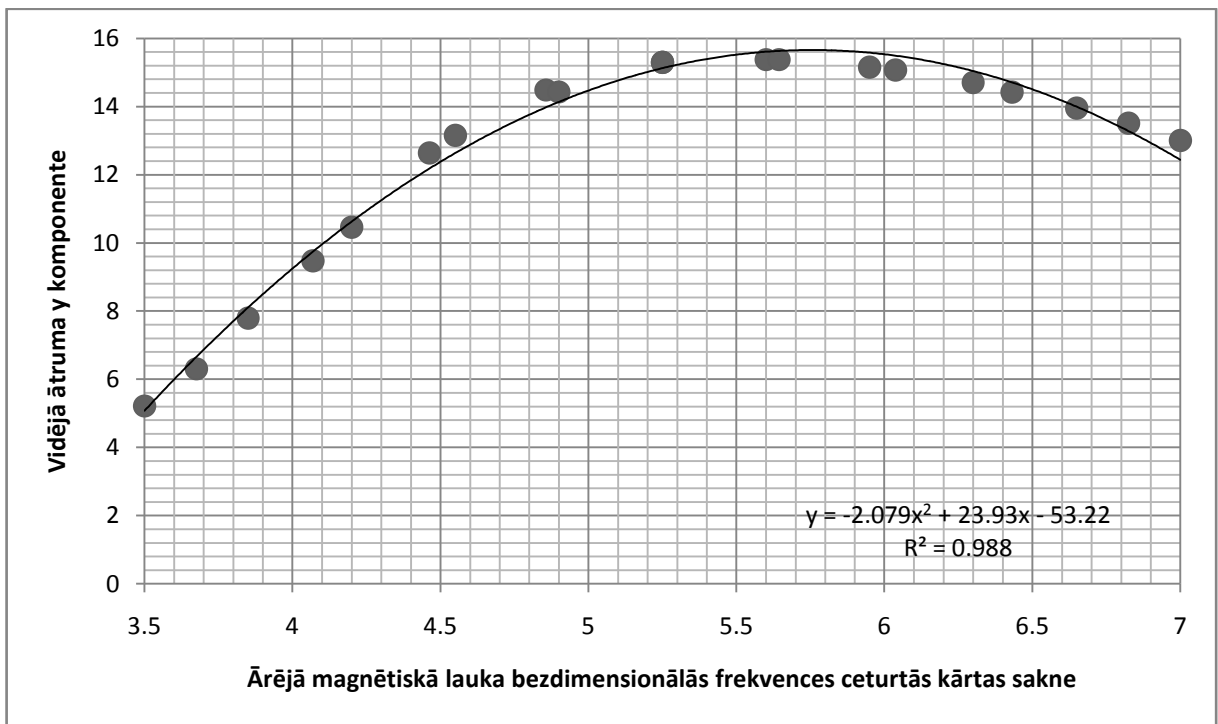
2.7 att. Masas centra y koordinātes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 100, \omega = 300$$



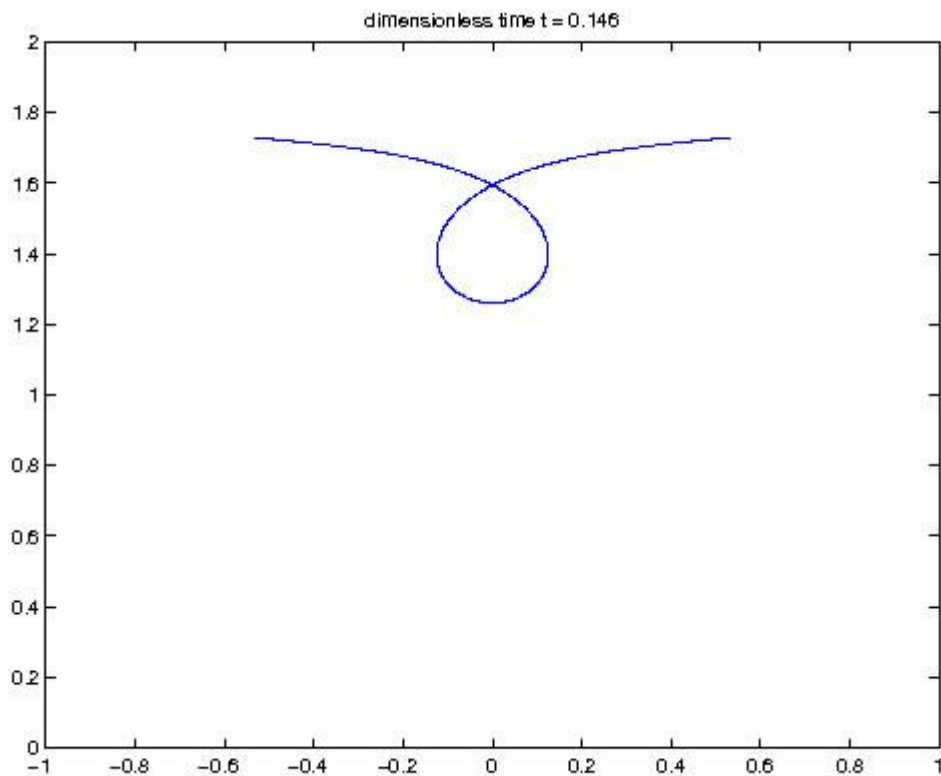
2.8 att. Masas centra y koordinātes atkarība no bezdimensionālā laika

$$C_m = 72, \omega = 300$$



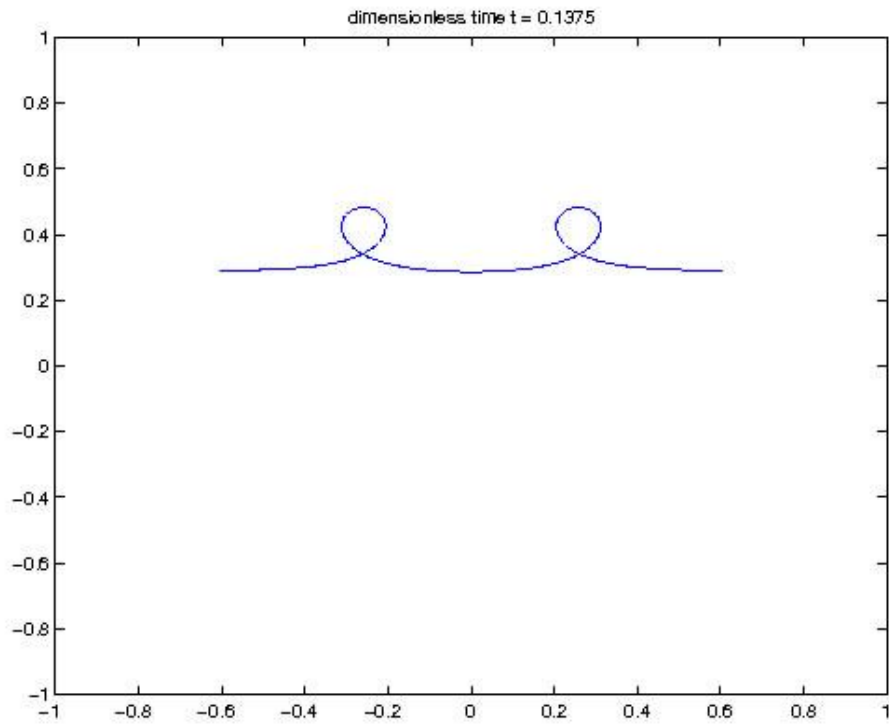
2.9 att. Vidējā ātruma y komponentes atkarība no $w^{1/4}$

$C_m = 72$



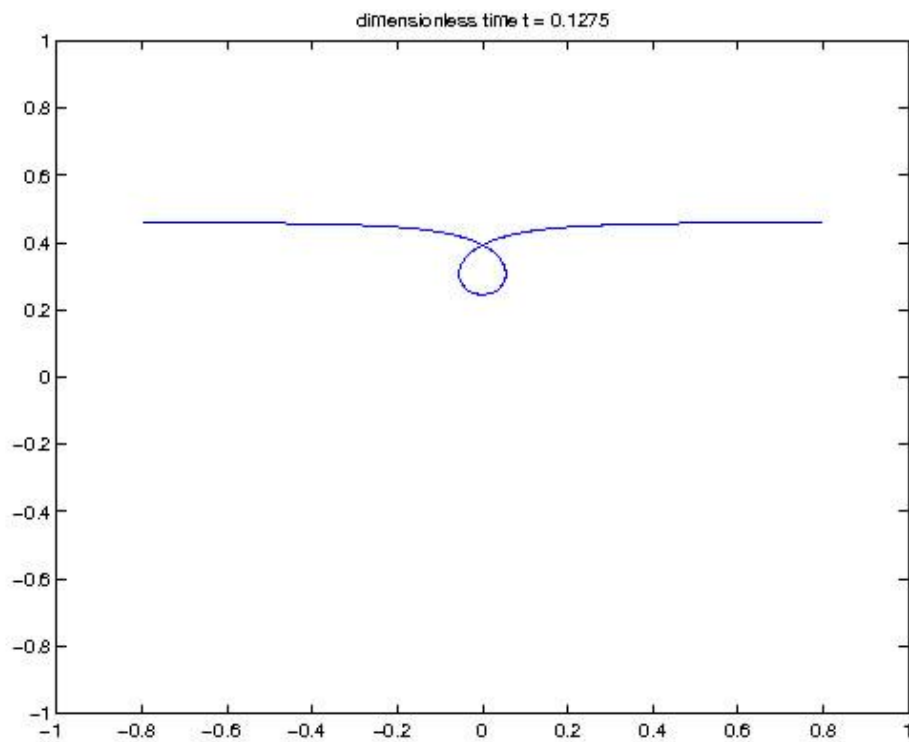
2.10 att. Filamenta raksturīgā forma ar vienu cilpu

