

CÀLCUL DE CORRENTS CRÍTICS PER MITJÀ DE MESURES DE CAMP MAGNÈTIC

J. AMORÓS, M. CARRERA, J. FONTCUBERTA, X. OBRADORS

RESUM. Calculem la corrent que circula per una mostra de material superconductor de gruix no menyspreuable a partir de mesures de camp magnètic vertical amb sonda Hall. No es suposa cap mena de simetria en la circulació de corrent en els plans horitzontals, ni es requereix coneixement previ dels dominis en la mostra.

1. INTRODUCCIÓ

Els recents avanços en la síntesi de superconductors a altes temperatures permeten fabricar mostres macroscòpiques de material tipus YBaCuO superconductores, amb mida centimètrica en les tres dimensions. La obtenció de peces d'aquests tamanys i altres encara superiors és essencial per a moltes de les aplicacions potencials d'aquests materials. El seu estudi i utilització planteja però un problema: s'ha d'esbrinar no només el corrent crític, sinó també la distribució d'aquest corrent en tota la mostra. Aquesta distribució està lligada a l'existència de dominis en la mostra, i els exemples ja estudiats mostren que pot ser molt inhomogènea.

En aquest treball ens plantegem el problema del càlcul de la circulació de corrent crític en mostres ortoèdriques o cilíndriques de material superconductor a partir de mesures del camp magnètic generat per aquest corrent. En general és impossible calcular el corrent elèctric en una mostra de tres dimensions a partir del camp magnètic que genera, però quan el corrent és bidimensional, ço és, circula en plans horitzontals, aleshores queda determinat per la component vertical B_z del camp magnètic que genera. Aquest és el cas en mostres superconductores amb imantació \mathbf{M} vertical, i el mètode de càlcul que presentem aquí és vàlid per aquestes mostres.

2. EL MÈTODE DE CÀLCUL

El problema precís que ens plantegem és el següent: tenim una mostra de material conductor $A \times I$, que és un cilindre recte sobre una base plana $A \subset \mathbb{R}^2$ que té qualsevol geometria (rectangular, circular o altres més exòtiques). Per aquesta mostra circula un corrent $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ sobre el que fem les següents hipòtesis:

- (i) El corrent circula en plans horitzontals, és a dir $J_z = 0$.
- (ii) Per cada secció horitzontal circula el mateix corrent, és a dir, les funcions J_x, J_y depenen només de les variables x, y .

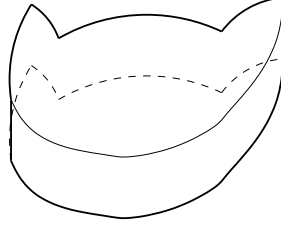


FIGURA 1. Exemple de mostra

La primera hipòtesi es compleix en mostres de material superconductor tipus YBaCuO ben cristal·litzades. La segona hipòtesi és més restrictiva; sembla raonable per mostres amb pocs mil·límetres de gruix totalment penetrades pel camp.

En contrast, no fem cap hipòtesi sobre el comportament de la corrent en els plans horitzontals. No només no presuposem res sobre el nombre de dominis o el recorregut de la corrent, sinó que la implementació feta de l'algoritme no requereix conèixer ni tan sols la posició o la forma de la mostra.

Donada una mostra superconductora $A \times I$ amb carta coordenada $\mathbf{r}' = (x', y', z')$ i imantació $\mathbf{M}(\mathbf{r}')$, el camp magnètic induït en un punt de l'espai $\mathbf{r} = (x, y, z)$ és

$$(1) \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{A \times I} \frac{3\mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5} (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dvol$$

En el cas en que el camp magnètic originalment aplicat, i per tant la magnetització \mathbf{M} , és vertical, si denotem $M = M_z$ la component vertical del camp magnètic resultant ve donada per la fórmula

$$(2) \quad B_z(x, y, z) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{A \times I} \frac{M(\mathbf{r}') (3(z - z')^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5} dvol.$$

