

差分法と Bi-CGSTAB 法による電磁界調和界の数値計算

大賀 明夫

株式会社 EEM

E-mail: oga@e-em.co.jp

あらまし 周波数を指定した電磁界の調和界表示を差分法によって離散化し、できる複素数非対称疎行列を Bi-CGSTAB 法 (安定化双共役勾配法) によって解く。吸収境界条件として Mur 一次と PML を考える。また周期境界条件が容易に実装できる。プログラムの並列化手法として OpenMP, MPI, CUDA を実装する。本方法は FDTD 法とほぼ同じ計算機能を有し、アンテナ、散乱問題に広く適用することができる。プログラムはオープンソースとして公開する。

キーワード 電磁界調和界, 差分法, Bi-CGSTAB 法, 並列化

Numerical calculation of electromagnetic time harmonic field by finite difference method and Bi-CGSTAB method

Akio OGA

EEM Inc.

E-mail: oga@e-em.co.jp

1. まえがき

現在電磁界シミュレーターは電磁界の設計や開発に欠かせないものとなっており、より精度よく計算するために問題のサイズが大規模になり、また新しい機能を持つデバイスに対応するために様々な機能がシミュレーターに要求されている。

現在電磁界シミュレーターとしては FDTD 法 (時間領域差分法) [1]-[4] が広く使用されており、自由空間にアンテナや散乱体が孤立したモデルを解くには最適の手法と言える。FDTD 法は有限の領域を時間領域の差分法で解くものである。有限の領域であるために無限に広がった誘電体基板の上に物体が存在するモデルでは基板表面の吸収境界条件に問題が生じる。時間領域であるために周期境界条件のように本来周波数領域では簡単に処理できるものを時間領域で定式化しなければならないので取り扱いが難しくなる。また FDTD 法はタイムステップごとに変数を上書きする陽解法であるために必要メモリーが少なくアルゴリズムが簡単である反面、安定性条件のためにタイムステップ幅に上限があり準静電界のような低周波ではタイムステップ数が周波数に反比例して増える欠点がある。

本報告では以上のような FDTD 法の不得意な問題に対応できる計算手法として電磁界の調和界を差分法で計算する方法について述べる。Maxwell 方程式を電界に関するベクトル波動方程式に変換し差分法によって離散化する。得られる連立一次方程式は複素数非対称疎行列であり、これを簡単なアルゴリズムと高い収束性で知られる Bi-CGSTAB 法 (Bi-Conjugate Gradient Stabilized: 安定化双共役勾配法) [5]-[9] で解く。

調和界を差分法で解く方法は通常 FDFD 法 (周波数領域差分法) と呼ばれる。時間のない 3 次元空間であるために FDTD 法に比べ各種の定式化が容易である。文献 [10] では電界と磁界を連立させて Bi-CGSTAB(I) 法で解いている。また同

様の手法として有限要素法 [11][12] があるが、差分法は構造格子であるために分散メモリー環境で領域を分割して並列計算を行うことに適している。また文献 [13] では FDTD 法を半陰解法である Crank-Nicolson 法で定式化し Bi-CGSTAB 法と GMRES 法を比較し Bi-CGSTAB 法の収束性がやや勝ることを述べている。

2. 計算方法

2.1 基本式の離散化

Maxwell 方程式(1)において時間微分を $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow j\omega$ とおく

と調和界表示の式(2)が得られる。

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_e \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{J}_m$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= j\omega \mathbf{D} + \mathbf{J}_e \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega \mathbf{B} - \mathbf{J}_m \end{aligned} \quad (2)$$

式(2)に構成方程式(3)とオームの法則(4)を代入した後磁界を消去すると式(5)のベクトル波動方程式が得られる。

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (3)$$

$$\mathbf{J}_e = \sigma_e \mathbf{E}, \mathbf{J}_m = \sigma_m \mathbf{H} \quad (4)$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (5)$$

ここで

$$\epsilon_r = \epsilon_r' - j\epsilon_r'' = \epsilon_r' - j\frac{\sigma_e}{\omega\epsilon_0} \quad (6)$$

$$\nu_r^{-1} = \mu_r = \mu_r' - j\mu_r'' = \mu_r' - j\frac{\sigma_m}{\omega\mu_0} \quad (7)$$

