

データフロー・アーキテクチャ FDTD/FIT 法専用計算機における吸収境界条件の検討

CONSIDERATION ON ABSORBING BOUNDARY CONDITION FOR DATAFLOW ARCHITECTURE DEDICATED COMPUTER OF FDTD/FIT METHOD

松岡俊佑¹⁾, 藤田和広²⁾, 高田士寛³⁾, 川口秀樹⁴⁾

Shun-suke MATSUOKA, Kazuhiro FUJITA, Tadahiro TAKADA, Hideki KAWAGUCHI

1) 室蘭工業大学電気電子工学科 (〒050-8585 室蘭市水元町 27-1 E-mail : s1354034@mmm.muroran-it.ac.jp)

2) 北海道大学大学院工学研究科 (〒060-8628 札幌市北区北 13 条西 8 丁目, E-mail: s1124077@mmm.muroran-it.ac.jp)

3) 室蘭工業大学電気電子工学科 (〒050-8585 室蘭市水元町 27-1, E-mail : s1324052@mmm.muroran-it.ac.jp)

4) 室蘭工業大学電気電子工学科 (〒050-8585 室蘭市水元町 27-1, E-mail : kawa@mmm.muroran-it.ac.jp)

Authors have been working in development of the FDTD/FIT dedicated computer with dataflow architecture for achievement of high performance computation of microwave numerical simulation. In the dataflow architecture machine, very large hardware size is required. Then, implementation of absorbing boundary condition is one of most serious problems because it takes too much amount of hardware comparing with vacuum region. This paper presents a new type of the absorbing boundary condition, dielectric material boundary condition for use in the FDTD/FIT dataflow machine. It is shown that the dielectric material boundary condition gives us enough absorbing performance to be applied for practical problems.

1. はじめに

近年の PC の計算性能向上、および、可視化技術等の進展にともない、電磁界解析も多くの場面で用いられるようになった。実際、渦電流、マイクロ波解析の商用ソフトなどは発電機・電動機、電子素子・マイクロ波素子の設計開発に広く使用され、多くの実績をあげつつある。そしてそれにともない、電気電子製品の部品やある一部分のみの解析に加え、製品全体の動作シミュレーションなど、電磁界解析にはこれまでにもましてさらに大規模・高速計算が要求されるようになっている。実際、電気電子製品では、インピーダンス整合など、単体の部品のみでは必ずしもシミュレーションであらかじめ把握できない要素もあり、製品全体とまではいかなくともいくつかまとまった大きさの系を解析することが必要なケースが多く発生する。このような要求に連動し、近年、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 技術も盛んに研究されている。HPC 技術の研究そのものは、計算機が発明されて以来論じられているものであり、量子計算機、光計算機、DNA コンピュータなどの全く新しいタイプの計算方式の議論もあるものの、やはり多くは、実用を意識し、ベクトル・パラレル方式のスーパーコンピュータや PC クラスター・グリッドコンピューティングシステムに分類される従来方式のものである。このとき、上記の電磁界解析の製品設計応用という観点からすると、世界的にも限られた数のリソースであるスーパーコンピュータでは、回路設計とシミュレーションを頻繁に繰り返しながら行うような開発環境とは相容れない。

また、グリッドコンピューティングシステムのようなネットワーク経由での CPU 結合方式では、電磁界解析など場のシミュレーションにおける CPU 間の頻度の高いデータのやり取りのある計算には必ずしも十分な性能が發揮されない。これに対し、実用的なもう一つの HPC 技術として、専用計算機という方式がある。専用計算機方式は、計算したい対象専用に計算機のアーキテクチャを構成するもので、上記 2 方式にあるような汎用性という利点は失われるものの、対象とした目的に関しては、比較的安価にかつ高性能に計算を実現できるという特徴がある。実際、この方式の計算機は、銀河のシミュレーションや分子動力学のシミュレーションで実現され、多くの実績が報告されている。^{(1),(2)} 電磁界解析の分野でも、とりわけ、マイクロ波のシミュレーションをターゲットとした FDTD/FIT 法専用計算機の開発がいくつか行われてきた。⁽³⁾⁻⁽⁶⁾ 実際、電磁界を記述するマクスウェル方程式には、多くの並列性が潜在し、それを最大限に引き出すことにより効果的に高速計算が実現できる。FDTD/FIT 法専用計算機の方式としては、これまで、大別して、大規模計算を目的としたアーキテクチャ (メモリマシン)⁽³⁾⁻⁽⁵⁾ と高速計算を目的としたアーキテクチャ (データフローマシン)⁽⁶⁾ の 2 方式が提案されている。