El nostre objectiu és l'invers, calcular la imantació escalar M a partir del camp magnètic B_z , que podem mesurar en punts de sobre la mostra amb una sonda Hall. Debut al caràcter discret de les mesures de camp magnètic disponibles, dividirem un entorn de la superfície A en una malla rectangular fina, que anomenarem la *malla discretitzada*, i suposarem que la imantació M pren un valor constant $M(i, j)$ en els prismes quadrats de $A \times I$ delimitats pels quadrats Δ_{ij} de la mostra. Mesurem mitjançant la sonda Hall el camp magnètic vertical B_z en una segona malla rectangular de punts situats a una alçada constant $z = h$ sobre la mostra, la *malla de mesura*. Amb la hipòtesi d'imantació discreta, la fórmula (2) aplicada al camp magnètic en un punt (x_m, y_n, h) de la malla de mesura dóna la igualtat

$$(3) \quad B_z(x_m, y_n, h) = \sum_{i,j} M(i, j) \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Delta_{ij} \times I} \frac{3z^2 - r^2}{r^5} dvol,$$

on $r = |(x_m, y_n, h) - (x, y, z)|$ pels punts (x, y, z) de la mostra, i prenem el sumatori sobre tots els rectangles Δ_{ij} de la malla discretitzada. Si hom ha mesurat $B_z(x_m, y_n, h)$ i calcula les integrals que apareixen en aquesta equació, que depenen només de la geometria de la

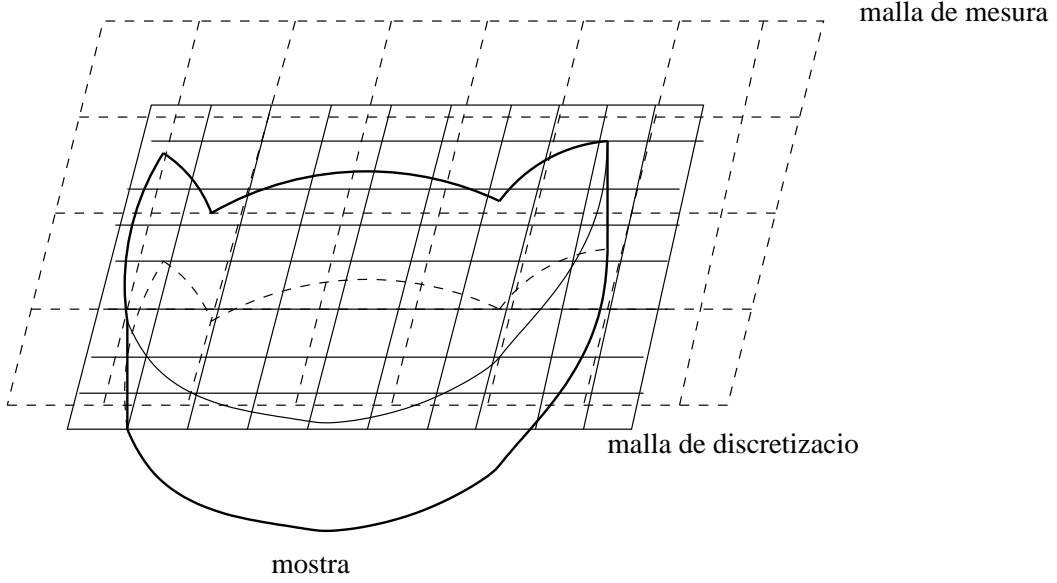


FIGURA 2. Malles de discretització i de mesura sobre la mostra

mallat, la equació (3) es converteix en una equació lineal en les incògnites $M(i, j)$, i amb coeficients

$$(4) \quad G(m, n, i, j) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Delta_{ij} \times I} \frac{3z^2 - r^2}{r^5} dvol.$$

Si prenem com a malla de mesura la formada pels centres dels rectangles de la malla discretitzada, o qualsevol altra malla amb el mateix nombre de mesures de B_z , obtenim un sistema lineal compatible determinat en les incògnites $M(i, j)$. Les solucions d'aquest sistema aproximaràn els valors de la imantació M en els prismes $\Delta_{ij} \times I$ si aquesta varia poc en ells. Aquest és el procediment seguit en [3] per estudiar corrents en una làmina fina. En canvi, si prenem la malla de mesura de B_z més fina que la mala discretitzada el sistema lineal resultant és sobredeterminat debut a que la imantació M no és constant en els prismes $\Delta_{ij} \times I$ contra la nostra hipòtesi de treball. En aquest cas, la solució del sistema lineal de mínims quadrats associat proporciona una aproximació al valor de la imantació en els $\Delta_{ij} \times I$.