$C_m = 72, \omega = 300$



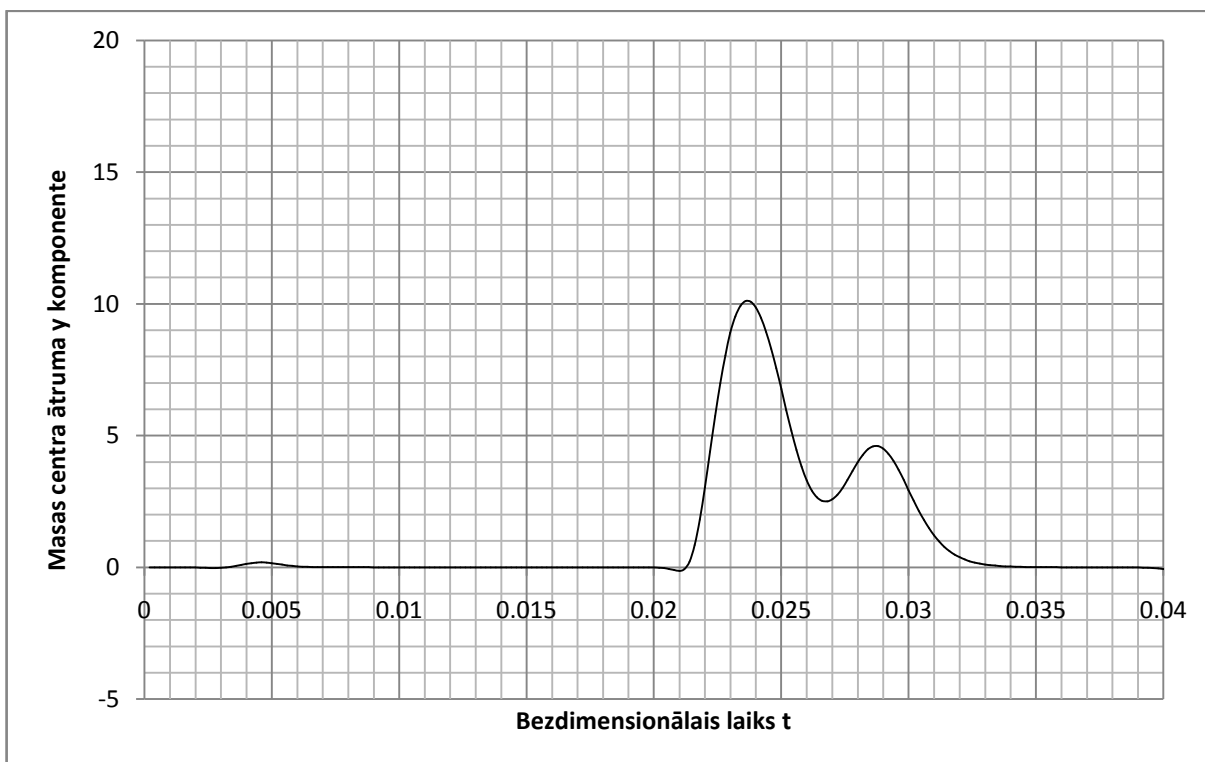
2.11 att. Filamenta raksturīgā forma ar divām cilpām

$$Cm = 100, \omega = 300$$



2.12 att. Filamenta raksturīgā forma ar vienu cilpu

$$Cm = 100, \omega = 300$$



2.13. att. Filamenta stabilizācijas periods

$$C_m = 72, \omega = 300$$

3.3 Aprēķinu precizitātes un stabilitātes jautājumi

Darbā izmantotās shēmas stabilitātes un precizitātes īpašības, cik zināms pēc pieejamās literatūras, vēl nav pētītas. Šo īpašību izpēte ir īpaši būtiska, ja ņem vērā faktu, ka ar šajā darbā simulāciju ceļā iegūtajiem rezultātiem tieši salīdzināmu eksperimentālu datu pagaidām nav. Līdz ar to, vienīgie pieejamie kontroles mehānismi kā nodrošināt skaitlisku aprēķinu ceļā iegūto datu lietderību ir izmantotās shēmas īpašību izpēte, kā arī salīdzinājums, kur tas iespējams, ar analītiskā ceļā iegūtiem risinājumiem. Ņemot vērā to, ka analītisks atrisinājums eksistē tikai konstanta lauka robežgadījumā (un šī salīdzinājuma vispārināšanas iespējas ir visai nenoteiktas), skaidrs, ka skaitliskās shēmas īpašību izpēte ir būtiska, lai iegūtu izpratni par darbā apskatāmā feromagnētiskā mikropeldētāja dinamiku vispār.

Diemžēl, ņemot vērā vienādojumu (15) un (16) visai sarežģīto dabu – nākas risināt sistēmu, kas sastāv no nelineāra, ceturrtās kārtas parciāldiferenciālvienādojuma (15) ar periodiskiem robežnosacījumiem (17) un (19), kā arī lineāra otrās kārtas parastā diferenciālvienādojuma (16), kas faktiski nosaka pirmā vienādojuma koeficientus – formāla, matemātiski korekta stabilitātes analīze ir ārkārtīgi darbietilpīga un visai komplicēts process, kas šajā darbā arī netiek veikts. Tā vietā shēmas stabilitāti nākas pētīt empīriski.

Veicot simulācijas secināts, ka izvēloties „saprātīgus” laika soļus $\tau = \frac{1}{T}$, kur T ir laika soļu skaits, ko uzdots rēķināt („saprātīgus”, t.i. – tādus, kas ļauj aplūkot pietiekami garu mikropeldētāja dinamikas ciklu – vismaz līdz 0,2 bezdimensionālā laika vienībām – un vienlaicīgi ļauj paturēt aprēķina ilgumu dažu stundu, nevis dienu, robežās), eksistē noteikti ierobežojumi attiecībā pret telpas punktu skaita, kā arī magnetoelastiskā skaitļa vērtību izvēlēm. Šos ierobežojumus pārkāpjot aprēķins ātri diverģē; turklāt laiks, kurā programma pāriet no normāliem rezultātiem līdz stāvoklim, kurā tā ir spiesta pārtraukt darbību neierobežoti augošu rezultātu dēļ, ir tikai daži (divi līdz pieci) laika soļi.

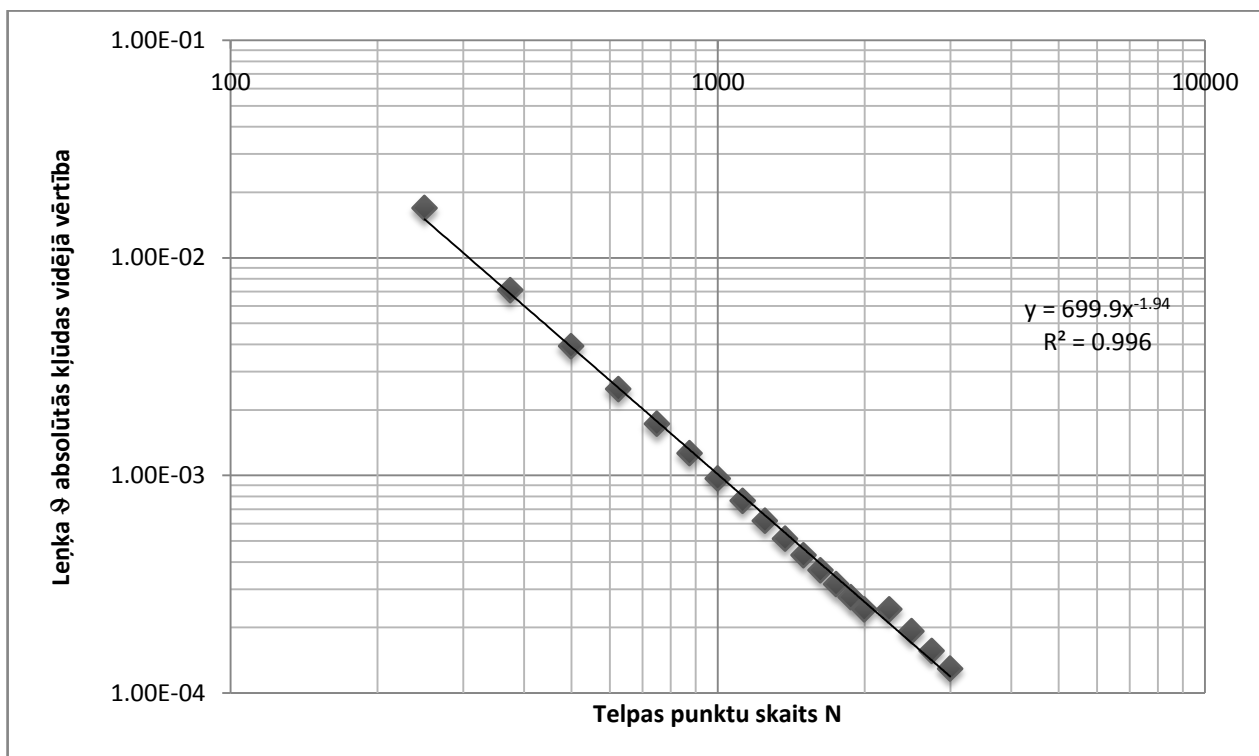
Darba gaitā secināts, ka aprēķinus optimāli veikt pie laika soļa $10^{-6} \leq \tau \leq 10^{-5}$. Rēķinot ar laika soli $\tau = 10^{-5}$ novērots, ka nestabilitāti izraisa telpas punktu skaita N izvēle, kas mazāka par aptuveni 200 soļiem (tas atbilst telpas solim $h \geq 0,01$), kā arī Cm vērtību izvēle, kas lielāka par aptuveni 150 magnetoelastiskā skaitļa bezdimensionālajām vienībām. Ja ierobežojumu attiecībā uz telpas soļa izmēriem tāpat bieži nāktos ievērot precizitātes apsvērumu dēļ, tad ierobežojumam pret pārāk lielu Cm vērtību izmantošanu ir potenciāls nopietni ierobežot turpmākus pētījumus (īpaši nodaļā 3.2 izvirzīto hipotēžu pārbaudi) esošās skaitlisko aprēķinu shēmas ietvaros.