$$k_0 = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \quad (8)$$

である。式(5)の電界 \mathbf{E} 、比誘電率 ϵ_r 、比磁気抵抗率 ν_r はすべ

て複素数である。

式(5)を図1のYee格子で離散化する。電界のX成分を電界点 $(i+1/2, j, k)$ で離散化すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta y_j \Delta y_{j+\frac{1}{2}}} + \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y_j \Delta y_{j-\frac{1}{2}}} + \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} \right. \\
 & + \left. \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} - k_0^2 \epsilon_r(i+\frac{1}{2}, j, k) \right\} E_x(i+\frac{1}{2}, j, k) \\
 & - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta y_j \Delta y_{j+\frac{1}{2}}} E_x(i+\frac{1}{2}, j+1, k) - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y_j \Delta y_{j-\frac{1}{2}}} E_x(i+\frac{1}{2}, j-1, k) \\
 & - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} E_x(i+\frac{1}{2}, j, k+1) - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} E_x(i+\frac{1}{2}, j, k-1) \\
 & + \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \Delta y_j} \left\{ E_y(i+1, j+\frac{1}{2}, k) - E_y(i, j+\frac{1}{2}, k) \right\} \\
 & - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \Delta y_j} \left\{ E_y(i+1, j-\frac{1}{2}, k) - E_y(i, j-\frac{1}{2}, k) \right\} \\
 & + \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \Delta z_k} \left\{ E_z(i+1, j, k+\frac{1}{2}) - E_z(i, j, k+\frac{1}{2}) \right\} \\
 & - \frac{v_r(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \Delta z_k} \left\{ E_z(i+1, j, k-\frac{1}{2}) - E_z(i, j, k-\frac{1}{2}) \right\} = 0 \quad (9)
 \end{aligned}$$

図2の通りX,Y,Z成分ごとに4点が加わり合計13点の差分になる。電界のY,Z成分についてはX,Y,Zを巡回させて得られる(以下同様)。

完全導体(PEC)の上では次式が成り立つ。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=0 \quad (\mathbf{r} \in \text{PEC}) \quad (10)$$

またアンテナの給電点では給電電圧を V_{in} として次式が成り立つ。

$$E_x\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) = -\frac{V_{in}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \quad (11)$$

2.1 Bi-CGSTAB法による連立一次方程式の解法

前節の離散化によって基本式(5)は連立一次方程式になる。

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (12)$$

行列 \mathbf{A} は複素数非対称疎行列であり、1行の非ゼロ要素は13個以下である。 \mathbf{x} は未知数である電界、 \mathbf{b} は波源に由来する既知数である。行列の大きさを $N(=3N_x N_y N_z)$ とする。ここでは非対称行列の解法として図3のBi-CGSTAB法をとる。ここで (\mathbf{x}, \mathbf{y}) はベクトルの内積 $(\sum x_i y_i)$ 、 $\bar{\mathbf{x}}$ は複素共役である。反復計算当たり2回の行列ベクトル積と数回のベクトル同士の計算が必要になる。共役勾配法では計算精度の点から倍精度を使用する。図3(8)の内積については対称行列用のCOCG法[14]やCOCR法[15]では複素共役をとらないことが推奨されているが[8]、本方法では複素共役をとると安定的に収束する。

2.2 吸収境界条件

(1) Mur 一次相当

外向放射条件を適用することによってMur一次相当の吸収境界条件が得られる。 $-Y$ 境界面の E_x 成分は式(13)となる。

$$E_x\left(i+\frac{1}{2}, 0, k\right) = \exp(-jk \Delta y_{\frac{1}{2}}) E_x\left(i+\frac{1}{2}, 1, k\right) \quad (13)$$

ここで $k=k_0 \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ は境界面の媒質中の波数である。

