

マイクロマグネティックシミュレーションへの 階層化行列法の適用

Application of the hierarchical-matrices to micromagnetic simulations

安宅正¹⁾, 田中智大²⁾

Tadashi Ataka and Tomohiro Tanaka.

1) エフステクノロジーズ株式会社 (〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町1-5 JR川崎タワー, E-mail: ataka.tadashi@fujitsu.com)

2) エフステクノロジーズ株式会社 (〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町1-5 JR川崎タワー, E-mail: tanaka-tomohiro@fujitsu.com)

The numerical experiments of applying the hierarchical-matrices to micromagnetic simulations is reported. The dense matrix that appears in the integral calculation of the magnetostatic field is compressed. Reducing memory usage and speeding up calculations are confirmed.

Key Words : Micromagnetics, Micromagnetic simulation, Hierarchical matrices

1. はじめに

周囲の微弱な磁場を検出可能な磁気センサーはドアの開閉やデバイスの方位検知など様々な用途に利用されており、中でも磁気抵抗効果を応用したMRセンサーは非常に高い感度を持ち、その分解性能の高さから脳磁場の測定や紙幣の読み取りなどに利用されている。近年注目を集めているトンネル磁気抵抗効果を応用したTMRセンサーは直径数十ナノメートル～数百ナノメートル程度の多層構造を有する磁気抵抗効果素子から構成されており、素子内の複雑な磁化状態によって周囲の磁場を高精度に検知することが可能である一方、ナノメートルスケールでの現象を実験的に観測することは難しく、マイクロマグネティックスを用いたシミュレーションが期待される。そのため我々はマイクロマグネティックシミュレーションの研究開発を行っている[1]。マイクロマグネティックシミュレーションでは磁化の遠距離相互作用を考慮するために磁性体の周りを空気メッシュで包むことが必要とされるケースがしばしばあるが、形状が複雑になると空気メッシュの作成に非常に時間がかかることが多い。シミュレーションを開始するまでのリードタイムが長くなることが問題視されている。別の方法として、境界要素法と組み合わせ空気メッシュを作成せずに計算する手法[2]も提案されているが、こちらは磁性体表面の積分方程式を解くことから、自由度の二乗のメモリを必要としていることが課題とされる。我々は後者の空気メッシュを作らない境界要素法に対して階層化行列法を適用することで使用メモリや計算時間を削減し、適用範囲の拡大を検討した。本稿ではその効果を具体的な計算事例と共に報告する。

2. 計算手法

(1) 支配方程式

マイクロマグネティックスはナノメートルからサブマイクロメートル程度の非常に微細な領域の磁気的な振る舞いを連続体として取り扱う学術分野であり、以下に示すLandau–Lifshitz–Gilbert方程式(LLG方程式)で記述される[3]。

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} + \alpha \mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{m} , \mathbf{H}_{eff} , γ , α はそれぞれ規格化磁化ベクトル、有効磁界ベクトル、ジャイロ磁気定数、ダンピング定数である。有効磁界は以下の様に、磁気エネルギーの変分から導かれる。

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{1}{M_s} \frac{\delta E_{total}}{\delta \mathbf{m}} \quad (2)$$

$$E_{total} = \int_{dV} E_{ani} + E_{exc} + E_{ext} + E_{sta} \quad (3)$$

$$E_{ani} = K_1 \{1 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{m})^2\} + K_2 \{1 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{m})^2\}^2 \quad (4)$$

$$E_{exc} = A(\nabla \mathbf{m})^2 \quad (5)$$

$$E_{ext} = -M_s(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{ext}) \quad (6)$$

$$E_{sta} = -\frac{M_s}{2}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{sta}) \quad (7)$$

$$\mathbf{H}_{sta} = -\nabla U \quad (8)$$

$$\Delta U = \nabla \cdot (M_s \mathbf{m}) \quad (9)$$

ここで、 $M_s, K_1, \mathbf{k}, K_2, A, \mathbf{H}_{ext}, U$ はそれぞれ飽和磁化、一次の結晶磁気異方性定数、磁化容易軸の単位ベクトル、二次の結晶磁気異方性定数、交換結合係数、外部磁界、静磁ポテンシャルである。磁性体の形状が複雑で空気メッシュの作成が困難な場合、図-1の様に、計算領域を磁性体の内部領域 R_m と外部領域 R_e で分け、外部領域のメッシュを作らずに境界 ∂R (外向き単位法線ベクトルを \mathbf{n} とする)におけるポテンシャルを境界要素法により求めるハイブリッド手法(FEBI法)が提案されている[2]。