Aquest algorisme de càlcul permet en principi treballar amb unes malles discretitzada i de mesura amb qualsevol geometria, i totalment independents l'una de l'altra. En particular la malla de mesura podria cobrir només part de la mostra. En la pràctica, però, els problemes de propagació d'errors que descriurem a continuació forcen a prendre la malla de mesura directament recobrint tota la mostra, i fan una malla aproximadament quadrada o hexagonal preferible a una altra de forma més allargada, tant per a discretitzar M com per a mesurar B_z .

3. FONTS D'ERROR I ALGORITME ESCOLLIT

Les fonts d'error en el càlcul de la imantació M en A que hem descrit en la secció anterior són les següents:

- (i) Error de discretització al suposar M constant en els rectangles Δ_{ij} .
- (ii) Error en l'avaluació dels coeficients $G(m, n, i, j)$.
- (iii) Errors d'arrodoniment en la resolució del sistema lineal.
- (iv) Error en la mesura del camp magnètic B_z .

La conjunció d'aquestes fonts d'error obliga a una selecció acurada de l'algoritme de càlcul a emprar, ja que mentre els errors provinents de les dues primeres fonts obviament decreixen al prendre malles més fines, aquest pas multiplica l'error provinent de les dues darreres fonts. El creixement de l'error al refinar les malles prové de dos fets:

- Els errors d'arrodoniment i aleatoris en la mesura del camp magnètic vertical B_z es fan més grans respecte de la variació real del camp entre punts veïns de la malla de mesura, podent arribar a dominar-la.
- Fins i tot si podem resoldre sistemes lineals $AX = b$ amb exactitud total, l'error relatiu en la matriu de coeficients A o en el terme independent b es multipliquen en la solució calculada per un factor que sol ser de l'ordre del *nombre de condició de la matriu* (vegeu [1]). Aquest nombre creix ràpidament en augmentar el tamany de les nostres matrius de coeficients $G(m, n, i, j)$, i d'aquesta manera la inexactitud en el coneixement del camp magnètic B_z és el primer factor limitador de la precisió del nostre càlcul de la imantació en la mostra.

A més, un cop calculada la magnetització M , el càlcul de la circulació de corrent $\mathbf{J} = (J_x, J_y)$ segons la fórmula

$$(5) \quad \mathbf{J} = \nabla \times M = \left(\frac{\partial M}{\partial y}, -\frac{\partial M}{\partial x} \right)$$

és particularment sensible als errors en la imantació M . Per exemple, si calculem les derivades restant valors consecutius de M en la malla discretitzada, novament ens podem trobar amb que l'error en els dos valors de la imantació emprats sigui més gran que la variació real de M .

Els errors en les mesures i la seva propagació creixen molt ràpidament en augmentar la resolució amb la que hom pretén calcular la imantació i el corrent. La nostra tria de procediments concrets per la mesura de B_z i el càlcul de M, \mathbf{J} ha estat determinada per aquest fet en primer lloc.

Pel que fa a la mesura del camp magnètic B_z , hom ha procurat acostar la sonda Hall a la mostra tant com ha estat possible. D'aquesta manera el camp mesurat té una magnitud superior, i els errors relatius debuts a arrodoniments i perturbacions aleatòries es fan més petits. Per la mateixa raó, cal descartar les mesures de camp magnètic en punts que no estiguin en la vertical de la mostra. Les mesures s'han fet en malles quadrades per a obtenir un coneixement més homogeni de la variació de camp de cara a la ulterior discretització del càlcul. Finalment, per a conèixer la corrent amb més resolució, s'ha optat per fer més mesures de camp magnètic que elements en la malla discretitzada, en proporcions fins 10:1.

El càlcul dels coeficients $G(m, n, i, j)$ ha estat realitzat per integració numèrica de la funció $\frac{3z^2-r^2}{r^5}$. Com la precisió en aquest pas no és el factor limitador principal de la del càlcul complet, hom ha calibrat la exactitud necessària en aquesta integració mitjançant simulacions en les que el camp magnètic B_z era conegut amb una precisió molt superior.

