

ゼミ レポート 09

山田朔也

2022 年 7 月 4 日

1 本レポートについて

本レポートは 6 月 28 日に行われたゼミにて出題された課題に対するレポートとなっている。課題内容は、静磁界計算をフーリエ変換を用いて行う事となる。

2 原理

2.1 離散高速フーリエ変換を用いた Convolution 演算の高速計算

$$A(i) = \sum_{j=1}^n C(j-i) \cdot B(j), \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

式 1 の演算において、 A, B はそれぞれ長さ n のベクトル、 C は長さ $2n-1$ のベクトル、 n は二の累乗の数とする。このような演算を Convolution 演算と呼び、計算時間は n の二乗に比例する。

B 及び C が周期 n の周期関数であるとき、上記の演算は以下の手順で計算することができる。

1. B 及び C のフーリエ成分 Br (実数部), Bi (虚数部), Cr (実数部), Ci (虚数部) を求める。
2. 求めたフーリエ成分の各成分を直接掛け合わせ、結果をそれぞれ Ar, Ai とする。

$$\begin{aligned} Ar(i) &= Br(i) \cdot Cr(i) - Bi(i) \cdot Ci(i), \\ Ai(i) &= Br(i) \cdot Ci(i) + Bi(i) \cdot Cr(i), \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

3. Ar, Ai を逆フーリエ変換する。このとき得られた実数部が求める A となる。

このときの計算時間は、 $O(n \log(n))$ となる。

2.2 非周期構造での Convolution 演算

第 2 章 1 節では、計算対象が周期構造を持つ場合に適用することができる手法であるが、以下に述べるゼロパディング手法を用いることで、周期構造を持たない場合も適用できる。

長さ n のベクトル B および C を例に取る。まず B, C を長さ $2n$ に拡張し、 B', C' とする。拡張は式 2,3 のよ

うに行う。

$$\mathbf{B}' : B(1), B(2), \dots, B(n), 0, 0, \dots, 0 \quad (2)$$

$$\mathbf{C}' : 0, C(-n+1), C(-n+2), \dots, C(0), C(1), \dots, C(n-1) \quad (3)$$

ベクトル \mathbf{B}', \mathbf{C}' の 2 つを第 2 章 1 節の計算手順に従って計算を行い、逆フーリエ変換して得られたベクトルを \mathbf{A}' とする。このとき、 $A'(n+1), \dots, A'(2n)$ の成分が求める演算の解となる。

3 問題 1

3.1 問題内容

問題内容は、3 章で行った 1 次元計算での静磁界計算を、離散高速フーリエ変換を用いて行うもの書き直す。そして、作成したプログラムを用いて静磁界を求め、従来法で求めたものとほぼ一致するか確認し、計算時間と計算点 n との関係を求める。

3.2 材料定数

材料定数は、結果の欄で特筆しない限り以下のものを使用する。

- 飽和磁化 $M = 800 \text{ emu/cm}^3$
- 交換スティフネス定数 $A = 1 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$
- 異方性定数 $K_u = 0 \text{ erg/cm}^3$
- 損失定数 $\alpha = 1$
- 磁気回転比 $|\gamma| = 1.76 \times 10^7 \text{ rad/(s} \cdot \text{Oe)}$
- 時間刻み $dt = 0.1 \times 10^{-12} \text{ s}$
- 格子間隔 $dx = 80 \text{ \AA}$
- 膜厚: Bloch 磁壁 $dz = 1000 \text{ \AA}$
- 膜厚: Néel 磁壁 $dz = 100 \text{ \AA}$
- 計算点数 $n = 30$
- 計算の境界では、左端が $(0, -1, 0)$ 、右端が $(0, 1, 0)$ を用いる
- 初期値 (Bloch 磁壁): my は計算領域内で -1 から $+1$ まで直線的に変化、 $mz = \sqrt{1 - my^2}$, $mx = 0$

3.3 結果

まず、離散高速フーリエ変換を用いて求めた静磁界の値と、通常の計算手法を用いて求めた静磁界の値の誤差率を計算した。ただし、真値は通常の計算手法の方とした。

このときの結果は、 $-3.156473\text{e-}16\%$ となった。この値は非常に小さく、ほぼ一致したと考えられる。

次に静磁界計算の計算時間と計算点数 n の関係を、図 1 に示した。なお、この計算を行うにあたって、計算点数 n の値を変えつつ実行している。

図 1 から離散高速フーリエ変換を用いた計算方法を用いることで、計算数 n が肥大化しても、計算時間は通常方法を用いたものより抑えられることがわかる。また、計算点数 n が小さい場合は、通常方法を用いたもののほうが計算時間が短くて済むこともわかった。