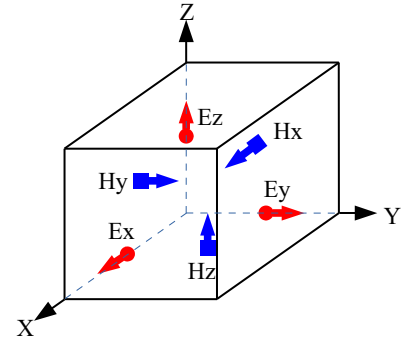


図1 Yee格子

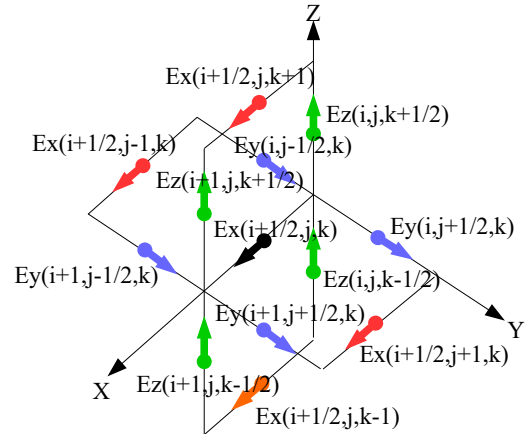


図2 13点差分

- (1) set initial value \mathbf{x}_0
- (2) $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0$
- (3) set \mathbf{r}_0^* where $(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_0) \neq 0$
- (4) $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$
- (5) do while $\frac{\|\mathbf{r}_{k+1}\|}{\|\mathbf{b}\|} > \epsilon$
- (6) $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{A} \mathbf{p}_k)}$
- (7) $\mathbf{t}_k = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k$
- (8) $\zeta_k = \frac{(\bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{t}}_k, \mathbf{t}_k)}{(\bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{t}}_k, \mathbf{A} \mathbf{t}_k)}$
- (9) $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k + \zeta_k \mathbf{t}_k$
- (10) $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{t}_k - \zeta_k \mathbf{A} \mathbf{t}_k$
- (11) $\beta_k = \frac{\alpha_k (\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_{k+1})}{\zeta_k (\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_k)}$
- (12) $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k (\mathbf{p}_k - \zeta_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k)$
- (13) $k = k + 1$
- (14) end do

図3 Bi-CGSTAB法

(2) PML

PML[16]では電磁界の各成分を式(14)のように分解する。

$$E_x = E_{xy} + E_{xz} \quad (14)$$

$$H_x = H_{xy} + E_{xz}$$

各成分は調和界表示の式(15)を満たす。

$$\begin{aligned}
(j\omega\epsilon+\sigma_y^e)E_{xy} &= +\frac{\partial H_z}{\partial y} \\
(j\omega\epsilon+\sigma_z^e)E_{xz} &= -\frac{\partial H_y}{\partial z} \\
(j\omega\mu+\sigma_y^m)H_{xy} &= -\frac{\partial E_z}{\partial y} \\
(j\omega\mu+\sigma_z^m)H_{xz} &= +\frac{\partial E_y}{\partial z}
\end{aligned} \tag{15}$$

ここでインピーダンス整合条件(16)と式(17)で定義される無次元の係数を用いると式(15)は式(18)になる。

$$\frac{\sigma_x^e}{\epsilon} = \frac{\sigma_x^m}{\mu} \tag{16}$$

$$c_x \equiv \frac{1}{Z(j\omega\epsilon+\sigma_x^e)\Delta x} = \frac{Z}{(j\omega\mu+\sigma_x^m)\Delta x} \quad (Z \equiv \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}) \tag{17}$$

$$\begin{aligned}
E_{xy} &= +Zc_y\Delta y \frac{\partial H_z}{\partial y} \\
E_{xz} &= -Zc_z\Delta z \frac{\partial H_y}{\partial z} \\
H_{xy} &= -\frac{1}{Z}c_y\Delta y \frac{\partial E_z}{\partial y} \\
H_{xz} &= +\frac{1}{Z}c_z\Delta z \frac{\partial E_y}{\partial z}
\end{aligned} \tag{18}$$

式(18)から2成分の和をとると式(19)となりこれから磁界を消去すると式(20)になる。

$$E_x = +Zc_y\Delta y \frac{\partial H_z}{\partial y} - Zc_z\Delta z \frac{\partial H_y}{\partial z} \tag{19}$$

$$H_x = -\frac{1}{Z}c_y\Delta y \frac{\partial E_z}{\partial y} + \frac{1}{Z}c_z\Delta z \frac{\partial E_y}{\partial z}$$

$$\begin{aligned}
E_x &= +c_y\Delta y \frac{\partial}{\partial y} \left(-c_x\Delta x \frac{\partial E_y}{\partial x} + c_y\Delta y \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \\
&\quad - c_z\Delta z \frac{\partial}{\partial z} \left(-c_z\Delta z \frac{\partial E_x}{\partial z} + c_x\Delta x \frac{\partial E_z}{\partial x} \right)
\end{aligned} \tag{20}$$

式(20)を点 $(i+1/2, j, k)$ で離散化すると次式となる。

$$\begin{aligned}
&\left[1+c_y(j) \left\{ c_y \left(j+\frac{1}{2} \right) + c_y \left(j-\frac{1}{2} \right) \right\} + c_z(k) \left\{ c_z \left(k+\frac{1}{2} \right) + c_z \left(k-\frac{1}{2} \right) \right\} \right] E_x \left(i+\frac{1}{2}, j, k \right) \\
&- c_y(j)c_y \left(j+\frac{1}{2} \right) E_x \left(i+\frac{1}{2}, j+1, k \right) - c_y(j)c_y \left(j-\frac{1}{2} \right) E_x \left(i+\frac{1}{2}, j-1, k \right) \\
&- c_z(k)c_z \left(k+\frac{1}{2} \right) E_x \left(i+\frac{1}{2}, j, k+1 \right) - c_z(k)c_z \left(k-\frac{1}{2} \right) E_x \left(i+\frac{1}{2}, j, k-1 \right) \\
&\quad + c_y(j)c_x \left(i+\frac{1}{2} \right) \left\{ E_y \left(i+1, j+\frac{1}{2}, k \right) - E_y \left(i, j+\frac{1}{2}, k \right) \right. \\
&\quad \quad \left. - E_y \left(i+1, j-\frac{1}{2}, k \right) + E_y \left(i, j-\frac{1}{2}, k \right) \right\} \\
&\quad + c_z(k)c_x \left(i+\frac{1}{2} \right) \left\{ E_z \left(i+1, j, k+\frac{1}{2} \right) - E_z \left(i, j, k+\frac{1}{2} \right) \right. \\
&\quad \quad \left. - E_z \left(i+1, j, k-\frac{1}{2} \right) + E_z \left(i, j, k-\frac{1}{2} \right) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{21}$$