La malla discretitzada pel càlcul de la imantació cobreix la mateixa regió del pla xy que la malla de mesura de B_z . És necessari complir aquesta condició almenys aproximadament, o del contrari el nombre de condició de la matriu del sistema lineal de les equacions (3) es fa tan gran que invalida tots els càlculs. Aquest problema fa impracticable el càlcul de la imantació en tota la mostra a partir de mesures de camp només en una part. En canvi, la tria de malles discretitzada i de mesura cobrint la mateixa regió i amb una ordenació similar dels punts dóna lloc a matrius de coeficients amb nombres de condició extremadament petits per la mida de la matriu.

El sistema lineal format per les equacions (3) ha estat resolt per descomposició QR via reflexions de Householder. La descomposició QR pot ser calculada amb molta més precisió mitjançant reflexions de Householder que pel mètode de Gramm-Schmidt; presenta els avantatges de que serveix tant per resoldre sistemes determinats com per resoldre sistemes sobredeterminats per mínims quadrats, i sobretot de que manté el nombre de condició de la matriu. Això significa que si reemplaçem un sistema lineal $AX = b$ per la seva descomposició QR, $QRX = b$, el nombre de condició que dóna la magnificació de l'error és el mateix pel sistema $AX = b$ com pels sistemes equivalents $QY = b, RX = Y$. En canvi, si hom opta per fer una descomposició LU, fins i tot quan el de la matriu A és baix el nombre de condició del sistema equivalent $L(UX) = b$ pot ser arbitràriament gran (i sol créixer en la pràctica).

Finalment, la diferenciació de la imantació per a calcular el corrent crític $\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{M}$ ha estat feta prenent diferències finites dels valors de M en una xarxa de dotze punts veïns a cada punt on és calcula la derivada, amb pesos calculats pel mètode de mínims quadrats.

Aquest mètode de càlcul de derivades té l'inconvenient de que eixampla més la regió on la derivada és no nula que per exemple el mètode de restar els valors de la funció en dos punts consecutius. Però en les resolucions més fines usades en la pràctica la derivació per diferències en dotze punts ha fet que l'error en la corrent \mathbf{J} calculada sigui del mateix ordre que el de la imantació M . En canvi, l'error introduït usant una derivació mitjançant dos valors domina ràpidament al valor absolut de la corrent.

Tal com ja s'ha dit, una limitació d'aquest mètode de càlcul és el ràpid creixement del nombre d'operacions a mesura que hom pren malles més fines. En efecte, si la malla de mesura del camp magnètic té $M = m \times n$ punts i la malla d'imatació té $N = mi \times ni$ punts, la generació de la matriu de coeficients del sistema lineal requereix el càlcul de MN integrals triples, i per fer la descomposició QR de la matriu $M \times N$ resultant d'aquest procés s'han de calcular de l'ordre de MN^2 sumes-productes. Aquests són els dos passos de procés que dominen el temps d'execució.

4. IMPLEMENTACIÓ DEL CÀLCUL

Els mètodes de càlcul que hem descrit han estat implementats finalment en una mostra de material superconductor YBaCuO de base rectangular, amb superfície de 9×11 mm aproximadament i un gruix de 3.9 mm. Per a contrastar la fiabilitat del mètode, també s'ha aplicat a altres mostres de superfície comparable i gruix de 15 mm, i a mostres simulades de les dimensions de la mostra principal, en les que hem calculat amb gran precisió el camp magnètic vertical B_z que produiria una certa corrent coneguda. Les mostres reals estudiades han resultat ser monodominis, però en les mostres simulades hem considerat també casos amb dos dominis i distribucions de corrent variades.

La comparació amb les simulacions ha estat il·luminadora respecte a la magnitud de l'error provinent de les diferents fonts. Així, al treballar amb simulacions en les que el camp B_z era calculat amb 6 o més dígits bons, el sistema determinat va produir solucions acurades fins a la resolució màxima que els ordinadors usats ha permès. En contrast, al treballar amb mostres reals en les que el camp magnètic és conegut amb tres dígits bons, el nostre mètode de discretització i linealització només ha produït solucions correctes prenent sistemes sobredeterminats, en els que la proporció entre el tamany de la malla de mesura i la malla discretitzada ha estat entre 3:1 i 10:1.