Izveidotās aprēķinu shēmas precizitāte, savukārt, pārbaudīta divos veidos. Pirmkārt, salīdzinātas skaitliski un analītiski (konstanta lauka robežgadījumā, skat. 2. nodaļu) iegūtās leņķa ϑ vērtības pie dažādām telpas punktu skaita izvēlēm. Otrkārt, aplūkots konstanta lauka robežgadījumā iegūtais masas centra ātrums pie dažādām telpas punktu skaita izvēlēm, jo kā zināms (skat. nodaļu 1.3), mikropeldētāja masas centra ātrumam konstantā laukā jābūt identiski vienādam ar nulli. Līdz ar to, jebkāds nenulles ātrums, kas iegūts aprēķinos, dod papildus iespēju novērtēt aprēķinu kļūdu. Turklāt salīdzinot abos veidos iegūtos kļūdas novērtējumus, iespējams izdarīt vismaz aptuvenus secinājumus par to, kura programmas daļa – vienādojumu risināšanai izmantotā galīgo diferencu shēma vai skaitliskā integrēšana ātruma noteikšanai – dod lielāku kļūdu. Tas savukārt ļauj izvērtēt atsevišķu programmas daļu uzlabošanas nepieciešamību.

Parādīts, ka leņķa ϑ absolūtā kļūda (t.i. starpība starp analītisko un skaitlisko rezultātu pēc absolūtās vērtības) ir atkarīga no telpas punktu skaita izvēles formā, kas tuva $\Delta\vartheta \sim \frac{1}{N^2}$. Ārkārtīgi līdzīga ir arī masas centra ātruma y komponentes atkarība no telpas punktu skaita. Šie novērojumi ir būtiski divējādā ziņā – pirmkārt, tie dod iespēju novērtēt sagaidāmo kļūdu pirms aprēķina sākšanas un tādējādi ļauj izvēlēties optimālus parametrus nepieciešamās precizitātes sasniegšanai. Otrkārt, tie parāda, ka lielāku daļu neprecizitāšu, kas novērojamas

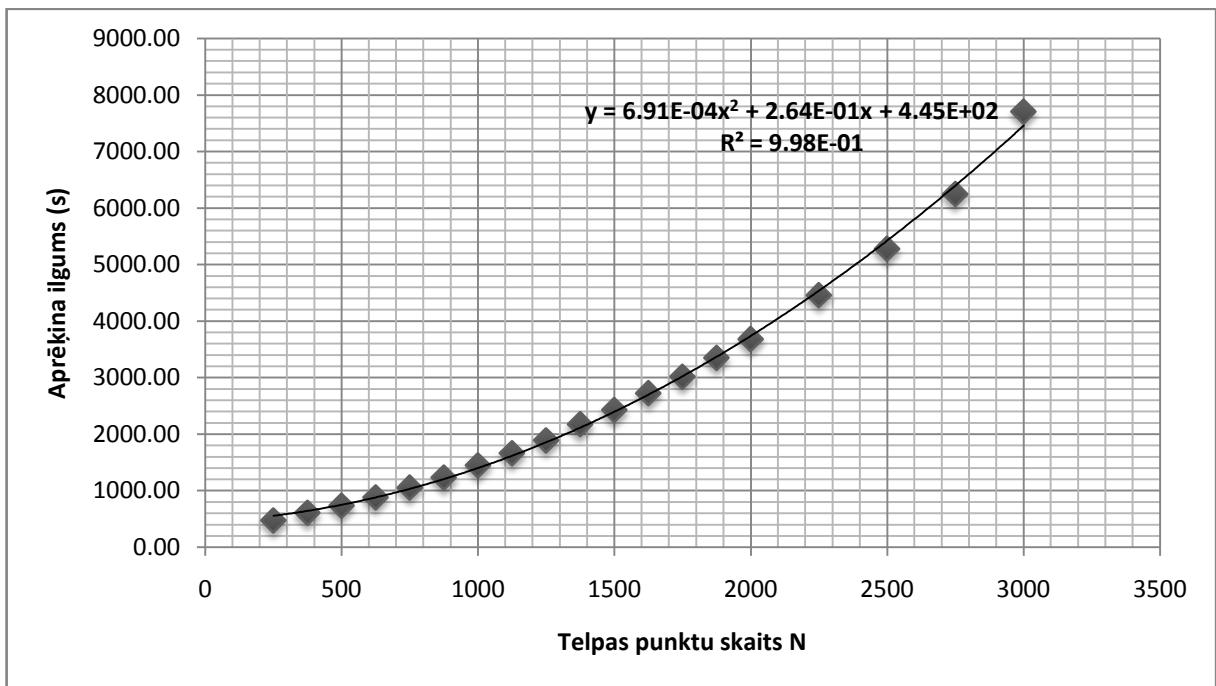
rezultātos, sastāda tieši vienādojumu (15) un (16) risināšanā izmantotā galīgo diferencu shēma.

Atsevišķi tika arī salīdzināta atšķirība ātruma rezultātos, kas radās integrējot formulas (23) un (24) ar trapeču formulu [17] vai analītiski (ar paketes MATLAB iespēju palīdzību) nointegrējot kubisko splainu interpolāciju integrējamai funkcijai. T.k. maksimālā novērojamā atšķirība bija ar kārtu 10^{-4} , var secināt, ka šo jautājumu tālāk apskatīt un izmantot integrēšanas metodes, kas precīzākas par trapeču integrēšanu nav lietderīgi.



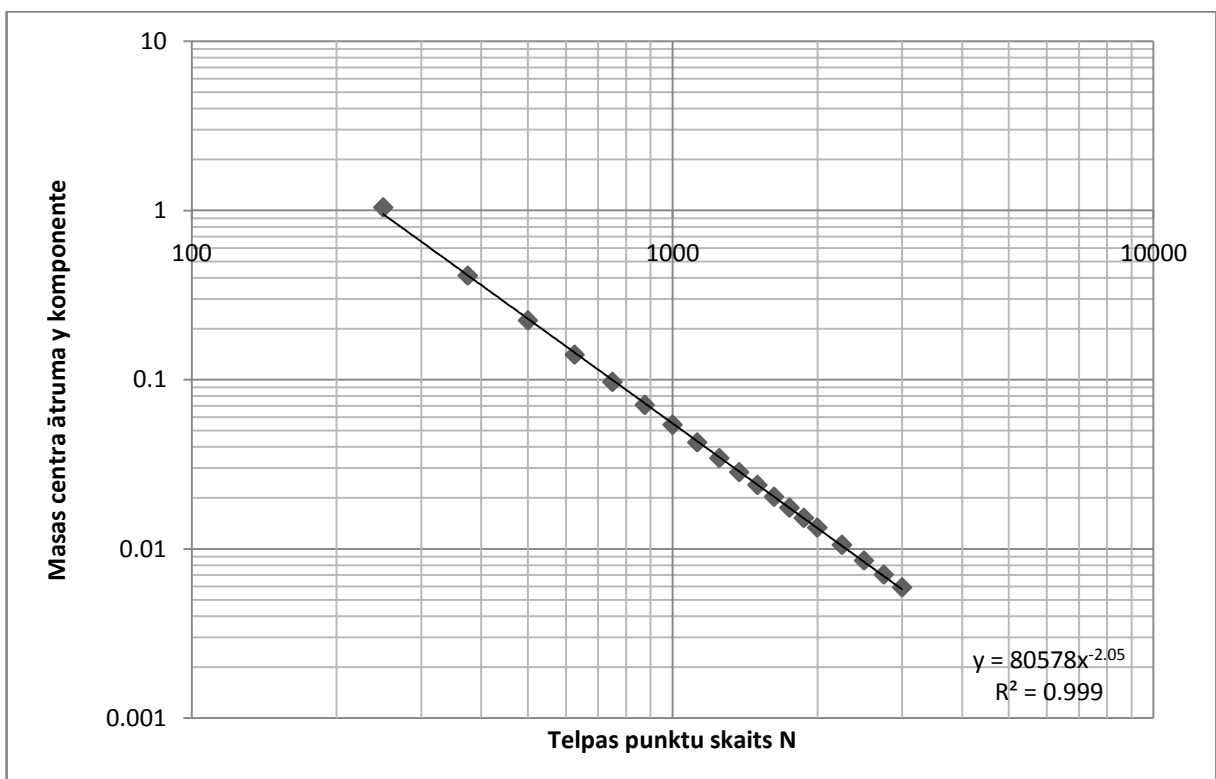
2.14. att. Lenka Θ absolūtās kļūdas atkarība no izvēlētā telpas punktu skaita