本研究では、これら一連の研究において、データフロー方式での吸収境界条件の実現方法について検討したので報告する。吸収境界条件とは、開放領域の問題を有限な領域で取扱うために仮想的に設定した境界で電磁波が反射なく

通り抜けていくようにするための境界条件をさし、真空の方程式に比べ複雑なスキームの計算が必要となる。データフロー方式の専用計算機は、もともとハードウェアサイズが大きく、したがって、スキームが複雑でハードウェア化に際してサイズが大きくなると予想される吸収境界条件をいかに小さなサイズで実現できるかが重要な問題となる。

2. FDTD/FITデータフローマシン

マイクロ波の現象は多くの場合は3次元であるが、吸収境界の検討においては2次元のケースでも本質的には変わらないため、ここでは2次元TE_zモードを例にFDTD/FIT法とデータフローマシンの方式をまとめておく。TE_zモードのマクスウェル方程式は、電場を**E**、磁場を**B**、光の速度をcとして、

$$\frac{\partial B_z}{\partial y} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t} \quad (1-1)$$

$$-\frac{\partial B_z}{\partial x} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (1-2)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\frac{\partial B_z}{\partial t} \quad (1-3)$$

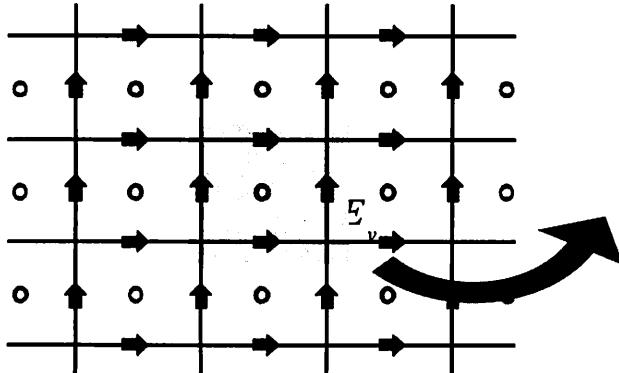
となる。ここで、数値計算における未知数として、**E**、**B**そのもののかわりに、規格化した値、 $e = E/c$, $b = B$ を用いるとし、またFDTD/FIT法の安定条件として、時間差分間隔 Δt と空間差分間隔 Δl を $c \Delta t = \Delta l / 2$ となるようになると、式(1)は、

$$e_{xi,j}^n = e_{xi,j}^{n-1} + \frac{1}{2}(b_{zi,j}^{n-1/2} - b_{zi,j-1}^{n-1/2}) \quad (1-1)'$$

$$e_{yi,j}^n = e_{yi,j}^{n-1} - \frac{1}{2}(b_{zi,j}^{n-1/2} - b_{zi-1,j}^{n-1/2}) \quad (1-2)'$$

$$b_{zi,j}^{n+1/2} = b_{zi,j}^{n-1/2} - \frac{1}{2}(e_{xi,j}^n + e_{yi,j+1}^n - e_{xi,j+1}^n - e_{yi,j}^n) \quad (1-3)'$$

となる。ここに、 i, j は、それぞれx, y方向のグリッドのインデックス、 n は、時間差分のインデックスを表す。F



(a) Electromagnetic field allocation in FDTD/FIT

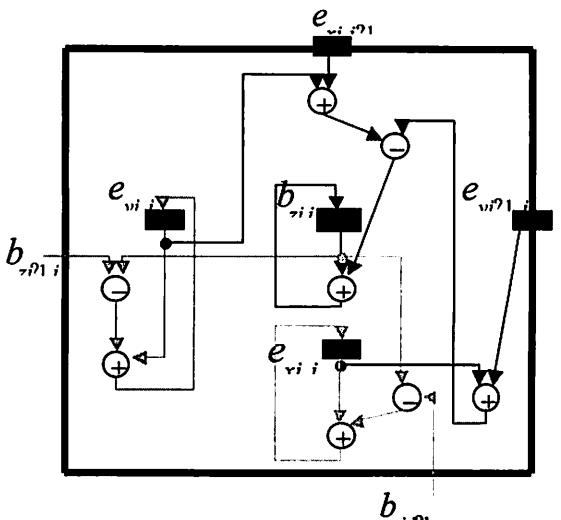
D T D / F I T 法がハードウェア化に向いている大きな要因の一つが時間領域でのタイムステップ計算スキームである。すなわち、式(1)にしたがって、電場と磁場を交互に計算することによりマイクロ波の現象が時間領域でシミュレーションされるが、これは同時に、境界条件を満たすよう全領域の場の分布が決まる静的な場や定常場とは異なり、行列計算が不要となるという特徴を有し、ハードウェア化に際しては論理回路が簡単となり実現しやすいという特長を有することになる。データフローーアーキテクチャのFDTD/FITマシンでは、式(1)'のスキームを実現する回路として、まず、電場、磁場成分をグリッド内でFig.1(a)のように配置し、そしてその各グリッドでの電場や磁場の値をそれぞれ個別に格納するレジスタをFig.1(b)のように同じ配置で用意し（青色、赤色がそれぞれ電場、磁場を格納するレジスタを表す）それらを同図の論理回路のように接続することによりハードウェアを構成する。この方式により、1クロックで式(1-1)', 式(1-2)'の電場に関する方程式が全領域にわたって同時に更新でき、よって磁場も含めて2クロックで全領域の1タイムステップ分の場が計算できる。すなわち、マクスウェル方程式のもつ電場、磁場のx, y, z成分の独立性という並列性と、異なる場所の場の値の独立性という並列性を最大限に引き出した超高速数値計算アーキテクチャが実現できる。

