

非線形共役勾配法を用いた永久磁石の マイクロマグネティクスシミュレーションの高速化

田中智大、古屋篤史、上原裕二、清水香壺、藤崎淳、安宅正、大島弘敬*、
Norbert Požár**、小俣正朗**

(富士通株式会社、*株式会社富士通研究所、**金沢大学)

The Nonlinear Conjugate Gradient Method: An Energy Minimization Algorithm for the Speedup of Micromagnetic Simulation of the Permanent Magnets

T. Tanaka, A. Furuya, Y. Uehara, K. Shimizu, J. Fujisaki, T. Ataka, H. Oshima*, N. Požár**, S. Omata**
(Fujitsu Limited, *Fujitsu Laboratories Limited, **Kanazawa Univ.,)

はじめに

マイクロマグネティクスシミュレーションでは LLG 方程式を時間発展に従って解く手法 (以下、陽解法と呼ぶ) が一般的であるが、エネルギー最小化手法の一つである最急降下法を用いて高速に磁化反転過程を計算する手法が報告されている[1]。今回我々は、最急降下法より効率的なエネルギー最小化手法とされている非線形共役勾配法を用いて陽解法との計算速度及び計算精度の比較を行った。発表では永久磁石の磁化反転過程のシミュレーションを例に、非線形共役勾配法と陽解法それぞれにおける計算速度と計算精度についての比較を報告する。

計算方法

系の全エネルギーは異方性エネルギー、静磁界エネルギー、交換結合エネルギー、ゼーマンエネルギーからなる。非線形共役勾配法では、各ステップにおいて有効磁界による各磁化の勾配方向 \mathbf{g}^{now} に、以下の式で表される補正を加えて探索方向 \mathbf{d}^{now} を得る。

$$\mathbf{d}^{now} = P(-\mathbf{g}^{now} + \beta \mathbf{d}^{old})$$

ここで β は前のステップでの勾配方向等により決まるパラメータ、 \mathbf{d}^{old} は前のステップで使用した探索方向、 P は磁化ベクトルの法線方向への射影演算子である。 \mathbf{d}^{now} に沿って磁化を動かしてエネルギーの最小化を繰り返すことにより、補正がない場合に比べて少ない反復回数での収束が可能になる。本計算では、外部磁界を変化させ、各外部磁界ごとにエネルギー最小化を行い定常状態を求めることで磁化反転過程を計算した。計算に使用したモデルは一辺 34nm の $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の多結晶構造であり、メッシュサイズは 1nm^3 である (Fig.1)。青色の部分は $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒であり、黄色の部分は粒界層である。粒界層は軟磁性とした。

結果

Table 1 に非線形共役勾配法と陽解法での計算結果の比較を示す。保磁力は両手法で同じ値が得られている。さらに、非線形共役勾配法を使用した場合は陽解法に比べて高速になることがわかる (約 24 倍)。以上のことからマイクロマグネティクスシミュレーションにおいて非線形共役勾配法の優位性が確認された。

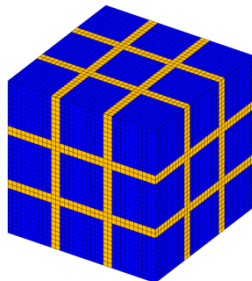


Fig.1: The structure of multi-grain permanent magnets.

Method	Coercivity [A/m]	#Evaluations	CPU-time [sec]
LLG	4.11×10^6	148344	40699
Present	4.11×10^6	3375	1647

Table 1: The comparisons between solving the LLG equation explicitly and the present nonlinear conjugate gradient method are shown. #Evaluation represents the number of evaluations of the magnetostatic potential.

参考文献

- 1) Exl, Lukas, et al. *Journal of Applied Physics* 115.17 (2014): 17D118.