$$C_m = 100, \omega = 0, \tau = 10^{-5}$$



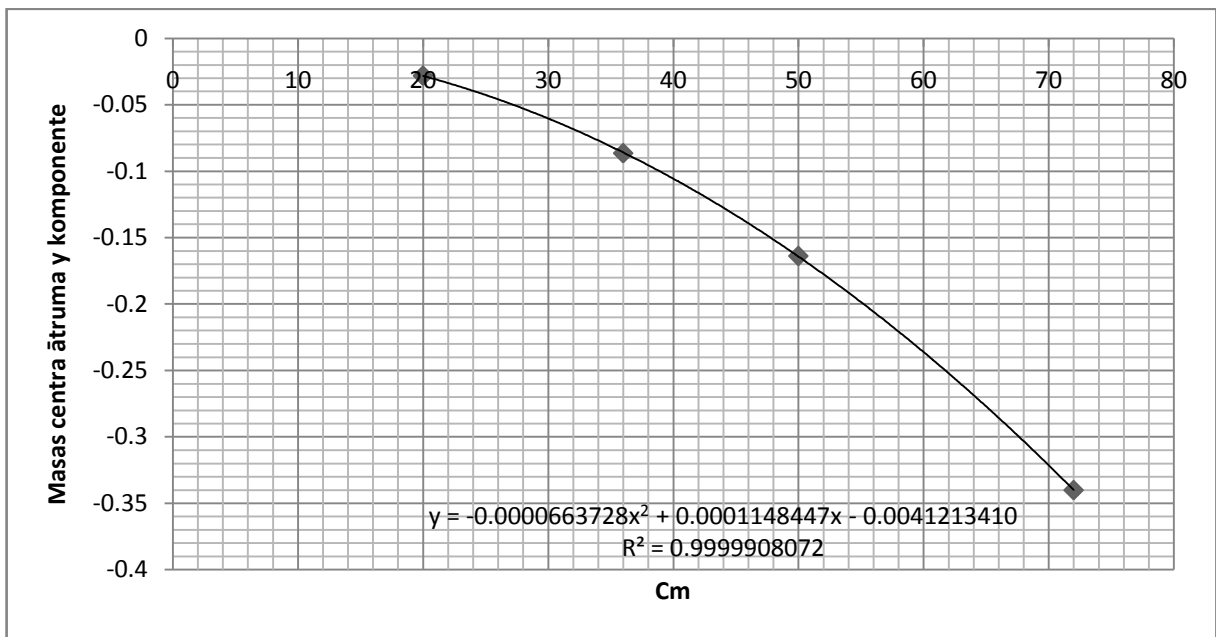
2.15. att. Aprēķina ilguma atkarība no izvēlētā telpas punktu skaita

$$C_m = 100, \omega = 0, \tau = 10^{-5}$$



2.16. att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no izvēlētā telpas punktu skaita

$$C_m = 100, \omega = 0, \tau = 10^{-5}$$



2.17. att. Masas centra ātruma y komponentes atkarība no izvēlētā magnetoelastiskā skaitļa

$$N = 2000, \omega = 0, \tau = 10^{-5}$$

4 Secinājumi un perspektīvas

Lai skaitliski modelētu feromagnētisku mikropeldētāju ar modificētu Kirhofa modeli elastīgam stienim, tika izstrādāta programma MATLAB vidē, kas rēķina literatūrā zināmos vienādojumus feromagnētiskā mikropeldētāja dinamikas raksturošanai un iegūti simulāciju dati. Atsevišķi tika izvests analītisks atrisinājums problēmas robežgadījumam, kad magnētiskais lauks ir stacionārs un pētīta simulāciju shēmas precizitāte un stabilitāte. Pirms apskatīt pašu simulāciju rezultātus, lietderīgi izdarīt secinājumus par skaitlisko simulāciju algoritma precizitāti un stabilitāti:

1. Apskatot konstanta lauka robežgadījumu un salīdzinot simulāciju rezultātus ar analītisko atrisinājumu redzams, ka leņķa ϑ vidējās absolūtās kļūdas (novirzes no analītiskā atrisinājuma) atkarība no izvēlēta telpas punktu skaita ir pakāpes funkcija, kas tuva izteiksmei $\Delta\vartheta_{vid} \sim \frac{1}{N^2}$.
2. Konstanta lauka robežgadījumā, feromagnētiskā mikropeldētāja masas centra ātruma y komponenti iespējams izmantot kā papildus precizitātes novērtēšanas līdzekli, jo no teorijas zināms, ka konstantā magnētiskā laukā filamenta masas centra ātrumam jābūt precīzi nullei. Arī šeit konstatēta līdzīga pakāpes funkcijas formā izsakāma atkarība no izvēlēta telpas punktu skaita, kas tuva $\Delta\vartheta_{vid} \sim \frac{1}{N^2}$.
3. Secināts arī, ka pieaugot magnetoelastiskā skaitļa Cm vērtībai, kvadrātiski pieaug arī aprēķinu kļūdas. Tas jāņem vērā izdarot aprēķinus pie lielām Cm vērtībām un attiecīgi jāizvēlas lielāks telpas punktu skaits aprēķinu shēmai, lai sasniegtu nepieciešamo precizitāti.
4. Empīriski secināts, ka shēmas stabilitāte ir visai jūtīga pret dažādu parametru maiņu. Ierobežojumi uz pārāk mazu telpas punktu skaitu vai pārāk nelielu laika soli principiāli neietekmē aprēķinu veikšanu (tikai palielina to izpildes laiku – kvadrātiski atkarībā no telpas punktu skaita un lineāri atkarībā no laika soļu skaita), turklāt šos parametrus jau tā ierobežoja rezultātu vēlamā precizitāte. Būtiskāks ir fakts, ka nestabilitātes vērojamas pie $Cm \geq 200$, jo šādu aprēķinu veikšanas nepieciešamība ir sagaidāma turpmākos pētījumos.

Aprēķinu relatīvās kļūdas ir pieļaujamas robežās: $\approx 1,5\%$ pie 250 telpas punktiem (īpaši mazāk punktus nav iespējams izmantot stabilitātes ierobežojumu dēļ) un tās kvadrātiski dilst palielinot telpas punktu skaitu uz režģa. Tāpēc, iegūtie simulāciju dati ir pietiekami precīzi, lai varētu izdarīt pamatotus secinājumus par feromagnētiskā mikropeldētāja dinamiku ārējā magnētiskā laukā.

Simulācijās iegūtie dati ļauj izdarīt vairākus secinājumus par feromagnētiskā mikropeldētāja dinamiku:

1. Magnetoelastiskais skaitlis Cm intervālā no kritiskās Cm vērtības (noteikta izmantojot analītisko atrisinājumu konstantam laukam) $Cm_{krit} \approx 2,46741$ līdz kādai pārejas vērtībai ($72 < Cm_p < 100$) nosaka mikropeldētāja ātrumu un līdz ar to masas centra pārvietojumu. Šajā režīmā filamenta kustība kvalitatīvi sakrīt ar literatūrā [10] aprakstīto un filamenta forma oscilē starp sākumstāvoklim (kurā filamenta gali ir nedaudz ieliekti virzienā, kas ortogonāls ārējā lauka virzienam) līdzīgu formu un formu, kas satur vienu cilpu (kura izjauc filamenta simetriju, tādējādi ļaujot tam kustēties).
2. Iegūtie rezultāti ļauj izvirzīt hipotēzi, ka masas centra pārvietojuma grafikos novērojama periodu dubultošanās parādība. Šīs hipotēzes pārbaudei nepieciešams veikt aprēķinus pie lielākām Cm vērtībām, meklējot iespējamu periodu četrkāršošanas un pāreju uz haotisku dinamikas režīmu.
3. Pārsniedzot pārejas vērtību Cm_p novērojams kvalitatīvi atšķirīgs mikropeldētāja dinamikas režīms, kas rezultātos redzams aprēķinos pie $Cm = 100$. Šāds režīms zinātniskajā literatūrā līdz šim nav aprakstīts.
4. Magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ietekme uz filamenta oscilācijas frekvenci ir lineāra, savukārt mikropeldētāja vidējam ātrumam vērojama kvadrātiska atkarība no ārējā magnētiskā lauka bezdimensionālās frekvences ceturtais kārtas saknes (kas ekvivalenta lielumam $\frac{L}{L_e}$). Tas ļauj noteikt optimālo magnētiskā lauka frekvenci maksimālam mikropeldētāja ātrumam ($\omega_{opt}^{\frac{1}{4}} \approx 5,6$).
5. Salīdzinot iegūtos datus ar pieejamo literatūru [10], nākas secināt, ka eksistē kvalitatīva neatbilstība starp šajā darbā iegūtajiem mikropeldētāja masas centra pārvietojuma un ātruma atkarības no frekvences datiem. Tomēr privātas komunikācijas ar darba [10] autoriem rezultātā noskaidrots, ka attiecīgajā darbā pieļauta kļūda skaitliskajos aprēķinos un to izlabojot, rezultāti kļūdas robežās sakrīt.