3. 吸収境界条件

従来の吸収境界条件

マイクロ波に特徴的な境界条件に吸収境界条件がある。実際、計算機で取扱う解析領域はいずれにしても有限であり、また、完全に導体に囲まれた領域というのは現実的でなく、マイクロ波が反射なく通り抜けていくようななんらかの境界条件（吸収境界条件）がFDTD/FIT法では必須となる。そして、この条件の吸収性能は、開放解析領域をいかに小さくとれるかに関連し、計算の高速化、省メモリ化にも大きく関わる。

FDTD/FIT法の吸収境界条件としては、大別して微分型および媒質型の2つに分類できる。微分型の吸収境



(b) Digital circuit for FDTD/FIT dataflow machine

Fig.1 Overview of FDTD/FIT dataflow machine

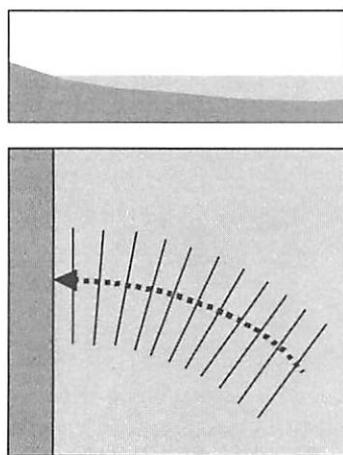
界条件とは、境界において、領域から領域外に向かう波動方程式の進行波解が満たされるような条件を設定するもので、代表的なものに $M_u r$ 吸收境界条件がある、また、媒質型の吸收境界条件とは、解析領域の外側に理想的な電波吸收体として、周波数に依存せず、また、反射なく電磁波が入射しつつ次第に減衰していくような（現実には存在しない）損失媒質を配置するスキームで、代表的なものに PML 吸收境界条件がある。前者は、境界に対し垂直に進行してくる波に対しては非常によい吸収性能を示すものの斜め入射の波に対してはあまり吸収性能がよくなく、高次式の適用が必要となるがこれは領域のコーナーにおいて適用が困難で吸収性能が上がらないという欠点がある。また、後者は、吸収性能そのものは全体として非常によいが、やはり十分な吸収性能を実現するためには最低でも解析領域外に 10 レイヤ程度は必要で、それに加え PML レイヤ内では通常の FDTD / FIT シキムより倍のメモリを必要とすることもあり、境界条件の設定が複雑かつ多少多めのメモリが要求されるという欠点がある。現在、標準的に用いられているのは、はやり吸収性能のよい後者の PML 吸收境界条件で、実際、多くの産業応用において十分な実績が残されている。一方、FDTD / FIT 法専用計算機での吸収境界条件という観点からは、まず、上述のメモリマシンのようなアーキテクチャでは、ハードウェアサイズは大きくなってしまってもその絶対量はそれほど大きくなく、既存の Field Programmable Gate Array (FPGA) などの集積度からしてまだ十分に搭載できる余裕があり、ソフトウェア同様 PML 吸收境界条件が有効と考えられる。しかしながら、データフローマシンのアーキテクチャでは事情は全く異なり PML 採用に起因するハードウェアサイズの増大は無視できないものであり詳細な検討を有する。実際、これまで、著者らはこれら両方式のデータフローマシンへの吸収境界の適用を検討してきたが、やはり予想通り、 $M_u r$ 吸收境界条件は、領域コーナーでの吸収性能があがらず、PML はハードウェアサイズが大きくなりすぎ、現状の FPGA の集積度では実現は不可能であることが判明している。このような背景から本研究では、これら 2 つのタイプの中間的な性格をもつ誘電体吸収境界条件を提案し、C 言語によ