式(17)の中の導電率は外側で大きくなるように次式で与える。

$$\sigma_x^{e,m}(i) = \begin{cases} \sigma_{-x,max}^{e,m} \left(\frac{-i}{L} \right)^M & (i \leq 0) \\ 0 & (0 < i < N_x) \\ \sigma_{+x,max}^{e,m} \left(\frac{i-N_x}{L} \right)^M & (i \geq N_x) \end{cases} \tag{22}$$

$$\sigma_{\pm x,max}^e = \epsilon c \frac{K}{\Delta x_{\pm}} \tag{23}$$

$$\sigma_{\pm x,max}^m = \mu c \frac{K}{\Delta x_{\pm}}$$

$$K = \frac{M+1}{2L} \log \frac{1}{R_0} \tag{24}$$

ここでLはPMLの層数、Mは次数、 R_0 は垂直入射の反射係数である。以上から式(17)は次式で計算される。ここで ϵ_r, μ_r は境界面の媒質の比誘電率と比透磁率である。

$$c_x(i) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} & (i \leq 0) \\ \frac{1}{j k_0 \Delta x_i + K \left(\frac{-i}{L} \right)^M} & (0 < i < N_x) \\ \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} & (i \geq N_x) \end{cases} \tag{25}$$

なお、PML領域の外周では電界=0とする。

まとめると、PMLでは式(25)を用いて式(21)の係数を計算する。式(21)は式(9)と比べると係数は異なるが同じ13点差分である。またFDTD法のように電磁界を2成分に分けた余分な配列を必要としない。

2.3 散乱問題

外部から平面波が入射する散乱問題では、全電界を未知量である散乱電界と既知量である入射電界に分解する。

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^s + \mathbf{E}^i \tag{26}$$

これを式(5)に代入して未知量である散乱電界を再び \mathbf{E} と書くと以下ようになる。

$$\nabla \times \mathbf{v}_r \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = - \left[\nabla \times \mathbf{v}_r \nabla \times \mathbf{E}^i - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E}^i \right] \tag{27}$$

右辺に真空中での式(2)に対応する式(28)とベクトル公式(29)を適用すると結局式(27)は式(30)になる。

$$\nabla \times \mathbf{H}^i = j\omega\epsilon_0 \mathbf{E}^i \tag{28}$$

$$\nabla \times \mathbf{E}^i = -j\omega\mu_0 \mathbf{H}^i$$

$$\nabla \times (\phi \mathbf{a}) = \nabla \phi \times \mathbf{a} + \phi \nabla \times \mathbf{a} \tag{29}$$

$$\nabla \times \mathbf{v}_r \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = k_0^2 (\epsilon_r - \mathbf{v}_r) \mathbf{E}^i + j k_0 \nabla \mathbf{v}_r \times Z_0 \mathbf{H}^i \tag{30}$$

$$Z_0 \equiv \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \tag{31}$$

散乱問題は式(30)からわかるように連立一次方程式(12)の右辺ベクトルが変わるだけであり、これは反復計算の前に一度だけ計算すればよい。FDTD法のようにタイムステップごとに計算する必要がなく扱いが簡単である。

2.4 半領域の散乱問題

計算領域が電気定数の異なる二つの領域に分かれこれに平面波が入射するモデルでは、前節で述べた入射波を入射側では入射波+反射波とし透過側では透過波とすると効率よく計算することができる。反射・透過係数はFresnelの公式で与えられる。ただし全反射のときは透過波は指数関数的に減衰するエバネッセント波になる。

2.5 周期境界条件

周期ベクトルを \mathbf{p} で表すと周期境界条件は次式のFloquetの式になる[2][4]。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r} + \mathbf{p}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} \tag{32}$$

差分式(9)で必要になる計算領域の外部の電界は反対側の対応する位置の電界に周期因子をかけて得られる。例えば-X境界の半分外側の電界 E_x は次式となる。

$$E_x\left(-\frac{1}{2}, j, k\right) = \exp\left\{-jk_0 r_x^i(x_{Nx} - x_0)\right\} E_x\left(N_x - \frac{1}{2}, j, k\right) \quad (33)$$