Jāatzīmē, ka 2. un 3. punktos izdarītie secinājumi paver plašas iespējas turpmākiem pētījumiem. Ir atklāts kvalitatīvi jauns mikropeldētāja dinamikas režīms, kura parādīšanos un hipotētisku papildus režīmu eksistenci (pie vēl augstākām Cm vērtībām) iespējams pētīt ar Furjē analīzes metodēm. Tāpat nepieciešams pārbaudīt 2. punktā izvirzīto hipotēzi par periodu dubultošanas un iespējamu pāreju haotiskā režīmā pie augstākām Cm vērtībām. Ņemot vērā darbā izvirzītās hipotēzes, empīriski atrastie shēmas stabilitātes ierobežojumi

attiecībā pret izmantojamām parametru (īpaši magnetoelastiskā skaitļa C_m) vērtībām liek rūpīgi apsvērt shēmas turpmākas uzlabošanas iespējas un pārejas uz principiāli atšķirīgu vienādojumu risināšanas algoritmu iespējamo lietderību.

1. pielikums. Galīgo diferencu shēma filamenta formu raksturojošo vienādojumu tuvinātai risināšanai.

Jebkuras galīgo diferencu shēmas pamatā ir diferenciālvienādojumā esošo atvasinājumu aizstāšana ar tuvinātām galīgo diferencu formulām, tādējādi iegūstot algebrisku vienādojumu sistēmu, kuru tālāk iespējams risināt ar tradicionālām metodēm. Šajā darbā vienādojumā (15) sastopamais pirmais atvasinājums pēc laika aizstāts ar galīgo diferenci laikā atpakaļ, kamēr visi citi vienādojumos (15) un (16) atrodamie atvasinājumi aizstāti ar tiem atbilstošajām otrās kārtas centrālajām diferencēm. Visas izmantotās diferencu formulas iespējams viegli atrast literatūrā [16,17] vai izvest, izmantojot funkcijas izvērziņu Teilora rindā.

Vienādojumi (15) un (16) tiek risināti izmantojot vienmērīgu, strukturētu režģis ar telpas punktiem $i = 0 \dots N$ un laika soļiem $n = 0 \dots T$. Attālums starp diviem laika slāņiem ir $\tau = \frac{1}{T}$, savukārt attālums starp diviem blakus esošiem telpas punktiem ir $h = \frac{2}{N}$ (jo kontūrs l definēts intervālā $[-1;1]$).

Galīgo diferencu shēmu priekš Lagranža reizinātāju raksturojošā vienādojuma (16) iespējams uzrakstīt šādā veidā:

$$b_i \Lambda_i^n - a_i \Lambda_i^n - c_i \Lambda_i^n = f_i, \quad (50)$$

kur $\Lambda_i^n - \Lambda$ vērtība laika solī n režģa punktā i , savukārt koeficientiem a, b, c un f ir spēkā šādas formulas:

$$b_i = 2\zeta + \frac{1}{4}(\vartheta_{i+1}^n - \vartheta_{i-1}^n)^2, \quad \forall i \in [1, N-1]. \quad (51)$$

$$a_i = c_i = \zeta, \quad \forall i \in [1, N-1]. \quad (52)$$

$$\begin{aligned} f_i = & - \left((\vartheta_{i+1}^n - \vartheta_{i-1}^n) \frac{1}{4h^2} (\vartheta_{i+2}^n - 2\vartheta_{i+1}^n + 2\vartheta_{i-1}^n - \vartheta_{i-2}^n + \frac{1}{8}(\vartheta_{i+1}^n - \vartheta_{i-1}^n)^3) \right. \\ & \left. + Cm \cos \omega t \cdot \cos \vartheta_i^n \right) \frac{1}{4} (\vartheta_{i+1}^n - \vartheta_{i-1}^n)^2 - \zeta Cm \cos \omega t \\ & \cdot ((\vartheta_{i+1}^n - \vartheta_i^n)(\sin \vartheta_{i+1}^n + \sin \vartheta_i^n)) \\ & - \frac{1}{2} (\vartheta_i^n - \vartheta_{i-1}^n)(\sin \vartheta_i^n + \sin \vartheta_{i-1}^n), \quad \forall i \in (1, N-1). \quad (53) \end{aligned}$$

Kā redzams, koeficientam f nepieciešamas arī formulas uz apgabala robežām:

$$f_1 = - \left(\frac{(\vartheta_2^n - \vartheta_0^n)}{2h^2} \left((\vartheta_3^n + 3\vartheta_1^n - \vartheta_0^n - 3\vartheta_2^n) + \frac{1}{16} (\vartheta_2^n - \vartheta_0^n)^3 \right) + Cm \cos \omega t \right. \\ \left. \cdot \cos \vartheta_1^n \right) \cdot \frac{1}{4} (\vartheta_2^n - \vartheta_0^n)^2 - \zeta Cm \cos \omega t \\ \cdot ((\vartheta_2^n - \vartheta_1^n)(\sin \vartheta_2^n + \sin \vartheta_1^n)) - \frac{1}{2} (\vartheta_1^n - \vartheta_0^n)(\sin \vartheta_1^n + \sin \vartheta_0^n), \quad (54)$$

$$f_N = - \left(\frac{(\vartheta_{N+1}^n - \vartheta_{N-1}^n)}{2h^2} \left((\vartheta_{N+1}^n + 3\vartheta_{N-1}^n - \vartheta_{N-2}^n - 3\vartheta_N^n) + \frac{1}{16} (\vartheta_{N+1}^n - \vartheta_{N-1}^n)^3 \right) \right. \\ \left. + Cm \cos \omega t \cdot \cos \vartheta_N^n \right) \cdot \frac{1}{4} (\vartheta_{N+1}^n - \vartheta_{N-1}^n)^2 - \zeta Cm \cos \omega t \\ \cdot ((\vartheta_{N+1}^n - \vartheta_{N-1}^n)(\sin \vartheta_{N+1}^n + \sin \vartheta_N^n)) \\ - \frac{1}{2} (\vartheta_N^n - \vartheta_{N-1}^n)(\sin \vartheta_N^n + \sin \vartheta_{N-1}^n). \quad (55)$$

Lai tuvināti atrisinātu vienādojumu (16), tagad pietiek atrisināt lineāru vienādojumu sistēmu, kas definēta ar vienādojumu (50).

Savukārt vienādojumu (15) skaitliski risināt ir nedaudz sarežģītāk, jo tas ir nelineārs. Aizstājot vienādojumā (15) esošos atvasinājumus ar galīgo diferencu formulām, iegūstam nelineāru algebrisku vienādojumu sistēmu, kas vispārīgi pierakstāma šādā formā:

$$G(\overline{\vartheta^{n+1}}) = F. \quad (56)$$

Šādu sistēmu ērti risināt pēc Ņūtona metodes (17). Izmantojot šo metodi, varam pārrakstīt vienādojumu (56) šādā formā:

$$G(\overline{\vartheta^s}) + \frac{\partial G}{\partial \overline{\vartheta}}(\overline{\vartheta^s}) \Delta \overline{\vartheta} = F. \quad (57)$$

Savukārt vienādojums (57) faktiski ir ekvivalents ar šādu izteiksmi:

$$a_i (\Delta \vartheta)_{i-2} - b_i (\Delta \vartheta)_{i-1} + c_i (\Delta \vartheta)_i - d_i (\Delta \vartheta)_{i+1} + e_i (\Delta \vartheta)_{i+2} = f_i. \quad (58)$$