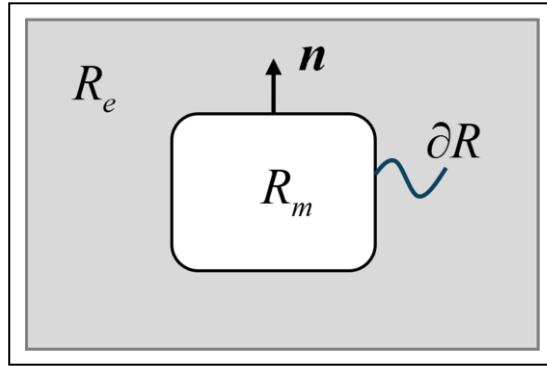


図-1 解析空間

$$\{x | x \in R_m\} \nabla^2 \phi_1(x) = \nabla \cdot \mathbf{m}(x) \quad (10)$$

$$\{x | x \in \partial R\} (\nabla \cdot \mathbf{n}(x)) \phi_1(x) = \mathbf{n}(x) \cdot \mathbf{m}(x) \quad (11)$$

$$\{x | x \in \partial R\} \phi_2(x) = \int_{\partial \Omega} \phi_1(x') \nabla \left(\frac{1}{|x - x'|} \right) dS \quad (12)$$

$$\{x | x \in R_m\} \nabla^2 \phi_2(x) = 0 \quad (13)$$

$$\{x | x \in R_m\} \mathbf{H}_{sta} = -\nabla(\phi_1(x) + \phi_2(x)) \quad (14)$$

(12)式において、磁性体表面の積分計算は表面自由度の密行列ベクトル積で表現できるが、薄膜のような表面積が大きいモデルではメモリ使用量が膨大になる。

(2) 境界要素法の高速化と階層化行列法

静磁ポテンシャルの計算に現れる式(12)式の積分は多重極展開等の手法を採用することで高速化し、使用メモリを削減できることが期待される。階層化行列法は多重極展開などが適用できる積分の密行列表現に対する近似手法で、本研究ではマイクロマグネティックシミュレーションに対して階層化行列法の適用を行った(FEBI-H法)。行列を階層化するプログラムはオープンソースソフトウェア(OSS)として公開されているHACApKライブラリ[4]を利用した。

3. 計算結果

この章では階層化行列法を適用したマイクロマグネティックシミュレーション結果を報告する。

(1) NIST標準問題

MRセンサーの材料としては軟磁性薄膜が良く使われており、1つめの検証モデルにはNational Institute of Standards and Technologyより公開されている標準問題[5]のNo.4を採用した。詳細を図-2に示す。

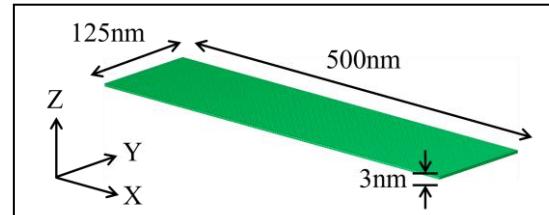


図-2 計算モデル

今回500nm x 125nm x 3nmの直方体をメッシュサイズ2.5nmで分割し(Z方向は分割無し)、1万個の六面体メッシュを作成した。飽和磁化1.0048[T]、異方性0[K/J³]、交換結合係数13[pJ/m]に設定し、初期状態(1,1,1)方向からの安定状態を求める。この問題の収束解は静磁相互作用に大きく影響されるもので、飽和磁化が大きいため膜厚方向(Z方向)の反磁界の影響により磁化は面内方向に安定化する。また、同じくモデルの端部では反磁界の影響で磁化は形状に対して平行方向に揃いやすくなり、結果としてS字構造が安定状態となることが知られている。FEBI法とFEBI-H法での計算結果を図-3に示す。磁化の面内成分を飽和磁化で規格化したセンター図となっており、(a), (b), (c)がそれぞれFEBI法のX, Y, Z方向成分で、(d), (e), (f)がそれぞれFEBI-H法のX, Y, Z方向成分である。(b)に磁化の方向を黒塗で記載している。

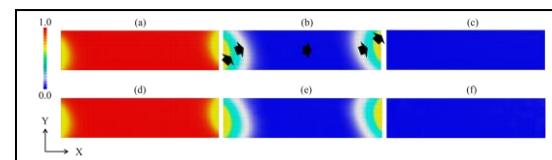


図-3 収束計算結果

FEBI-H法の結果はS字構造をよく再現しており、FEBI法の結果とも一致することから、階層化行列法による静磁界近似を適用した場合も磁化の安定状態を十分計算可能と言える。表-1に各々の使用メモリ量を記す。Peak列にシミュレーション全体でのピーク使用メモリ量、Matrix列に(12)式の計算に必要な係数行列のメモリを記載している。