2.6 集中定数

電界点(i+1/2,j,k)に次式の複素比誘電率を設定することによってRまたはCまたはLの集中定数を計算することができる。FDTD法ではLを計算するにはその点の過去の電界を保存する必要があるが、本方法は負の誘電率を代入しても発散しないので簡単に扱うことができる。

$$\epsilon_r = \begin{cases} 1 - j \frac{1}{R\omega\epsilon_0} \frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j \Delta z_k} & (R) \\ \frac{C}{\epsilon_0} \frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j \Delta z_k} & (C) \\ -\frac{1}{L\omega^2\epsilon_0} \frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j \Delta z_k} & (L) \end{cases} \quad (34)$$

2.7 遠方界

計算領域の境界面の電界と磁界から等価原理によって遠方界が計算される。本方法では既に周波数領域の電界と磁界が求められているので、FDTD法のように時間領域から周波数領域に変換する必要がない。

3. 高速化と省メモリー化

3.1 対角スケーリング

連立一次方程式の行列要素(9)においてすべての行の係数を対角成分 a_{ii} で割る対角スケーリングを行うと収束が速くなることが知られている[7]。図4に対角スケーリングがないときとあるときの収束状況を示す。横軸は反復回数、縦軸は残差(図3(5)の左辺)である。これから対角スケーリングによって計算時間が約半分になることがわかる。

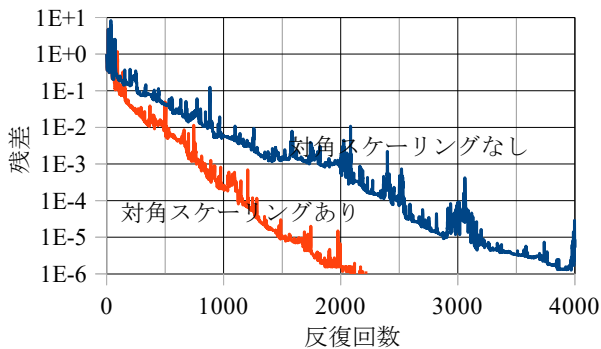


図4 対角スケーリングの有無と収束状況 (Mur 一次)

3.2 並列化

本プログラムはFDTD法[17]と同様にOpenMP, MPI, CUDAによって並列化することができる。図3のBi-CGSTAB法の計算時間の大部分を占める行列ベクトル積とベクトル同士の演算(BLAS Level-1相当)は容易に並列化できる。計算時間の測定はFOCUSスパコン[18]で行った。

(1) OpenMP

一番外側のループ文にOpenMPの並列化ディレクティブを記入するだけで並列化できる。共有メモリー環境(1ノード)で使用する。

(2) MPI

CPUまたはGPUにおけるMPIによる並列化では計算領域を図5のように分割し、反復計算ごとに不足する変数を隣りのプロセスと送受信する。分散メモリー環境(複数ノード)で実行できる。

(3) CUDA

ループ文をgrid,block分割して並列計算する。MPIと併用することによって複数のGPUまたは複数のノードで実行できる。

(4) ベクトル計算

NEC SX-Aurora TSUBASA[19]では内側のループをコンパイラで自動ベクトル化し(ベクトル長256)、外側のループをOpenMPで並列化する。複数のノードのときは領域分割してMPIで並列計算する。

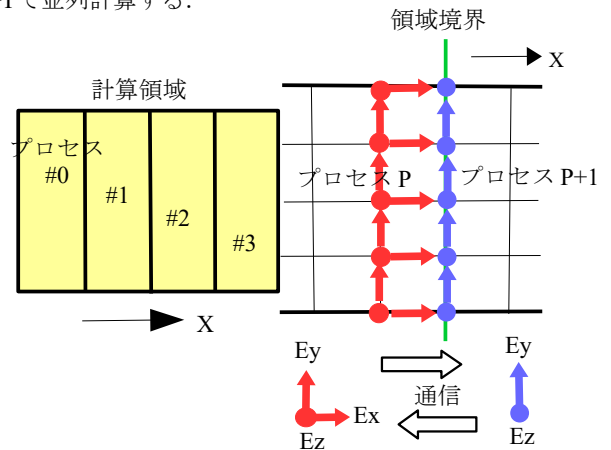


図5 MPIにおける領域分割と通信

3.3 必要メモリー

図3のBi-CGSTAB法を実装すると7個のベクトルが必要になり、その他行列用に13個必要になる。ここでは行列要素を予め計算してメモリーに格納することを"matrixモード", 行列要素は必要になった都度計算することを"nomatrixモード"と呼ぶ。前者は後者の約3倍(=20/7)のメモリーが必要になる。