Les mesures de camp magnètic en punts que queden 1–3 mm fora de la vertical de la mostra han resultat ser una font especialment important d'error. Com la natura de l'experiment impedeix conèixer la posició exacta de la mostra, hom ha optat per fer en primer lloc el càlcul a baixa resolució, aleshores detectar la mostra pel fet de que $M = 0$ fora d'ella i repetir el càlcul amb unes malles restringides.

L'aproximació de les densitats de corrent i circulacions calculades a les reals ha estat força bona en les simulacions i en les mostres reals en les que la verificació ha estat possible (veure exemples). A més, tots els càlculs fets sobre la mostra principal amb mesures preses a diferents alçades, diverses resolucions i dos algorismes completament diferents han produït solucions aproximadament iguals. Un error sistemàtic observat i encara no sol·lucionat és que la regió del pla xy en la que el nostre mètode detecta imantació no nula, que en principi hauria de ser només la mostra, és més ampla que la mostra en un ordre del 10 posterior per a calcular la circulació de corrent \mathbf{J} produeix encara un altre eixamplament de la regió calculada que ocupa la mostra, però aquesta darrera perturbació és senzilla d'eliminar.

Finalment, descrivim amb més detall les implementacions fetes d'aquest mètode de càlcul de la corrent.

En primer lloc es va fer una implementació senzilla per treballar a baixa resolució amb sistemes determinats (malla de mesura i discretitzada coincidents). Aquesta implementació va consistir en un programa pel paquet de càlcul MATLAB, usant la rutina de resolució de sistemes lineals LU amb control d'error que té el paquet i derivació a partir de dos valors. Els ordinadors usats han estat PC compatibles amb CPU 486/100 o Pentium/150, 16MB de memòria RAM i MATLAB per Windows. El factor limitador per a aquesta implementació ha estat la memòria RAM, ja que la configuració estàndar dels ordinadors ha permès treballar només amb malles de mida fins 22×22 punts. Aquestes malles donen lloc a un sistema lineal 500×500 amb una matriu que té 250.000 coeficients, tots ells

no nuls, que ocupen 4MB de memòria en doble precissió. Aquesta implementació ja va calcular valors de la densitat de corrent crítica en la mostra principal que les verificacions posteriors han confirmat (vegi's exemple). En canvi, el tamany del pas de malla, que era de l'ordre de 0.8×0.8 mm per les mostres observades, ha impedit observar alguns detalls més fins de la distribució de corrent, possiblement debuts a inhomogeneïtats del material, que s'han observat per la segona via. Els temps d'execució d'aquest programa han estat de entre una i dues hores.

Davant de les limitacions de la primera implementació per a resolucions més fines, que provenien no només de les limitacions de memòria RAM sinó també del creixement del nombre de condició del sistema lineal, es va optar per fer una segona implementació més específica. Aquesta ha consistit en un paquet de programes en C elaborats pel primer autor. La finalitat d'aquests programes ha estat la descrita en la secció prèvia:

- calcular la matriu de coeficients del sistema per un mètode de Simpson quadràtic,
- descomposició QR de la matriu de coeficients del sistema pel mètode de reflexions de Householder,
- resoldre el sistema lineal resultant, determinat o sobredeterminat, a partir de la descomposició QR obtinguda,
- càlcul de la circulació de corrent \mathbf{J} a partir de la imantació M per derivació numèrica mitjançant diferències en quatre o dotze valors,
- càlcul del camp magnètic induït per una corrent discretitzada, mitjançant la llei de Biot-Savart i integració numèrica pel mètode de Simpson quadràtic.

El càlcul i descomposició QR de la matriu de coeficients del sistema ha estat separat de la resolució del sistema per tenir la possibilitat d'emmagatzemar la descomposició QR i usar-la en tots els càlculs amb les mateixes malles de mesura i discretitzada (si hom disposa de capacitat per emmagatzemar centenars de MB de dades). Un tret especial dels nostres programes per a descomposició QR i resolució del sistema és que, debut a que el tamany de la matriu excedeix la disponibilitat de memòria RAM fins i tot de les estacions de treball usuals, hem dissenyat els algorismes de manera que divideixin la matriu en bandes horitzontals tan estretes com es vulgui i el programa només necessiti tenir una o dues d'aquestes bandes simultàniament en la memòria RAM. Aquest tret del paquet li permet adaptar-se a la memòria RAM disponible en ordinadors variats perdent només una fracció de la seva velocitat. Resolta així la dificultat amb la memòria RAM, el factor limitador de l'escala de càlcul és en l'actualitat la capacitat de disc dur per emmagatzemar les matrius necessàries durant el procés.