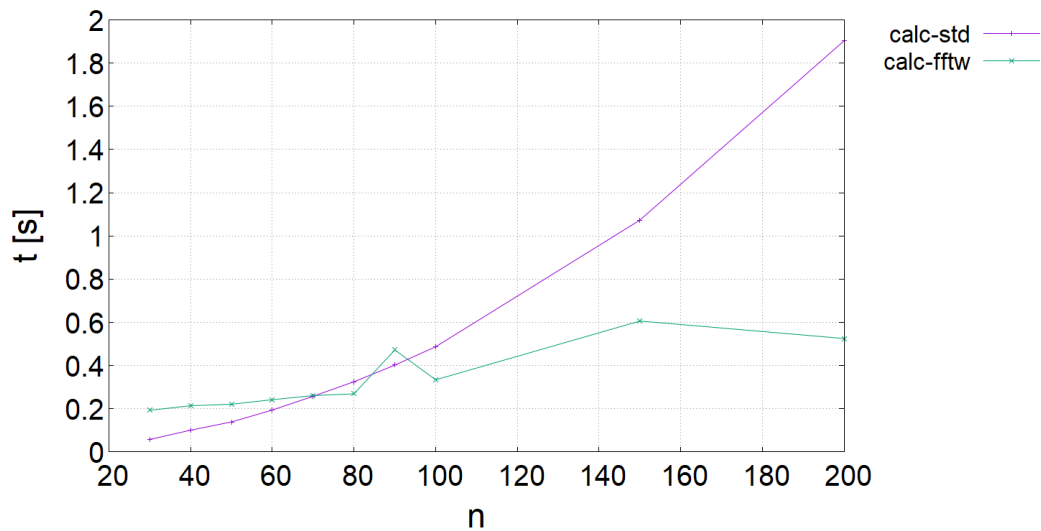


図 1: 計算時間と計算点 n の関係

4 問題 2

4.1 問題内容

問題内容は 5 章で作成したプログラムを、静磁界計算を離散高速フーリエ変換を用いて行うもの書き直し、計算制度、計算時間を調べる事だ。

4.2 材料定数

材料定数等は、各小問の欄で特筆しない限り以下のものを使用する。

- 計算点が x - y 面に広がる 2 次元計算
- 直方体をセルを用いて離散化を行う
- 磁気モーメントを求める点は、各計算セルの中心に配置し、磁気モーメントは全て同じ方向を向くと仮定する。
- 飽和磁化 $M = 800 \text{ emu/cm}^3$
- 交換スティフネス定数 $A = 1 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$
- 異方性定数 $K_u = 0 \text{ erg/cm}^3$
- 損失定数 $\alpha = 1$
- 磁気回転比 $|\gamma| = 1.76 \times 10^7 \text{ rad/(s} \cdot \text{Oe)}$
- 時間刻み $dt = 0.1 \times 10^{-12} \text{ s}$
- 格子間隔 $dx = 80 \text{ \AA}$
- 格子間隔 $dy = 80 \text{ \AA}$
- 格子間隔 $dz = 450 \text{ \AA}$
- x 方向の計算点数 $n_x = 48$