図6に両方のモードでOpenMPとMPIのコア数(スレッド数またはプロセス数)を変えたときの計算時間を示す。参考までにGPUとSXの結果も記す。図からコア数が20を超えると両モードの計算時間の差は小さい。これはnomatrixモードでは使用メモリーが小さいためにキャッシュメモリーが有効利用されるためと思われる。またGPUとSXはCPUより計算時間が大幅に少なく2ノードではさらに速くなる。

表1はCPU(1コア,gcc:gprof)とGPU(CUDA:nvprof)でメモリーモードを変えたときの計算時間の内訳を示す。GPUではメモリーモードによる違いが少ない。

表1 ハードウェア,メモリーモードごとの計算時間の内訳

メモリーモード	ハードウェア	行列ベクトル積	ベクトル演算	その他
matrixモード	CPU	71%	27%	2%
	GPU	64%	35%	1%
nomatrixモード	CPU	85%	14%	1%
	GPU	68%	32%	0%

以上から、CPUでコア数が多いときとGPUではnomatrixモードで計算すると必要メモリーが1/3に削減でき、かつ計算時間が増大することもない。物性値を1バイトすなわち

256種類以下とすれば結局必要メモリーは(7*16+2)N=114Nバイトになり、FDTD法の(2*4+2)N=10Nの11倍になる。

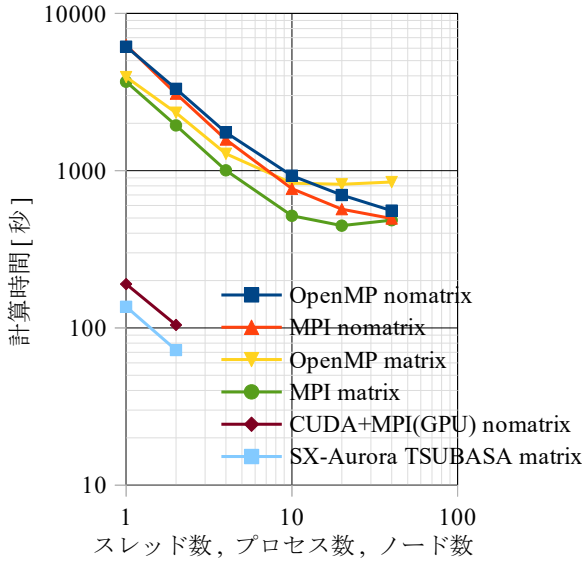


図6 メモリーモードとコア数と計算時間の関係
Nx=Ny=Nz=300, 反復回数=500

CPU : Intel Xeon E5-2698 v4 (20 コア 40 スレッド) × 2
GPU : NVIDIA Tesla P100 (3584 コア, 16GB) × 2 ノード
NEC SX-Aurora Tsubasa Type10B (8 コア) × 2 ノード

4. 計算例

4.1 完全導体球の RCS

図7に完全導体球のRCS(後方散乱断面積)の周波数特性を解析解と比較する。PMLは精度がよいので計算領域を狭くしてもMur一次より計算誤差が小さい。

4.2 周期境界条件

図8に完全導体の平板上に完全導体の突起が並んだ形状に右上から入射角45度でS偏波の平面波が入射したときの電界分布を示す。電界の周期性を見るために3×3列を計算しているが実際は中心の一つでよい。

4.3 金銀ナノ粒子の吸収スペクトル

図9に金と銀の複素比誘電率と吸収スペクトルを示す。金属の誘電率は光の領域では負になる[20]。FDTD法ではDrude分散として扱うと一度の計算で周波数特性が得られるが、正確にはDrude分散にならないので周波数ごとにDrude分散パラメーターを探して繰り返し計算することになる。本方法は負の誘電率をそのまま入力できるのでどのような分散式であっても同じ時間で計算することができる。

4.4 エバネッセント波とリング共振器

全反射によってエバネッセント波を発生させその先に誘電体のリングを置いたとき図10のように特定の周波数で共振する。ここではY方向に周期境界条件を設定した2次元モデルで計算している。

4.5 表面プラズモン共鳴

ガラスの表面に金属の薄膜を貼り全反射させたとき薄膜の特定の厚さと入射角のとき反射率がゼロになる[21]。この現象を表面プラズモン共鳴 (SPR: Surface Plasmon Resonance) と呼びナノオーダーの変化が反射率の入射角特性の変化に現

れる。図11は金と銀の電力反射率の入射角特性である。1次元3層モデルの解析解と比較している。反射率が最小になる入射角の解析解との誤差は金で0.3度、銀で0.1度である。なお、全反射の臨界角は $\sin^{-1}(1/1.515)=41.3$ 度である。