りその吸収性能など実用性を検討したので報告する。
誘電体吸収境界条件

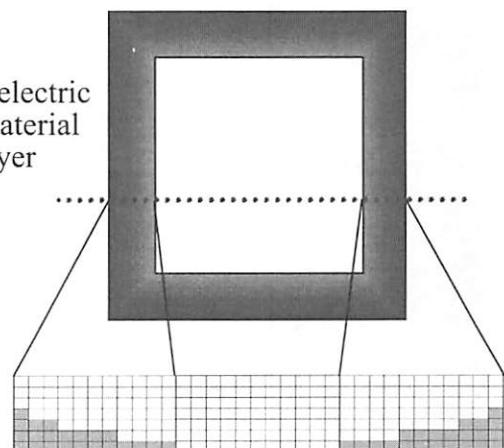
$M_u r$ 吸收境界条件の最大の問題点は斜め入射の波への対処である。この対処方法として、Fig.2 (a) の遠浅の海岸に波がやってくるときのアノジーを用いる。遠浅の浜辺では、例え沖から波が斜めにやってきたとしても海岸に近い浅いところほど波の進行速度が低くなっているため、結果として波の進行方向は曲げられ海岸に到達するころには垂直入射となる。電磁波は誘電体など媒質があると進行速度は真空のものより遅くなることに着目すると、このアノジーと同じ状況は、Fig.2 (b) のように境界に向かって次第に誘電率が増加するよう誘電体媒質を配置することにより実現でき、そして境界で垂直入射となった波に対しては、 $M_u r$ 1 次吸収境界条件を設定すれば、十分な吸収性能のよい吸収境界条件が構成できることが予想される。そして、この方式であると、 $M_u r$ 1 次吸収境界条件および標準的な誘電体媒質のみを使用しているためハードウェア化の際の回路規模は PML に比べ大幅に削減できることが予想される。また、 $M_u r$ 2 次吸収境界条件単独使用時のような領域のコーナーにおける特別な精度の劣化もない吸収境界条件になると考えられる。このとき、これに加え損失媒質すなわち複素誘電率を用い屈折のみならず散逸を媒質内で発生させれば全体としてさらにより吸収境界条件が実現できることも予想される。しかしながら、誘電体媒質のみの場合、式(1)' 右辺の $1/2$ のファクタにさらに乗算回路が必要になるのに加え、複素誘電率とした場合は、右辺第一項にも乗算回路を追加する必要がありさらにハードウェアサイズが大きくなる。このため、本稿ではまず、誘電体媒質のみでの吸収境界条件の実現について検討する。

誘電体吸収境界条件の光学光線近似による考察

Fig.3 には、光学光線近似で同誘電体層を電磁波が進む際のレイヤ数と垂直入射の度合いを調べたものを示す。Fig.3 (a) のように、解析領域から誘電体層に角度 θ_i で入射した場合にそれが同図に示した光学の屈折の公式にしたがって誘電体層で屈折されていったとき、最外の境界でどの程度まで垂直入射に近づくかをレイヤ数 n の関数として計算したものが Fig.3 (b) のグラフに示されている。