Analoģiski kā iepriekš, nepieciešams uzrakstīt formulas vienādojumā (58) izmantotajiem koeficientiem a , b , c , d , e un f , kas der $\forall i \in (1, N - 1)$:

$$a_i = \frac{\tau}{h^4}, \quad (59)$$

$$e_i = \frac{\tau}{h^4}, \quad (60)$$

$$b_i = \frac{4\tau}{h^4} - Cm \cos \omega t \cdot \frac{\tau}{h^2} \cos \vartheta_{i-1}^s - \frac{3\tau}{2h^4} (\vartheta_i^s - \vartheta_{i-1}^s)^2 - \frac{\tau}{2h^2} (\Lambda_i^n + \Lambda_{i-1}^n) \\ - \frac{\zeta\tau}{4h^2} (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s) - \frac{\zeta\tau}{2h^2} Cm \cos \omega t \cdot (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s) \sin \vartheta_i^s, \quad (61)$$

$$\begin{aligned}
c_i &= 1 + \frac{6\tau}{h^4} - \frac{2\tau}{h^2} Cm \cos \omega t \cos \vartheta_i^s - \frac{3\tau}{2h^4} ((\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_i^s)^2 + (\vartheta_i^s - \vartheta_{i-1}^s)^2) \\
&\quad - \frac{\tau}{2h^2} (\Lambda_{i+1}^n - 2\Lambda_i^n + \Lambda_{i-1}^n) \\
&\quad - \frac{\zeta\tau}{4h^2} Cm \cos \omega t \cdot (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s)^2 \cos \vartheta_i^s, \tag{62}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_i &= \frac{4\tau}{h^4} - \frac{\tau}{h^2} \cos \vartheta_{i+1}^s - \frac{3\tau}{2h^4} (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_i^s)^2 - \frac{\tau}{2h^2} (\Lambda_{i+1}^n + \Lambda_i^n) - \frac{\zeta\tau}{4h^2} (\Lambda_{i+1}^n + \Lambda_{i-1}^n) \\
&\quad + \frac{\zeta\tau}{2h^2} Cm \cos \omega t \cdot (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s) \sin \vartheta_i^s, \tag{63}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_i &= \vartheta_i^n - \left(\vartheta_i^n + \frac{\tau}{2h^2} Cm \cos \omega t \right. \\
&\quad \cdot \left(\sin \vartheta_{i+1}^s - 2 \sin \vartheta_i^s + \sin \vartheta_{i-1}^s \right) + \frac{\tau}{h^4} (\vartheta_{i+2}^s - 4\vartheta_{i+1}^s + \vartheta_{i-2}^s - 4\vartheta_{i-1}^s \\
&\quad \left. + 6\vartheta_i^s \right) + \frac{\tau}{2h^4} ((\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_i^s)^3 - (\vartheta_i^s - \vartheta_{i-1}^s)^3) \\
&\quad - \frac{\tau}{2h^2} ((\Lambda_{i+1}^n + \Lambda_i^n)(\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_i^s) - (\Lambda_i^n + \Lambda_{i-1}^n)(\vartheta_i^s - \vartheta_{i-1}^s)) \\
&\quad - \frac{\zeta\tau}{4h^2} (\Lambda_{i+1}^n + \Lambda_{i-1}^n)(\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s) \\
&\quad \left. + \frac{\zeta\tau}{4h^2} Cm \cos \omega t \cdot (\vartheta_{i+1}^s - \vartheta_{i-1}^s)^2 \sin \vartheta_i^s. \tag{64}
\end{aligned}$$

Savukārt uz apgabalu robežām ir spēkā šādas koeficientu formulas:

$$f_0 = -(3\vartheta_0^s + \vartheta_2^s - 4\vartheta_1^s), \tag{65}$$

$$c_0 = 3, \tag{66}$$

$$d_0 = 4, \tag{67}$$

$$e_0 = 1, \tag{68}$$

$$a_1 = 0, \tag{69}$$

$$b_1 = \frac{1}{h^2} + Cm \cos \omega t \cos \vartheta_0^s, \tag{70}$$

$$c_1 = \frac{2}{h^2}, \tag{71}$$

$$d_1 = \frac{1}{h^2}, \tag{72}$$

$$e_1 = 0, \tag{73}$$

$$f_1 = \frac{1}{h^2} (\vartheta_2^s + \vartheta_0^s - 2\vartheta_1^s) + Cm \cos \omega t \sin \vartheta_0^s, \tag{74}$$

$$a_N = 1, \tag{75}$$

$$b_N = 4, \tag{76}$$

$$c_N = 3, \tag{77}$$

$$f_N = -(3\vartheta_N^s + \vartheta_{N-2}^s - 4\vartheta_{N-1}^s), \tag{78}$$

$$f_{N-1} = Cm \cos \omega t \sin \vartheta_N^s + \frac{1}{h^2} (\vartheta_{N-2}^s + \vartheta_N^s - 2\vartheta_{N-1}^s), \tag{79}$$

$$c_{N-1} = \frac{2}{h^2}, \tag{80}$$

$$b_{N-1} = \frac{1}{h^2}, \quad (81)$$

$$d_{N-1} = \frac{1}{h^2} + Cm \cos \omega t \cos \vartheta_N^s, \quad (82)$$

$$a_{N-1} = 0, \quad (83)$$

$$e_{N-1} = 0. \quad (84)$$

2. pielikums. MATLAB programmas kods.

```
function filament(Cm,w, N, T, tau, threshold)

close all
format long
tElapsed=0;
Lmin = -1;
Lmax = 1;
time_avg(1) = 0;
xc = 0;
yc = 0;
friction = 2; %anizotropijas reizinaataajs
h = 2/N; %solis telpaa
time_passed(1) = 0;
dxdt = 0;
dydt = 0;
xc_trapz = 0;
yc_trapz = 0;
dxdt_trapz = 0;
dydt_trapz = 0;
dxdtavg_trapz = 0;
dydtavg_trapz = 0;
teta_new = zeros(N+1,1);
teta_old = zeros(N+1,1);
lambda = zeros(N+1,1);
hf = figure('visible', 'off','OuterPosition',[1 1 1440 900],'Position',[1 1
1440 900]);
hax = get(gca);
x = Lmin:h:Lmax;
delta_teta = zeros(N+1);
TolIter = 10^(-5);
IterMax = 10^6;
teta_temp = zeros(N+1,1);
teta = zeros(N+1,2);
filename=['T',num2str(T),'_N',num2str(N),'_Cm',num2str(Cm),'_w',num2str(w),
...
'_tau',num2str(tau),'_thr',num2str(threshold),'_Tol',num2str(TolIter)];
fid1 = fopen([filename,'.txt'],'w');
fid2 = fopen([filename,'_dxdt.txt'],'w');
fid3 = fopen([filename,'_dydt.txt'],'w');
aviobj = avifile([filename,'.avi'],'fps', 10, 'compression', 'RLE');
l0 = -1;
l = Lmin : h : Lmax;
teta_new = (0.01 * sin(pi*l/2))';
dxdtavg = 0;
dydtavg = 0;
teta_temp = teta_new;
xmax = 1;
xmin = -1;
ymax = 1;
ymin = -1;
teta(:,1) = teta_new;

% equation solving
tic;
%apreekjinu saakums!
for n=1:T;
t = n*tau;
teta_old = teta_new;
%LAMBDA
L = zeros(N+1,N+1);
```

```

a = zeros(N+1,1);
b = zeros(N+1,1);
c = zeros(N+1,1);
f = zeros(N+1,1);
for i = 3:N-1;
a(i) = friction;
b(i) = 2*friction+1/4*((teta_old(i+1)-teta_old(i-1))^2);
c(i) = friction;
f(i) = -((teta_old(i+1)-teta_old(i-1))*(teta_old(i+2)-
2*teta_old(i+1)+2*teta_old(i-1)-teta_old(i-2))+...
(teta_old(i+1)-teta_old(i-1))^3/8)/4/(h^2)+...
Cm*cos(w*t)*cos(teta_old(i))*(teta_old(i+1)-teta_old(i-
1))^2/4)-...
friction*Cm*cos(w*t)*((teta_old(i+1)-
teta_old(i))*(sin(teta_old(i+1))+sin(teta_old(i)))-...
(teta_old(i)-teta_old(i-1))*(sin(teta_old(i))+sin(teta_old(i-
1)))))/2;
end;
a(2) = friction;
b(2) = 2*friction+(teta_old(3)-teta_old(1))^2/4;
c(2) = friction;
f(2) = -((teta_old(3)-teta_old(1))*(teta_old(4)+3*teta_old(2)-teta_old(1)-
3*teta_old(3))+...
(teta_old(3)-teta_old(1))^3/16)/2/h^2+...
Cm*cos(w*t)*cos(teta_old(2))*(teta_old(3)-teta_old(1))^2/4)-...
friction*Cm*cos(w*t)*((teta_old(3)-
teta_old(2))*(sin(teta_old(3))+sin(teta_old(2)))-...
(teta_old(2)-
teta_old(1))*(sin(teta_old(2))+sin(teta_old(1)))))/2;
a(N) = friction;
c(N) = friction;
b(N) = 2*friction+(teta_old(N+1)-teta_old(N-1))^2/4;
f(N) = -((teta_old(N+1)-teta_old(N-1))*(teta_old(N+1)+3*teta_old(N-1)-
3*teta_old(N)-teta_old(N-2))+...
(teta_old(N+1)-teta_old(N-1))^3/16)/2/h^2+...
Cm*cos(w*t)*cos(teta_old(N))*(teta_old(N+1)-teta_old(N-
1))^2/4)-...
friction*Cm*cos(w*t)*((teta_old(N+1)-
teta_old(N))*(sin(teta_old(N+1))+sin(teta_old(N)))-...
(teta_old(N)-teta_old(N-1))*(sin(teta_old(N))+sin(teta_old(N-
1)))))/2;
for i=2:N
L(i,i-1)=-a(i);
L(i,i)=b(i);
L(i,i+1)=-c(i);
end
L(1,1)=1;
f(1) = 0;
L(N+1,N+1)=1;
f(N+1) = 0;
L = sparse(L);
lambda =L\f;
%TETA
%sheit saakas iteraacijas prieksh teta
for s=1:IterMax
G = zeros(N+1,N+1);
a = zeros(N+1,1);
b = zeros(N+1,1);
e = zeros(N+1,1);
c = zeros(N+1,1);
d = zeros(N+1,1);
f = zeros(N+1,1);
for i=3:N-1
a(i) = tau/(h^4);