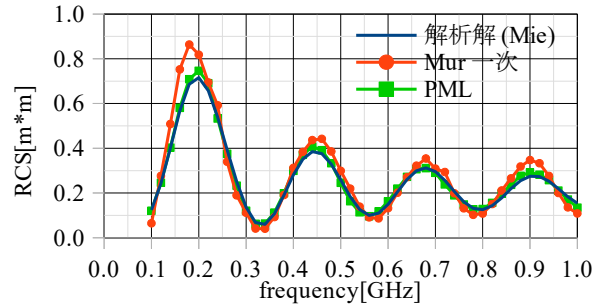


図7 完全導体球のRCSの周波数特性
(r=250mm, Δ=5mm, Mur:200³, PML:150³)

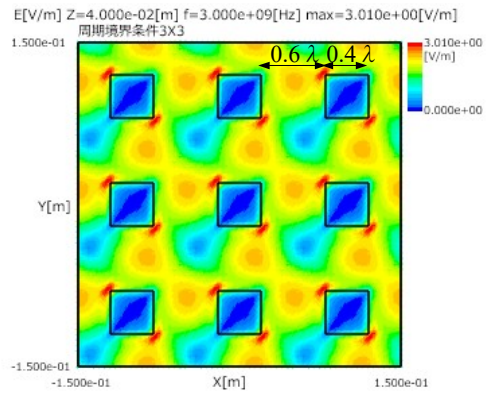
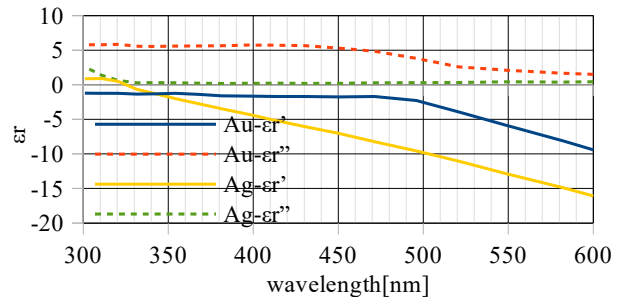
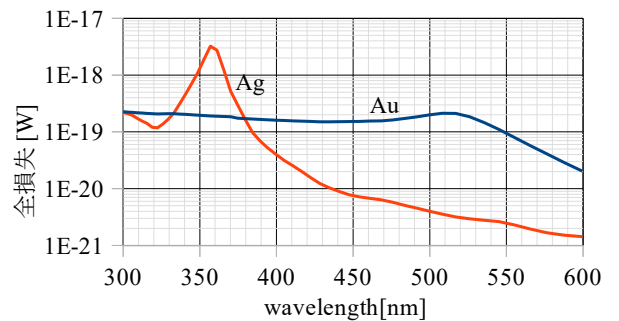


図8 周期境界条件の電界分布
(PEC突起の高さ=0.4λ, 観測面の高さ=0.4λ, θi=φi=45度)



(a) 金と銀の複素比誘電率の波長特性



(b) 金と銀の球の吸収スペクトル (D=20nm, Ei=1V/m)

図9 金と銀の球の吸収スペクトル

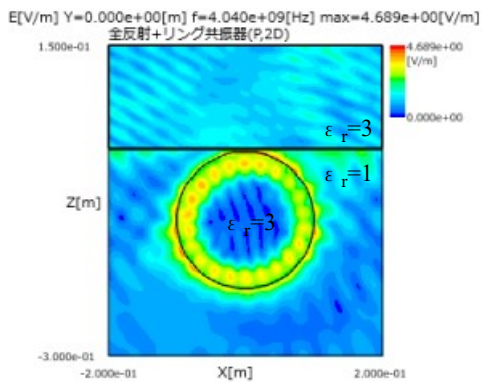


図10 エバネッセント波とリング共振器 (2次元モデル, P偏波, 入射角=40度)

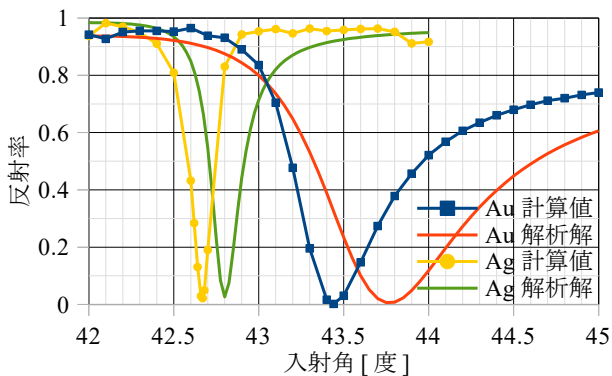


図11 表面プラズモン共鳴の反射率の入射角特性 (2次元モデル, Kretschmann配置, $n=1.515$, $\lambda=632.8\text{nm}$, 薄膜厚さ=50nm, P偏波)

5. まとめ

電磁界の調和界表示を差分法で離散化し複素数非対称疎行列の連立一次方程式をBi-CGSTAB法で解く方法について述べた。プログラムに対角スケールとOpenMP, MPI, CUDAによるCPUとGPUの並列化を実装して高速化した。行列要素を毎回計算すると必要メモリーが1/3に削減され計算時間も増大しないことを示した。