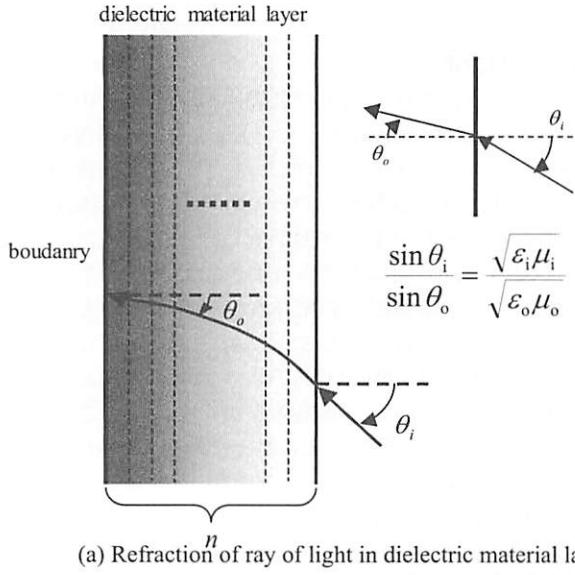


(a) Incident wave front at beach

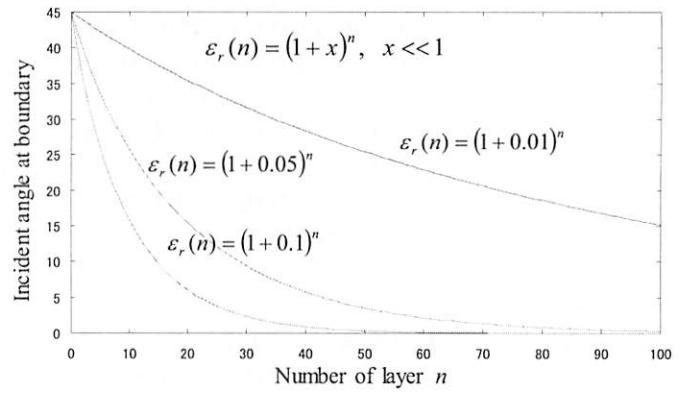


(b) Dielectric material layer ABC

Fig.2 Concept of dielectric material absorbing boundary condition



(a) Refractionⁿ of ray of light in dielectric material layer



(b) Numerical analysis of change of incident angle

Fig.3 Dependence of incident angle of wave front on number of layer

ただしその際、急激な誘電率の変化は同時に大きな反射も引き起こしてしまうため、比誘電率の変化の割合は、領域から境界に向かってレイヤ数 n とともに、

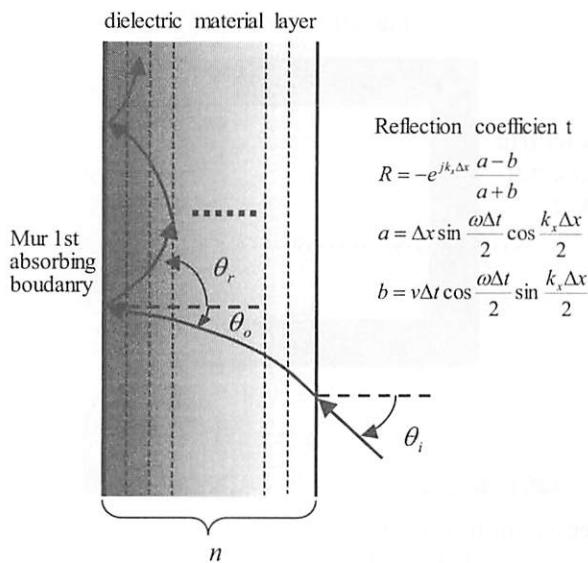
$$\varepsilon_r = (1+x)^n \quad (2)$$

なる式にしたがって徐々に増加させるものとし、 $x = 0.01, 0.05, 0.1$ の 3通りの値に対してプロットしている。同図からわかるように、 x の値を比較的大きくても、10数レイヤ波が進んだ時点ですら 10 度前後の角度が残り、完全な垂直入射は望めないことがわかる。一方しかしながら、実際には、本方式の場合、最外の境界では Mur 1 次吸収境界条件が課されるため、そこでいくらか吸収がおこり、例え最外の境界に斜め入射した光線も Fig.4 (a) のように、かえる跳びのように境界に沿って伝播し、やがて減衰していくことが予想される。実際、FDTD/FIT 法で知られている Mur 1 次吸収境界条件の反射係数 (Fig.4 (b)) を用い、これを光学近似で計算すると、Fig.3 (b) の x のどのような値に対しても高々 2 レイヤ程度までしか境界から

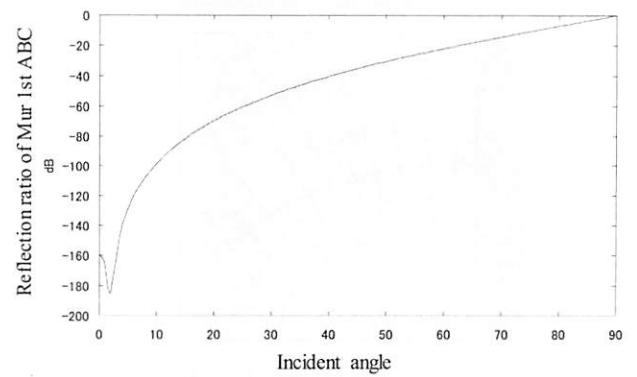
離れずかえる跳びをくりかえし、やがてすべて吸収されいくことがわかった。以上、光学光線近似の範囲では、本方式の有効性が確認できた。最後に、実際に FDTD/FIT 法による吸収性能を調べたものを示す。

4. 数値計算結果

本稿では、吸収性能の検討が目的であるので簡単のため式(1)にて示した 2 次元 TEz モードをもちいて、誘電体吸収境界について調べる。解析モデルは、Fig.5 (a) に示すような正方形領域の中心に磁気ダイポールソースがあり、そこから周波数 1 GHz の正弦波が放出されるものを用いた。吸収性能の計算では、理想的な場合として、Fig.5 (b) の枠で囲んだ解析領域よりもはるかに大きな領域の計算を行いその外側の境界からの反射波がこの Fig.5 (b) の解析領域にまで戻ってこない時間内での場の波形を用い、それと本手法との差を誤差として評価した。また、このとき、必ずしも誘電体のみを変化させる必要はなく、透磁率も同じく電磁波の速度を変化させ得る要因であり、実際、Fig.1(a) のように電場と磁場は半グリッドずれて配置されていることに着目すると、透磁率も同時に変化させた方が全体として滑らかに伝播速度を変えられるため、以降の数値計算では全て透磁率も (2) と同じ割合で境界に向かって変化させる