```

```

e(i) = tau/(h^4);
b(i) = 4*tau/h^4 - Cm*cos(w*t)*tau*cos(teta_temp(i-1))/h^2-...
      3*tau/h^4/2*(teta_temp(i)-teta_temp(i-1))^2-...
      tau*(lambda(i)+lambda(i-1))/2/h^2+friction*tau*(lambda(i+1)-lambda(i-
1))/4/h^2-...
      friction*Cm*cos(w*t)*tau*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i-
1))*sin(teta_temp(i))/2/h^2;
c(i) = 1+6*tau/h^4-2*Cm*cos(w*t)*tau*cos(teta_temp(i))/h^2-...
      3*tau/2/h^4*((teta_temp(i+1)-teta_temp(i))^2+(teta_temp(i)-teta_temp(i-
1))^2)-...
      tau*(lambda(i+1)+2*lambda(i)+lambda(i-1))/2/h^2-...
      friction*Cm*cos(w*t)*tau/4/h^2*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i-
1))^2*cos(teta_temp(i));
d(i) = 4*tau/h^4-Cm*cos(w*t)*tau*cos(teta_temp(i+1))/h^2-...
      3*tau/h^4/2*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i))^2-...
      tau*(lambda(i+1)+lambda(i))/2/h^2-friction*tau*(lambda(i+1)-lambda(i-
1))/4/h^2+...
      friction*Cm*cos(w*t)*tau/2/h^2*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i-
1))*sin(teta_temp(i));
f(i) = teta_old(i)-...
      (teta_temp(i)+Cm*cos(w*t)*tau*(sin(teta_temp(i+1))+...
      sin(teta_temp(i-1))-2*sin(teta_temp(i)))/h^2+...
      tau*(teta_temp(i+2)-4*teta_temp(i+1)+teta_temp(i-2)-4*teta_temp(i-
1)+6*teta_temp(i))/h^4+...
      tau/2/h^4*((teta_temp(i+1)-teta_temp(i))^3-(teta_temp(i)-teta_temp(i-
1))^3))-...
      tau*((lambda(i+1)+lambda(i))*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i))-
(lambda(i)+lambda(i-1))*(teta_temp(i)-...
      teta_temp(i-1)))/2/h^2-...
      friction*tau*(lambda(i+1)-lambda(i-1))*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i-
1))/4/h^2+...
      Cm*friction*cos(w*t)*tau/4/h^2*(teta_temp(i+1)-teta_temp(i-
1))^2*sin(teta_temp(i));
end
f(1) = -(3*teta_temp(1)+teta_temp(3)-4*teta_temp(2));
c(1) = 3;
d(1) = 4;
e(1) = 1;
a(2) = 0;
b(2) = 1/h^2+Cm*cos(w*t)*cos(teta_temp(1));
c(2) = 2/h^2;
d(2) = 1/h^2;
e(2) = 0;
f(2) = (teta_temp(3)+teta_temp(1)-
2*teta_temp(2))/h^2+Cm*cos(w*t)*sin(teta_temp(1));
a(N+1) = 1;
b(N+1) = 4;
c(N+1) = 3;
f(N+1) = -(3*teta_temp(N+1)+teta_temp(N-1)-4*teta_temp(N));
f(N) = Cm*cos(w*t)*sin(teta_temp(N+1))+...
      (teta_temp(N-1)+teta_temp(N+1)-2*teta_temp(N))/h^2;
c(N) = 2/h^2;
b(N) = 1/h^2;
d(N) = 1/h^2+Cm*cos(w*t)*cos(teta_temp(N+1));
a(N) = 0;
e(N) = 0;
for i=3:N-1
G(i,i-2)=a(i);
G(i,i-1)=-b(i);
G(i,i)=c(i);
G(i,i+1)=-d(i);
G(i,i+2)=e(i);
end
G(1,1) = c(1);

```

```

G(1,2) = -d(1);
G(1,3) = e(1);
G(2,1) = -b(2);
G(2,2) = c(2);
G(2,3) = -d(2);
G(2,4) = e(2);
G(N,N-2) = a(N);
G(N,N-1) = -b(N);
G(N,N) = c(N);
G(N,N+1) = -d(N);
G(N+1,N-1) = a(N+1);
G(N+1,N) = -b(N+1);
G(N+1,N+1) = c(N+1);
G = sparse(G);
y = G\f;
delta_teta = y';
if (isequal(isfinite(y),ones(size(y)))~=1)
    uiwait;
end
if (max(abs(delta_teta))<TolIter)
    teta_new = teta_temp;
    %aatruma noteikshana
    konturs = Lmin:h:Lmax;
    arg = 1:1:N+1;
% aatruma apreekjins ar splainu interpolaaciju un trapechu metodi
ppteta=csapi(konturs,teta_new);
ppcurvature=fnder(ppteta); %liekums
X3 = fnval(ppcurvature,konturs);
X0 = -Cm*cos(w*t)*((cos(teta_new(N+1)))^2-(cos(teta_new(1)))^2);
X1 = lambda + Cm*cos(w*t)*cos(teta_new);
X2 = sin(teta_new);
Xtrapz_temp = X1 .* X2 .* X3';
Xtrapz_pp = csapi(x,Xtrapz_temp);
Xtrapz = diff(fnval(fnint(Xtrapz_pp),[Lmin Lmax]));
dxdt = 1/2*((friction-1)*(X0-Xtrapz));
Y0 = -Cm*cos(w*t)*(cos(teta_new(N+1))*sin(teta_new(N+1))-...
    cos(teta_new(1))*sin(teta_new(1)));
Y1 = X1;
Y2 = cos(teta_new);
Y3 = X3;
Ytrapz_temp = Y1 .* Y2 .* Y3';
Ytrapz_pp = csapi(x,Ytrapz_temp);
Ytrapz = diff(fnval(fnint(Ytrapz_pp),[Lmin Lmax]));
dydt = 1/2*(friction-1)*(Y0 + Ytrapz);
disp(['n = ', num2str(n), '          s = ', num2str(s), '          ',
num2str(n/T*100), '% done']);
Xtrapz_trapz = h/2*(Xtrapz_temp(1) +
Xtrapz_temp(N+1))+sum(Xtrapz_temp)*h;
Ytrapz_trapz = h/2*(Ytrapz_temp(1) +
Ytrapz_temp(N+1))+sum(Ytrapz_temp)*h;
dxdt_trapz = 1/2 * ((friction-1)*(X0-Xtrapz_trapz));
dydt_trapz = 1/2 * ((friction-1)*(Y0+Ytrapz_trapz));
break
else
for z=1:N+1
    teta_temp(z)=teta_temp(z)+(delta_teta(z));
end
end
end %beigas ciklam pa s
if (max(teta)==0) teta(:,1) = teta_new; end
ppteta=csapi(x,teta_new);
tetacos = cos(teta_new);
tetasin = sin(teta_new);
ppcos=csapi(x,tetacos);

```

```

ppsin=csapi(x,tetasin);
ppcurvature=fnder(ppteta); %liekums
curvature(n) = max((fnval(ppcurvature,x)));
xcoord = fnint(ppcos);
ycoord = fnint(ppsin);
dydx = fnder(ycoord);
for i=1:N+1
    xcoord_trapz(i) = i*h*(tetacos(1)+tetacos(N+1))/2;
    ycoord_trapz(i) = i*h*(tetasin(1)+tetasin(N+1))/2;
end
%masas centra aprekins
tmp = fnval(xcoord,x);
tmp_s = size(min(tmp):(max(tmp)-min(tmp))/N:max(tmp));
if (tmp_s(2) == 300)
    temp = min(tmp):(max(tmp)-min(tmp))/(N+1/2):max(tmp);
else
    temp = min(tmp):(max(tmp)-min(tmp))/N:max(tmp);
end
centerofmass_x = 1/2 * diff(fnval(fnint(xcoord),[Lmin Lmax]));
centerofmass_y = 1/2 * diff(fnval(fnint(ycoord),[Lmin Lmax]));
xc = xc + tau*dxdt;
yc = yc + tau*dydt;
xc_coord = fnval(xcoord,x) - centerofmass_x + xc;
yc_coord = fnval(ycoord,x) - centerofmass_y + yc;
dxdtavg = dxdtavg + dxdt;
dydtavg = dydtavg + dydt;
centerofmass_x_trapz = (xcoord_trapz(1) + xcoord_trapz(N+1)) * 2;
centerofmass_y_trapz = (ycoord_trapz(1) + ycoord_trapz(N+1)) * 2;
xc_trapz = xc_trapz + tau*dxdt_trapz;
yc_trapz = yc_trapz + tau*dydt_trapz;
dxdtavg_trapz = dxdtavg_trapz + dxdt_trapz;
dydtavg_trapz = dydtavg_trapz + dydt_trapz;
if (mod(n,threshold) == 0)
    teta(:,2) = teta_new;
    dlmwrite([filename, '.txt'],teta(:,1), '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '.txt'],teta(:,2), '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_dxdt.txt'],dxdtavg/threshold, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_dydt.txt'],dydtavg/threshold, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_xc.txt'],xc, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_yc.txt'],yc, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_dxdt_trapz.txt'],dxdtavg_trapz/threshold, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_dydt_trapz.txt'],dydtavg_trapz/threshold, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_xc_trapz.txt'],xc_trapz, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dlmwrite([filename, '_yc_trapz.txt'],yc_trapz, '-
append', 'precision',16, 'newline', 'pc');
    dxdtavg = 0;
    dydtavg = 0;
    dxdtavg_trapz = 0;
    dydtavg_trapz = 0;
    teta = zeros(N+1,2);
    plot(xc_coord,yc_coord)
    if (max(xc_coord)+5*tau*abs(dxdt)>xmax)
        xmax=xmax+1/2;
        xmin=xmin+1/2;
    end
end