本プログラムはオープンソースとして多数の計算例とともに公開している[22]。FDTD法のOpenFDTD[23]、モーメント法のOpenMOM[24]と同じくWindows環境の実行プログラムと簡易GUIが付属している[25]。

時間領域と周波数領域は双対関係にあるために一方が苦手とする問題を他方が得意とする。本方法は周波数領域の計算であり、時間領域の計算であるFDTD法の不得意な問題に対応できる利点がある。すなわち、1)負の誘電率がそのまま扱える、2)周期境界条件の実装が容易である、3)散乱問題は初期値の変更だけで対応できる、4)PMLの実装が容易である、5)低周波でも計算時間が増えない。問題に応じてFDTD法と本方法を使い分けるとよい。

文 献

[1] K. Kunz and R. J. Luebbers, "Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics," CRC Press, 1993.
 [2] A. Taflov and S. C. Hagness, "Computational Electrodynamics,

The Finite-Difference Time-Domain Method, 2nd edition," Artech House, 2000.
 [3] 宇野亨, "FDTD法による電磁界およびアンテナ解析," コロナ社, 1998.
 [4] 宇野亨 (編著), 何一偉, 有馬卓司, "数値電磁界解析のためのFDTD法-基礎と実践-, " コロナ社, 2016.
 [5] H. A. van der Vorst, "Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems," SIAM J. Sci. and Stat. Comput., vol.13, no.2, pp.631-644, 1992.
 [6] 杉原正顕, 室田一雄, "線形計算の数理," 岩波書店, 2009.
 [7] 金田康正, "並列数値処理-高速化と性能向上のために-, " コロナ社, 2010.
 [8] 藤野清次, 阿部邦美, 杉原正顕, 中嶋徳正, "線形方程式の反復解法," 丸善出版, 2013.
 [9] 櫻井鉄也, 松尾宇泰, 片桐孝洋, "数値線形代数の数理とHPC," 共立出版, 2018.
 [10] 山口隆志, 海老澤瑞枝, 寺西義一, 磯田和貴, "金属ナノ粒子の高速電磁界解析," 東京都立産業技術研究センター研究報告, no.11, 2016.
 [11] 武居周, 吉村忍, 金山寛, "電車内環境中の高周波電磁場の大規模並列有限要素解析," 日本シミュレーション学会論文誌, vol.1, no.1, pp.1-10, 2009.
 [12] 廣谷迪, 美船健, 岩下武史, 村山敏夫, 大谷秀樹, "並列幾何マルチグリッド法による大規模高周波電磁場有限要素解析," 信学論(B), vol.J93-B, no.9, pp.1331-1341, 2010.
 [13] H. K. Rouf, F. Costen, S. G. Garcia, S. Fujino, "On the solution of 3-D frequency dependent Crank Nicolson FDTD scheme," J. Electromag. Waves Appl., vol.23, no.16, pp.2163-2175, 2009.
 [14] H. A. van der Vorst and J. B. M. Melissen, "A Petrov-Galerkin Type Method for Solving $Ax = b$, where A is Symmetric Complex," IEEE Trans. Magn., vol.26, no.2, pp.706-708, 1990.
 [15] T. Sogabe and S. -L. Zhang, "A COCR Method for Solving Complex Symmetric Linear Systems," J. Comput. Appl. Math., no.199, pp.297-303, 2007.
 [16] J. -P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," J. Computational Physics, vol.114, no.1, pp.185-200, 1994.
 [17] 大賀明夫, "FDTD法の並列化技術とオープンソース化," 信学技報, AP2014-41, pp.7-12, 2014年6月.
 [18] 公益財団法人計算科学振興財団, FOCUS スパコン, <https://www.j-focus.or.jp/>
 [19] NEC SX-Aurora TSUBASA, <https://jpn.nec.com/hpc/sxaauroratsubasa/>
 [20] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical Constants of the Noble Metals," Physical Review B, vol.6, no.12, 1972.
 [21] G-Y. Oh, D. G. Kim and Y-W. Choi, "The characterization of GH shifts of surface plasmon resonance in a waveguide using the FDTD method," Optics express, vol.17, no.23, 2009.
 [22] OpenTHFD, <http://www.e-em.co.jp/OpenTHFD/>
 [23] OpenFDTD, <http://www.e-em.co.jp/OpenFDTD/>
 [24] OpenMOM, <http://www.e-em.co.jp/OpenMOM/>
 [25] 大賀明夫, "OpenFDTDとOpenMOMで始める はじめてのアンテナ・シミュレーション," RFワールド, no.39, pp.7-82, CQ出版社, 2017.