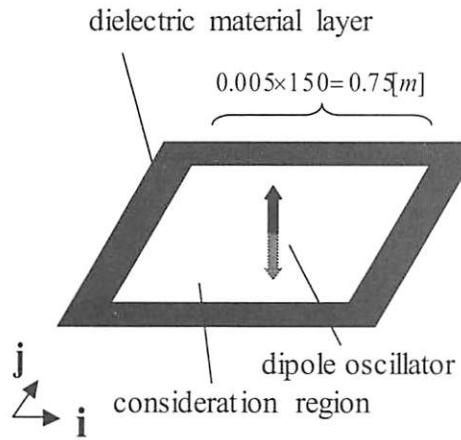
(a) Behavior of ray of light around Mur 1st ABC



(b) Reflection of Mur 1st ABC

Fig.4 Multiple reflection of incident wave at dielectric material layer

ものとする。Fig.6 には、式(2)の x の値を 0.001, 0.007, 0.015 ととった場合に対し、Fig.5(b) のサンプル点 1, 2 での電場の信号波形のそれぞれの誤差を示す。すなわち、 x の値としては、サンプル点 1 では 0.001 が、サンプル点 2 では 0.007 が最も誤差の小さい値となっており、場所により最も適した x の値は異なる。ここでは、これらのサンプル点以外の複数の場所での計算も実施し全体として極端に誤差が大きくなることのなかつ 0.007 を採用することとした。また、Fig.7 は、 $x=0.007$ とした上で、誘電体境界層のレイヤ数を変化させた場合のサンプル点 1, 2 における信号波形の誤差をプロットしたものである。レイヤ数もやはり場所によって最適な値は異なり、全ての場所で最適となるものは抽出できないものの、これらのサンプル点以外の複数の場所での計算も実施し最終的に 20 レイヤが最もよい値として採用することとした。以上、誘電体吸収境界のパラメータのうち誘電率の変化率として $x=0.007$ を、レイヤ数として 20 という値を最適な値として、次に、本方式を、従来の吸収境界条件と比べたものを Fig.8 に示す。従来の方法としては、代表的な μ_r 2 次吸収境界条件、および、PML 吸収境界条件を用いた。Fig.8(a) は、理想的な波形と誤差部分を併記したもの、Fig.8(b) は、スケールを拡大し誤差部分の波形を詳細に表示したものを示す。実際、本研究で提案した誘電体吸収境界条件は従来の実績のあるものにくらべ絶対値で 2 倍程度誤差が大きくなっているものの、誤差のオーダーとしては大差なく、また、波形も安定していることがわかる。(ただしこのとき、領域コーナーではやはり μ_r 2 次吸収境界条件の精度はあがらず単純に μ_r 1 次吸収境界条件を用いた場合と同程度に悪くなる。) さらに、上記の計算は、領域が正方形かつ波源が中心にあるというきわめて対称性がよく、斜め入射の割合も比較的緩やかなケースであるため、もう少し一般的なケースとして、Fig.9(a) に示すような波源が中心でなく、また、散乱体として L 字型の導体が領域内にある場合の吸収性能の評価をするため Fig.8 と同様な計算を行ったものを Fig.9(b) に示す。同図から、領域右角など斜め入射の度合いは強まる場所が発生するものの、ここでもやはり、吸収性能としては誘電体吸収境界条件は十分実用に耐えられるものであると考えられる。



(a) Numerical model of 2D TEz mode em fields

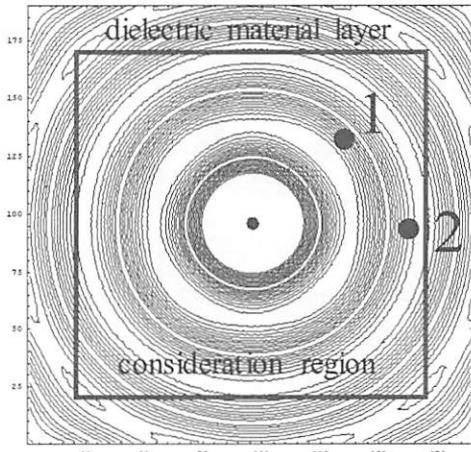
Fig.5 Numerical simulation of 2D TEz mode em fields excited by magnetic dipole oscillator