表-1 FEBI法とFEBI-H法の使用メモリ量

Method	Peak	Matrix
FEBI	1756.45MB	1681MB
FEBI-H	470.38MB	225.23MB

階層化行列法を用いることで、このモデルについて行列データを1/10以下、ピークのメモリは1/4程度に抑えることができた。

(2) 薄膜軟磁性モデル

磁気抵抗素子は内部の磁化状態によって抵抗が変わる材料であり、その材料に使われる軟磁性薄膜の磁化状態は形状や大きさによって大きく変わるために、2つめの検証モデルとして、1節でのモデルを面内方向に拡大したモデルを採用した。具体的には $3\mu\text{m} \times 750\text{nm} \times 3\text{nm}$ の直方体をメッシュサイズ 2.5nm で分割し(Z方向は分割無し)、18万1500個の六面体メッシュを作成した。計算パラメータは1節と共通だが、ダンピング定数を1.0に設定し、1nsの過渡的な振る舞いを比較した。図-3に面内の平均磁化成分の時間変化を記す。FEBI-H法の1nsまでの磁化の振る舞いはFEBI法の結果をよく再現している。

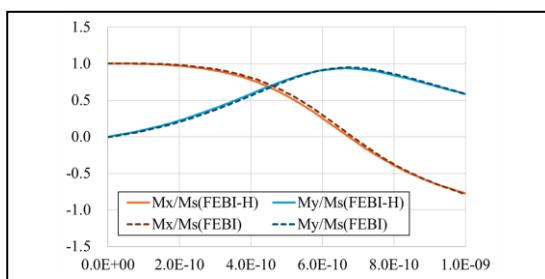


図-3 磁化の面内成分の時間変化

表-2に各手法における使用メモリ量を記載する。1節よりも解析領域が大きく使用メモリが多いため、階層化行列の要求精度を変えた場合の結果も確認した。要求精度とは近似した行列の行列ノルムの相対誤差をその値以下にするパラメータである。

表-2 FEBI 法と FEBI-H 法の使用メモリ量

Method	Eps.	Peak	Matrix
FEBI		132GB	123GB
FEBI-H	10^{-5}	28GB	19.7GB
FEBI-H	10^{-4}	19GB	2.8GB
FEBI-H	10^{-3}	18GB	2.2GB

図-4に1ns時点での磁化の面内状態を記す。(a), (b), (c)がそれぞれ要求精度 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} のX方向成分、(d), (e), (f)がそれぞれ要求精度 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} のY方向成分である。

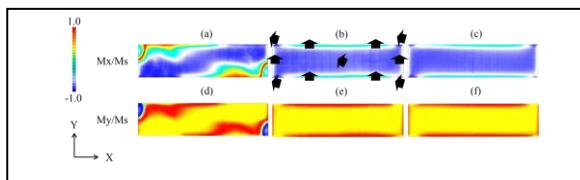


図-4 1ns 時点での磁化の面内状態

10^{-3} については1ns時点での磁化状態が他のケースと大きく異なり、計算精度として不十分と考えられる。使用メモリ量も 10^{-4} から大きく変わらない点も踏まえ、今回の軟磁性薄膜計算においては要求精度 10^{-4} あれば十分と考えられる。

表-3に計算時間の内訳を示す。Eps.列に階層化行列の要求精度、Total列に総計算時間、Matrix列に行列作成時間、第5列に行列ベクトル積の時間を記載している。階層化で表面積分の演算コストが下がったことにより、行列ベクトル積に要する時間が1/10以下になった。一方、階層化行列作成に要する時間は密行列の作成コストよりも大きくなっているが2倍程度に抑えられているため、計算全体として5倍ほど高速化できている。

表-3 FEBI 法と FEBI-H 法の計算時間[秒]

Method	Eps.	Total	Matrix	M-V product
FEBI		5003	278	4711
FEBI-H	10^{-5}	1216	628	572
FEBI-H	10^{-4}	911	534	362
FEBI-H	10^{-3}	849	480	353

4. まとめ

本稿では階層化行列法を用いることで境界要素法の使用メモリと計算量を削減し、空気メッシュを作成しないマイクロマグネティックシミュレーションの適用範囲の拡大に向けた検討を行った。本手法を用いることで、今回使用した軟磁性薄膜モデルの計算に対して使用メモリは最大で85%ほど削減でき、計算機の積載メモリの問題で計算できなくなる状況は緩和されると考えられる。さらに計算精度についても問題ないことを確認し、計算の高速化も見込めることが示した。今後はより複雑な形状に対しても適用範囲を広げていく予定である。

参考文献

- [1] <https://www.fsastech.com/ja-jp/products/software/examag/>
- [2] D. R. Fredkin and T. R. Koehler : “Hybrid Method for Computing Demagnetizing Fields”, IEEE TRANS. MAGN., VOL. 26, NO. 2 (1990)
- [3] H. Kronmüller and M. Fähnle : “Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids”, Cambridge University Press (2003)
- [4] <https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC/tree/MATH/HACapK>