

大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWaveの開発

並木 武文* 松原 聖**

Electro-magnetic wave Simulation Software : Advance/ParallelWave

Takefumi Namiki* and Kiyoshi Matsubara**

1990年代中頃以降、電磁波解析に関する研究が盛んになるとともに、さまざまな電磁波解析ソフトウェアがリリースされている。これには、移動体通信の普及に伴って高周波デバイス分野でのニーズが増大したことや、電子機器のクロック周波数高速化に伴って電磁環境分野でのニーズが増大したことが背景にある。さらに今日では、さまざまな電磁波解析技術の発展によりその応用分野は広がり、計算機性能の向上と相まってその適用範囲はますます拡大している。

当社では、並列計算機での大規模解析を目的とした電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWaveを開発している。本稿では、その解析手法について説明するとともに大規模モデル（差分格子数 48 億）の計算性能を紹介する。

Key word: 電磁波解析、FDTD 法、時間領域、差分法、Maxwell 方程式、並列計算

1. はじめに

電磁波解析とは、電磁波の支配方程式である Maxwell 方程式をコンピュータシミュレーションによって解き、電磁波の挙動とそれを起源とする物理諸量を算出することである。電磁波解析の手法には、モーメント法、境界要素法、有限要素法、差分法などがあり、それぞれに周波数領域の解法と時間領域の解法があるが、Advance/ParallelWave が採用しているのは時間領域差分法（FDTD 法）[1]である。以下にその基本原理と解析のためのさまざまな条件を説明する。

2. 基礎方程式

本ソフトウェアの基礎方程式は、式(1)(2)に示し

$$\varepsilon \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) = \text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$$\mu \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (2)$$

*アドバンスソフト株式会社 事業開発室 室長

General Manager General Planning Division,
AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長
President, AdvanceSoft Corporation

た Maxwell 方程式の回転の式である。

ここで、諸量の定義は次の通りである。

$\vec{E}$	電界ベクトル
$\vec{H}$	磁界ベクトル
$\vec{r}$	空間座標
t	時刻
ε	誘電率
σ	導電率
μ	透磁率

これらの偏微分方程式を、時間と空間について差分法で解くのが FDTD 法である。差分法で解くために、3次元空間を図1左のような直交差分格子で分割する。この場合、格子間隔は不均一でも構わない。さらに、電磁界成分を差分格子上に図1右のように配置する。この格子は Yee 格子と呼ばれ、式(1)(2)の差分表現と完全に適合する。また、媒質定数（誘電率、導電率、透磁率）は、各格子（図1左における個々の直方体）に設定する。

以下に、直交座標系における、等方性かつ無分散性の媒質に対する定式化を示す。

式(1)において、電界の x 成分について記述すると式(3)のようになる。

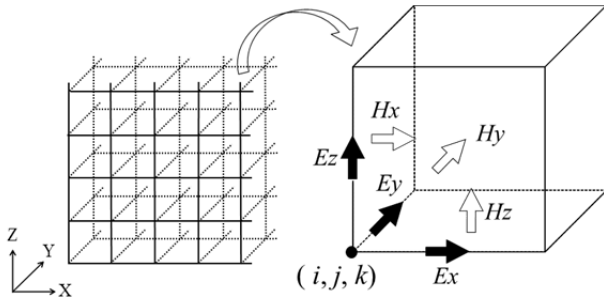


図 1 FDTD 法における差分格子と電磁界配置

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3)$$

これを差分表記し整理すると次式のようにになる。

$$E_x^{n+1/2}_{(i+1/2,j,k)} = \frac{2\varepsilon_{(i,j,k)} - \sigma_{(i,j,k)}\Delta t}{2\varepsilon_{(i,j,k)} + \sigma_{(i,j,k)}\Delta t} E_x^{n+1/2}_{(i+1/2,j,k)} + \frac{2\Delta t}{2\varepsilon_{(i,j,k)} + \sigma_{(i,j,k)}\Delta t} \cdot \left(\frac{H_z^{n+1/2}_{(i+1/2,j+1/2,k)} - H_z^{n+1/2}_{(i+1/2,j-1/2,k)}}{\Delta y(j)} - \frac{H_y^{n+1/2}_{(i+1/2,j,k+1/2)} - H_y^{n+1/2}_{(i+1/2,j,k-1/2)}}{\Delta z(k)} \right) \quad (4)$$

式(4)は、格子点 $(i+1/2, j, k)$ に位置する時刻 $n+1$ の電界の x 成分が、同じ格子点に位置する時刻 n の電界の x 成分の値と、隣接する格子点に位置する時刻 $n+1/2$ の磁界の z 成分および y 成分の値によって更新されることを意味している。電界の y 成分、 z 成分も同様に定式化される。