5. まとめ

データフローーアーキテクチャの FDTD/FIT 法専用計算機に適した吸収境界条件として、誘電体吸収境界条件を提案し、その吸収性能に関し、光学光線近似での評価、および、2 次元 TEz モードでの実際の FDTD/FIT 法の数値計算による評価を行った。従来の μ_r 2 次吸収境界条件、PML 吸収境界条件にくらべファクタ一分程度の吸収性能の劣化はみられるものの、オーダーとしては同程度で、かつ、安定した吸収が行えることがわかった。今後の課題として、今回は、誘電率・透磁率のみの変化で本方式の吸収境界条件を実現したが、回路規模はさらに大きくなるものの損失媒質の要素を導入しさらによい吸収性能を探す余地がまだあり、まずはこの方向での検討を行う予定である。また、同時に、これまで検討してきた専用計算機への導入も並行して行っていく予定である。

参考文献

- [1] J.Makino GRAPE project: special-purpose computers for many-body simulations, Comput. Phys. Commun. (Netherlands), 45-54, vol.139, no.1, 1 Sept. 2001
- [2] Susukita, R., Ebisuzaki, T., Elmegreen, B., Furusawa, H., Kato, K., Kawai, A., Kobayashi, Y., Koishi, T., McNiven, G., Narumi, T., Yasuoka, K., Hardware accelerator for molecular dynamics: MDGRAPE-2, Comp. Phys. Commun. 155, 115-131 (2003).
- [3] P. Placidi, L. Verducci, G. Matrella, L. Roselli and P. Ciampolini, A Custom VLSI Architecture for the Solution of FDTD Equations, IEICE Trans. Electron., vol.E85-C, no.3, pp.572-577, March 2002.
- [4] P. R.N.Schneider, L.E. Turner, and M.M.Okoniewski, Application of FPGA technology to accelerate the Finite Difference Time-Domain(FDTD) method, Proc. of The Tenth ACM International Symposium on Field Programmable Gate Arrays, Monterey, CA, 2002.
- [5] J.P. Durbano, F. E.Ortiz, M. S. Miroznik, "Implementation of Three-Dimensionl FPGA-Based FDTD Solvers: Proc. 11th Annual IEEE Symp. on Field-Programmable Custom, Computing Machines. FCCM 2003, 269-70, x+312, 2003
- [6] S.Matsuoka, K.Ohmi and H.Kawaguchi, Study of a Microwave Simulation Dedicated Computer, FDTD/FIT Data Flow Machine, IEICE Trans. Electron., Vol.E86-C, No.11 Nov. (2003), pp.2199-2206.