```

```

if (min(xc_coord)-5*tau*abs(dxdt)<xmin)
    xmin=xmin-1/2;
    xmax=xmax-1/2;
end
if (max(yc_coord)+5*tau*abs(dydt)>ymin)
    ymax=ymax+1/2;
    ymin=ymin+1/2;
end
if (min(yc_coord)-5*tau*abs(dydt)<ymin)
    ymin=ymin-1/2;
    ymax=ymax-1/2;
end
axis([xmin xmax ymin ymax])
title(['dimensionless time t = ', num2str(n*tau)]);
print(hf, '-dbmp256', 'temp.jpg');
[temp color] = imread('temp.jpg');
aviobj = addframe(aviobj, im2frame(temp, color));
end
end %beigas ciklam pa n
aviobj = close(aviobj);
close(hf);
fclose('all');
tElapsed = toc
dlmwrite([filename, '_time.txt'], tElapsed, '-
append', 'precision', 16, 'newline', 'pc');
fclose('all');
clear all
close all
end

```

3. pielikums. Mathematica programmas kods.

Šajā pielikumā sniegts pilns izejas kods *Mathematica* vidē izstrādātajai programmai 2. nodaļā iegūtā konstantā lauka robežgadījuma analītiskā atrisinājuma leņķa θ vērtību skaitliskam aprēķinam pie uzdotām parametra C_m un telpas punktu skaita N intervāla vērtībām.

```
(*
Šī programma ģenerē filamenta stacionārās formas analītiskos atrisinājumus
leņķim  $\theta$ , kad filaments atrodas konstantā laukā ( $w=0$ ).
 $C_m = \text{const}$ .  $N$  mainās no  $n_{\min}$  līdz  $n_{\max}$  ar soli  $n_{\text{step}}$ .
 $\theta$  vērtības tiek saglabātas teksta failos. Tiek zīmēti arī grafiki
funkcijai  $\theta(l)$ .
Visi faili tiek saglabāti .m faila direktoriņā.
*)
ClearAll[cmstart, cmend, i, n, h]
cm = 100;
nmin = 2000;
nmax = 3000;
nstep = 250;
For[i = nmin, i <= nmax, i = i + nstep,
  ClearAll[x, xtemp, y,  $\theta$ , l,  $\theta_{\text{val}}$ , filename, outputdata];
  n = i;
  h = 2/n;
  xtemp = FindRoot[EllipticK[x] == Sqrt[cm], {x, 0.9}, AccuracyGoal ->
Infinity, PrecisionGoal -> 250, MaxIterations -> 10000, WorkingPrecision ->
500];
  y = Re[x /. Part[xtemp, 1]];
   $\theta[l\_]$  := Piecewise[{{2*ArcSin[Sqrt[y]*JacobiSN[EllipticK[y] + Sqrt[cm]*(1
- l), y]], l <= 0}, {2*ArcSin[Sqrt[y]*JacobiSN[EllipticK[y] + Sqrt[cm]*(1 -
1), y]], l > 0}}];
   $\theta_{\text{val}}$  = Table[N[ $\theta[l]$ , 16], {l, -1, 1, h}];
  filename = StringJoin["analytic_Cm", ToString[cm], "_N", ToString[n]];
  outputdata = Close[OpenWrite[StringJoin[NotebookDirectory[], filename,
".txt"]]];
  outputplot = Close[OpenWrite[StringJoin[NotebookDirectory[], filename,
".jpg"]]];
  Export[outputdata,  $\theta_{\text{val}}$ , "List"]; Export[outputplot, Plot[ $\theta[l]$ , {l, -1,
1}, PlotRange -> All, PlotPoints -> n, ImageSize -> 1000, WorkingPrecision
-> 16, AxesLabel -> {Style[l, Large, Bold, Italic], Style[ $\theta$ , Large, Bold,
Italic]}, AxesStyle -> Arrowheads[{-0.02, 0.02}], LabelStyle ->
Directive[Bold], PlotStyle -> Thick]];
  ];
ClearAll[cmstart, cmend,  $\theta$ , outputplot, outputdata, filename,  $\theta_{\text{val}}$ , y,
xtemp, l, cm, n, h];
```

Izmantotā literatūra

1. **Kay, E., Leigh, D., Zerbetto, F.** Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, 1-2, vol. 46, p.72-191
2. **Biswal, S., Gast, A.** Mechanics of semiflexible chains formed by poly(ethylene glycol)-linked paramagnetic particles. *Phys. Rev. E*, 2003, 2, vol. 68, 021402
3. **Cebers, A.** Flexible magnetic filaments in a shear flow. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2006, 1, vol. 300, p.67-70
4. **Goubault, C., Jop, P., Fermigier, M., Baudry, J., Bertrand, E., Bibette, J.** Flexible Magnetic Filaments as Micromechanical Sensors. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 26, vol. 91, 260802
5. **Cebers, A.** Flexible magnetic filaments. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 2005, 3-4, vol. 10, p.167-175
6. **Dreyfus, R., Baudry, J., Roper, M., Fermigier, M., Stone, H., Bibette, J.** Microscopic artificial swimmers. *Nature*, 2005, vol. 437, p.862-865
7. **Cebers, A.** Flexible magnetic swimmer. *Magneto hydrodynamics*, 2005, 1, vol. 41, p.63-72
8. **Scheffel, A., Gruska, M., Faivre, D., Linaroudis, A., Plitzko, J., Schuler, D.** An acidic protein aligns magnetosomes along a filamentous structure in magnetotactic bacteria. *Nature*, 2006, 440, p.110-114
9. **Cebers, A.** Dynamics of a chain of magnetic particles connected with elastic linkers. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2003, vol. 15, p.1335-1344
10. **Belovs, M., Cebers, A.** Ferromagnetic microswimmer. *Phys. Rev. E*, 2009, vol. 79, 051503
11. **Landau, L., Lifshitz, E.** *Theory of Elasticity, Third edition.* Butterworth-Heinemann, 1986.
12. **Cīrulis, T., Neimanis, V.** *Diferenciālģeometrija.* Rīga: P. Stučkas Latvijas Valsts Universitāte, 1983.
13. **Belovs, M., Cebers, A.** Nonlinear dynamics of semiflexible magnetic filaments in an ac magnetic field. *Phys. Rev. E*, 2006, vol. 73, 051503
14. **Зельдович, Я., Мышкис, А.** *Элементы прикладной математики, второе изд.,* Москва: Издательство "Наука", 1967.

15. **Abramowitz, M., Stegun, I.** *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover Publications, 1964.
16. **Ames, W.** *Numerical Methods for Partial Differential Equations, Second Edition*. London: Academic Press, Inc., 1977.
17. **Press, W., Flannery, B., Teukolsky, S., Vetterling, W.** *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Second Edition*. Cambridge University Press, 1992.
18. **Strogatz, S.** *Nonlinear Dynamics And Chaos: With Applications To Physics, Biology, Chemistry, And Engineering*. Westview Press, 2001.
19. **Ērglis, K., Belovs, M., Cēbers, A.** Flexible ferromagnetic filaments and the interface with biology. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2009, 321, p.650-654
20. **Hallatschek, O., Frey, E., Kroy, K.** Propagation and Relaxation of Tension in Stiff Polymers. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 94, 077804

Bakalaura darbs

„Feromagnētisku mikropeldētāju pārvietošanās mehānisms un tā skaitliskā modelēšana”

Izstrādāts Latvijas Universitātes Fizikas un Matemātikas fakultātes Teorētiskās fizikas katedrā.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pētījums veikts patstāvīgi, izmantoti tikai tajā norādītie informācijas avoti un iesniegtā darba elektroniskā kopija atbilst izdrukai.

Autors: Rūdolfs Livanovičs

Rekomendēju darbu aizstāvēšanai

Darba vadītājs: profesors Dr. habil. phys. Andrejs Cēbers

Recenzents: asociētais profesors Dr. phys. Andris Jakovičs

Darbs iesniegts fizikas nodaļā 2009. gada „.....”. jūnijā

Bakalaura pārbaudījumu komisijas sekretārs: docents Valdis Rēvalds

Darbs aizstāvēts bakalaura gala pārbaudījuma komisijas sēdē

2009. gada „.....”. jūnijā ar atzīmi

Protokola Nr.

Bakalaura pārbaudījumu komisijas sekretārs: docents Valdis Rēvalds