式(2)において、磁界の x 成分について記述すると式(5)のようにになる。

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (5)$$

これを差分表記し整理すると次式のようにになる。

$$H_x^{n+1/2}_{(i,j+1/2,k+1/2)} = H_x^{n+1/2}_{(i,j+1/2,k+1/2)} + \frac{\Delta t}{\mu} \cdot \left(\frac{E_y^n_{(i,j+1/2,k+1)} - E_y^n_{(i,j+1/2,k)}}{\Delta z(k)} - \frac{E_z^n_{(i,j+1,k+1/2)} - E_z^n_{(i,j,k+1/2)}}{\Delta y(j)} \right) \quad (6)$$

式(6)は、格子点 $(i, j+1/2, k+1/2)$ に位置する時刻 $n+1/2$ の磁界の x 成分が、同じ格子点に位置する時刻 $n-1/2$ の磁界の x 成分の値と、隣接する格子点に位置する時刻 n の電界の y 成分および z 成分の値によって更新されることを意味している。磁界の y 成分、 z 成分も同様に定式化される。

式(4)(6)における半整数の表記は、実際のプログラムでは、 $i+1/2 \Rightarrow i, j+1/2 \Rightarrow j, k+1/2 \Rightarrow k$ として記述する。

電界の x, y, z 成分の更新と磁界の x, y, z 成分の更新を交互に実行すること（リープフロッグ・アルゴリズム）で、格子上に配した電磁界の値を逐次的に計算し、電磁界の時系列データを算出することができる。このアルゴリズムに、後述する境界条件や波源の計算を加えたフローチャートを図2に示す。ここで、 T は時刻、 Δt は時間刻み幅である。

なお、Maxwell 方程式の発散の式は、これらのアルゴリズムによって自動的に満足される。

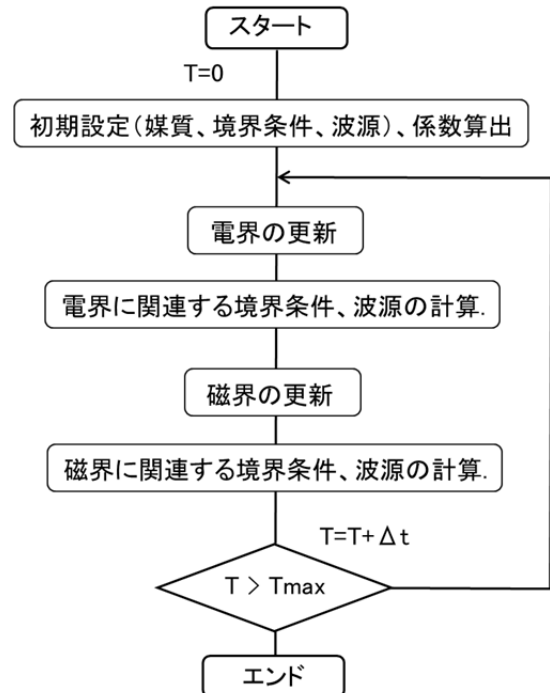


図 2 FDTD 法のフローチャート

3. 安定条件

FDTD 法は、時間積分手法としては陽解法であるため、アルゴリズムが単純で演算量が少ないが、

数値計算の安定性に条件がある。この条件は CFL (Courant- Friedrichs-Lewy)条件 [2]と呼ばれ、次式で表現される。

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{(1/\Delta x_{\min})^2 + (1/\Delta y_{\min})^2 + (1/\Delta z_{\min})^2}} \quad (7)$$

ここで、 $\Delta x_{\min}$ 、 $\Delta y_{\min}$ 、 $\Delta z_{\min}$ はそれぞれ、 x 、 y 、 z 方向の最小格子間隔である。また、 v は電磁波の速度であり、真空中では光速となる。CFL 条件を満たさない場合、計算は直ちに発散する。

なお、CFL 条件の制約を受けない FDTD 法として ADI-FDTD 法 [3] [4] が考案されている。これは拡散方程式の解法として知られていた交互方向陰解法 (Alternating Direction Implicit Method) を、Maxwell 方程式を解く FDTD 法に適用したもので、無条件安定なアルゴリズムである。

4. 異種媒質の境界処理

解析領域に異なる媒質が複数存在する場合、数値計算の初期設定において、媒質境界における媒質定数 (誘電率、導電率、透磁率) の平均化が必要になる。図 3 を用いて誘電率および導電率の平均化を説明する。ここで、点線で示した部分は差分格子、実線で示した部分は電界 Ez の実効格子である。4 つの差分格子の誘電率、導電率をそれぞれ ϵ_A 、 ϵ_B 、 ϵ_C 、 ϵ_D および σ_A 、 σ_B 、 σ_C 、 σ_D とすると、実効格子内で電界 Ez は一定とみなすので、電磁気学的な考察により、等価的な誘電率 ϵ_{eff} および導電率 σ_{eff} は式(8)(9)のようになる。ここで、 r_A 、 r_B 、 r_C 、 r_D はそれぞれ各差分格子の体積比率である。