(b) Numerical result of electric field intensity distribution

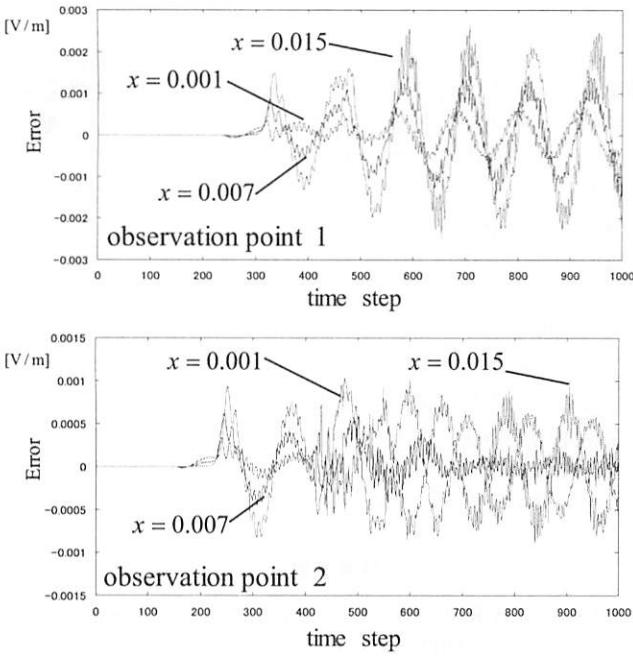


Fig.6 Error dependence on change ratio of ϵ and μ

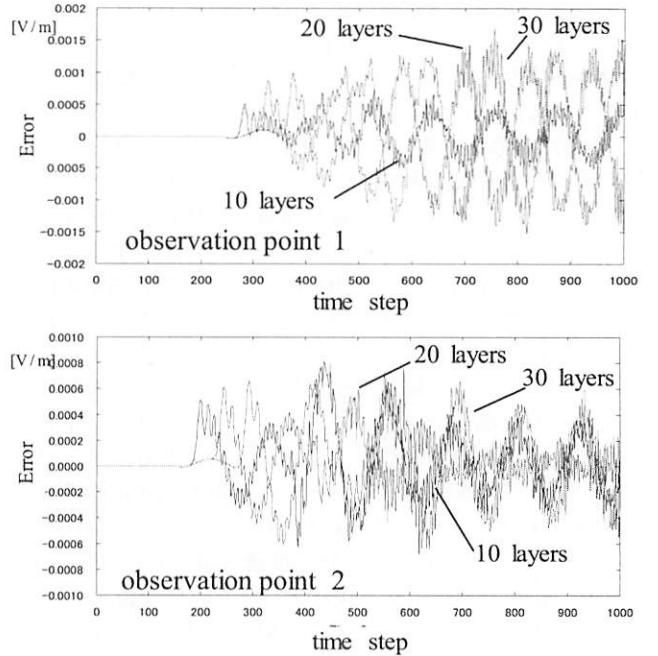
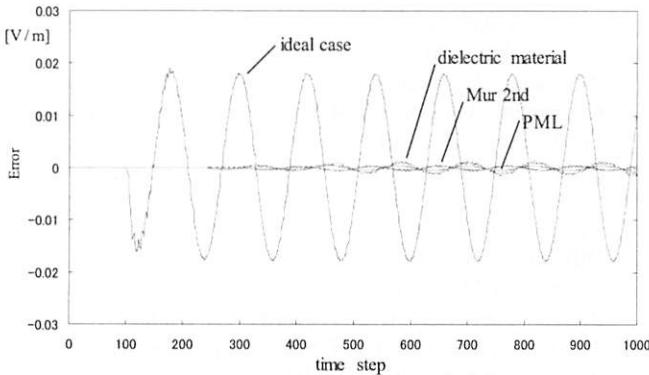
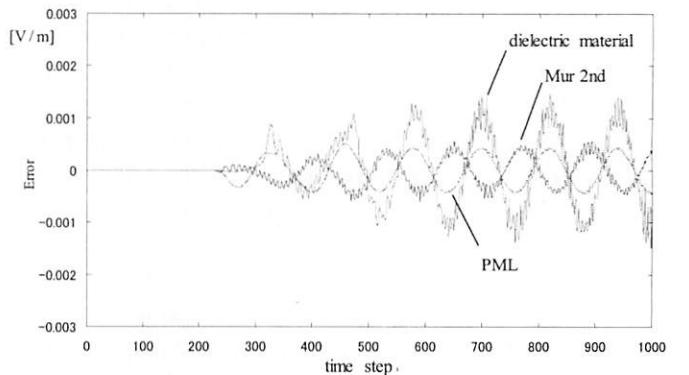


Fig.7 Error dependence on number of dielectric layer

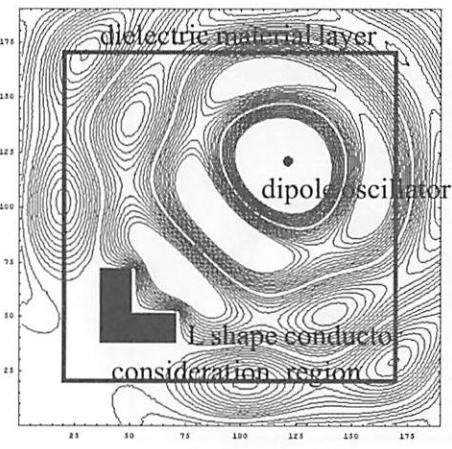


(a) Ideal signal and error of presented & conventional ABCs

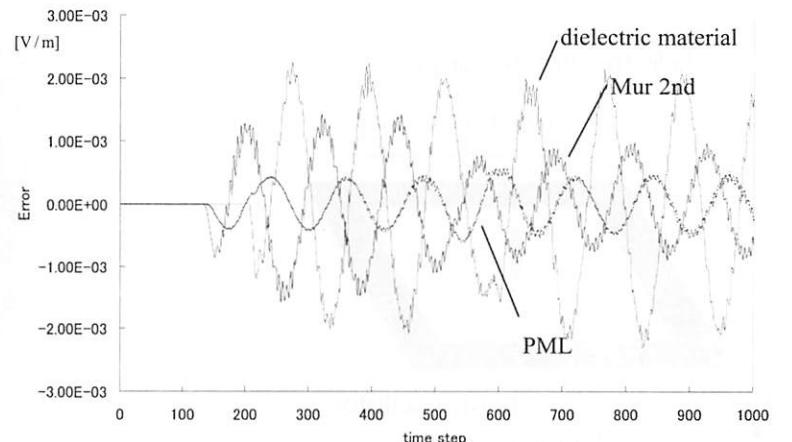


(b) Error of presented & conventional ABCs

Fig.8 Comparison of presented ABC with conventional ABC (for symmetric fields)



(a) Numerical model of 2D TEz mode em



(b) Error of presented & conventional ABCs

Fig.9 Comparison of presented ABC with conventional ABC (for non-symmetric fields)