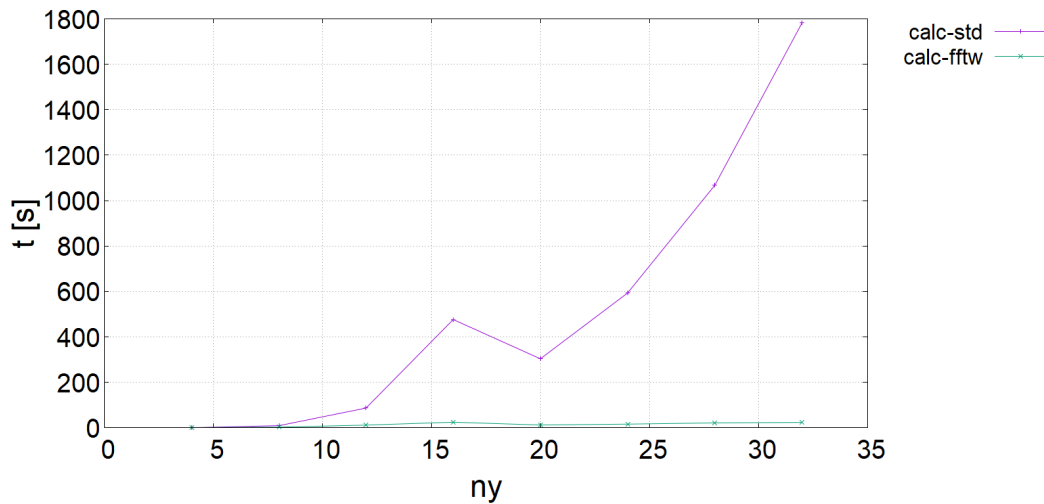


図 2: 計算時間と計算点 n の関係

- y 方向の計算点数 $ny = 16$
- z 方向の計算点数 $nz = 1$
- 境界領域では、ノイマン条件を用いる。
- 初期値は計算領域の中心を中心として反時計回りの方向を向いている円形状を初期値とし、磁壁の中心部では磁化を多少 $+z$ 方向に持ち上げておく。

4.3 結果

まず、離散高速フーリエ変換を用いて求めた静磁界の値と、通常の計算手法を用いて求めた静磁界の値の誤差率を計算した。ただし、真値は通常の計算手法の方とした。

このときの結果は、 $1.211736e-10\%$ となった。この値は非常に小さく、ほぼ一致したと考えられる。

次に静磁界計算の計算時間と計算点数 n の関係を、図 2 に示した。なお、この計算を行うにあたって、計算点数 ny の値を変えつつ実行している。それに加え、 ny を $1.5 \times ny$, $2.0 \times ny$ と増やした際に、 nz も $1.5 \times nz$, $2.0 \times nz$ と増やすこととした。

図 2 から図 1 と同様に、離散高速フーリエ変換を用いた計算方法を用いることで、計算数 n が肥大化しても、計算時間は通常方法を用いたものより抑えられることがわかる。また、図 1 とは異なり、二次元方向に計算をしているため、各軸方向への計算点数が少なくても、計算時間が長くなりやすい。よって、計算点数が少ないときでも、離散高速フーリエ変換を用いた計算方法の方が計算時間が短くなる。

5 問題 3

5.1 問題内容

問題内容は、離散高速フーリエ変換を用いて枕木磁壁の磁化構造を求め、直接法の結果と比較する。

5.2 材料定数

材料定数は第 4 章 2 節に準拠する。

5.3 結果

枕木磁壁の計算をした結果を、それぞれ図 3a,3b として示す。

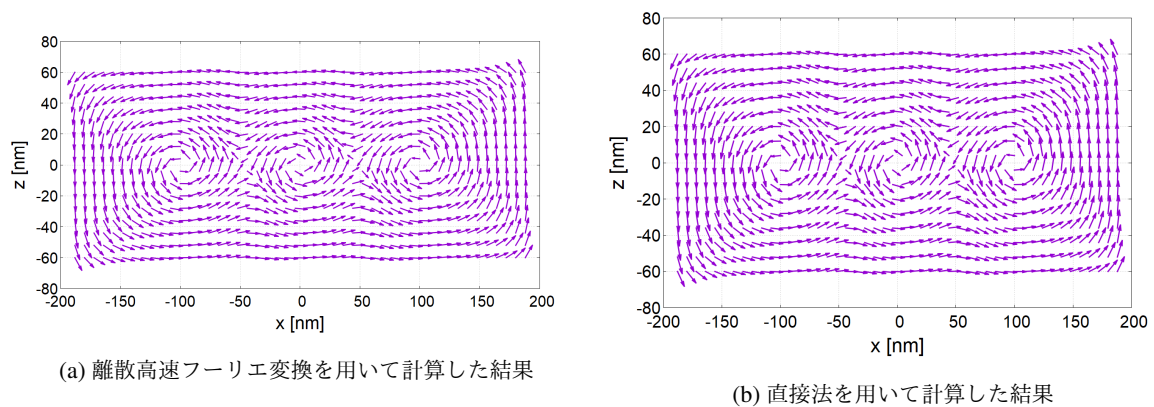


図 3: 静磁界係数の計算結果

次に、この結果の誤差率を計算したところ、 $7.577389\text{e-}08\%$ となった。

図 3 や誤差率からほぼ一致していることが分かる。

6 参考文献

- 配布されたテキスト