Aquesta segona implementació del càlcul ens ha permès treballar amb malles molt més fines. Malauradament, els augments d'error descrits en la secció prèvia al refinar les malles han forçat el pas de sistemes determinats a sobredeterminats, que consumeixen molta més memòria per element de imantació calculat i fan que el creixement de la resolució sigui molt més petit que el de la capacitat de computació requerida. Una compensació addicional del superior cost de càlcul és que els sistemes sobredeterminats produeixen solucions més fiables i acurades que els determinats quan l'error en la mesura del camp magnètic B_z és gran.

Els ordinadors usats per a executar aquest paquet en C de mètodes QR han estat una estació de treball VAX model AXP 3000/800 amb 64MB de memòria RAM amb sistema operatiu VMS ALPHA V1.5 i un ordinador PC compatible amb CPU Pentium/133 i 32MB de memòria RAM amb sistema operatiu Linux. Els temps d'execució dels programes ha estat similar en les dues màquines per totes les diverses mides de malla usades.

La geometria més habitual en els càlculs per aquesta implementació ha estat una malla discretitzada de tamany 50×40 i una malla de mesura de mida 100×80 . Això correspon a un sistema sobredeterminat en proporció 4:1, i, en la nostra mostra, a un pas 0.35×0.35 mm en la malla discretitzada de imantació, i 0.18×0.18 mm per les mesures de camp magnètic. El sistema lineal resultant és un sistema ple 8000×2000 que ocupa 128MB de memòria en doble precisió. El procés complet de càlcul i resolució d'aquest sistema requereix unes sis hores en els ordinadors emprats. El càlcul amb malles més grosses fet fins ara ha estat amb una malla discretitzada de 2000 elements i una malla de mesura de 22500 elements. Aquest procés va durar més de 40 hores i va requerir 360MB de disc dur, la totalitat de l'espai disponible.

5. CONCLUSIONS SOBRE EL CàLCUL NUMÈRIC

El gran abaratiment actual de la capacitat de càlcul per ordinador permet obtenir mapes de corrent amb una resolució de fraccions de mil·límetre per a mostres centimètriques amb circulació de corrent en plans, usant un algoritme fiable de discretització i linealització, i sense altres coneixements a priori sobre la corrent, com ara dominis. Creiem que aquest mateix algoritme pot permetre el càlcul de la densitat de corrent crítica i un mapa de circulació de corrent més groller, que despreciï les petites pertorbacions, en mostres un ordre de magnitud més grans.

REFERÈNCIES

- [1] G. Dahlquist, A. Björk, *Numerical Methods*, Prentice-Hall 1974.
- [2] Shaofen Tan, Yu Pei Ma, I. Thomas, J. Wikswo, *Reconstruction of Two-Dimensional Magnetization and Susceptibility Distributions from the Magnetic Field of Soft Magnetic Materials*, IEEE Trans. Magn. **32** (1996) 230–234.
- [3] W. Xing, B. Heinrich, Hu Zhou, A. Fife, A. Cragg, *Magnetic flux mapping, magnetization and current distributions of $YBa_2Cu_3O_7$ thin films by scanning Hall probe measurements*, J. Appl. Phys. **76** (1994) 4244–4255.

DEPT. MATEMÀTICA APLICADA I, UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA, DIAGONAL 647,
08028 BARCELONA, SPAIN

E-mail address: amoros@ma1.upc.es

DEPT. DE CIÈNCIES DEL SÒL I MITJÀ AMBIENT, UNIVERSITAT DE LLEIDA, LLEIDA, SPAIN

E-mail address: mcarrera@eup.udl.es

INSTITUT DE CIÈNCIA DE MATERIALS DE BARCELONA, CSIC, CAMPUS U.A.B., SPAIN

E-mail address: fontcuberta@icmab.es

E-mail address: obradors@icmab.es