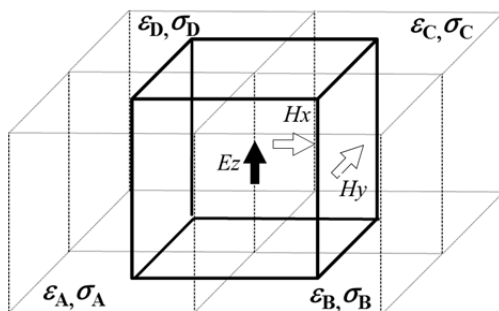


図 3 誘電率および導電率の平均化

$$\epsilon_{eff} = r_A \epsilon_A + r_B \epsilon_B + r_C \epsilon_C + r_D \epsilon_D \quad (8)$$

$$\sigma_{eff} = r_A \sigma_A + r_B \sigma_B + r_C \sigma_C + r_D \sigma_D \quad (9)$$

電界 Ex 、 Ey の実効格子に対する平均化も同様である。

続いて、図 4 を用いて透磁率の平均化を説明する。ここで、点線で示した部分は差分格子、実線で示した部分は磁界 Hx の実効格子である。上下の差分格子の透磁率をそれぞれ μ_A 、 μ_B とすると、実効格子内で磁界 Hx は一定とみなすので、電磁気学的な考察により、等価的な透磁率 μ_{eff} は式(10)のようになる。ここで、 r_A 、 r_B はそれぞれ各差分格子の体積比率である。

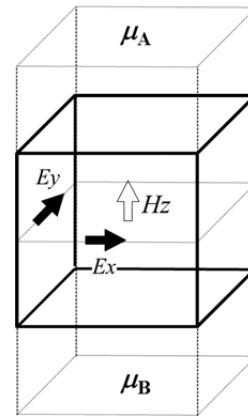


図 4 透磁率の平均化

$$\frac{1}{\mu_{eff}} = r_A \frac{1}{\mu_A} + r_B \frac{1}{\mu_B} \quad (10)$$

磁界 Hx 、 Hy の実効格子に対する平均化も同様である。

5. 領域終端の境界条件

FDTD 法では解析領域が有限であるため、その領域終端面に境界条件を設定する必要がある。以下に、各境界条件について説明する。

5.1. 完全導体境界条件

完全導体には、電氣的完全導体と磁氣的完全導体がある。

5.1.1. 電氣的完全導体の境界条件

電氣的完全導体の境界条件は、境界面上の電界の接線成分 $E_{\parallel}$ に対し

$$E_{\parallel} = 0 \quad (11)$$

で与えられる。従って、解析領域終端面に設定する場合、終端面上にあって終端面に平行な電界成分に対し常にゼロを設定する。電氣的完全導体は電気抵抗がゼロの物質であり、電磁波が到来した場合、その内部には一切侵入できず表面で完全反射される。

5.1.2. 磁氣的完全導体の境界条件

磁氣的完全導体の境界条件は、境界面上の磁界の接線成分を $H_{\parallel}$ に対し

$$H_{\parallel} = 0 \quad (12)$$

で与えられる。解析領域終端面に設定する場合、終端面に隣接する面上あって、終端面に平行な磁界成分に対し常にゼロを設定する。この境界条件は、解析対象の対称性を利用して解析領域の大きさを節約する場合に用いられる。

5.2. 周期境界条件

周期境界条件は、解析領域が x 、 y 、 z 軸のいずれかの方向に周期的に連続している状態を模擬する境界条件である。図 5 を用いてこれを説明する。

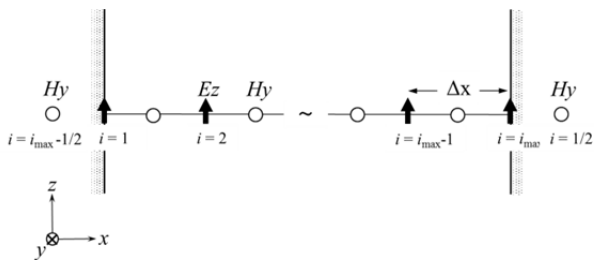


図 5 周期境界条件

x 軸方向の終端面上にある電界 $Ez(i=1)$ および $Ez(i=i_{\max})$ を更新する際に、それらの外側にそれぞれ $Hy(i=i_{\max} - 1/2)$ および $Hy(i=1/2)$ があるとみなして、2 節で説明した電界更新の計算を適用すれば、 x 軸方向の周期境界条件が設定される。 y 軸方向、 z 軸方向も同様である。

5.3. 吸収境界条件

吸収境界条件は、有限要素法や差分法などの閉領域型解法において非常に重要な境界条件であり、数多くの研究成果が発表され実用化されている。ここでは、理論と定式化が簡単な Mur の 1 次の吸収境界条件 [6] について、図 6 を用いて説明する。

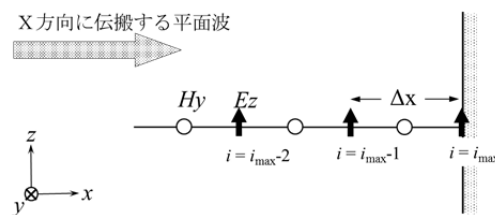


図 6 Mur の 1 次の吸収境界条件

x 方向に伝搬する平面波が x 軸方向の終端面に垂直に入射すると仮定する。

すると平面波の波動方程式から Ez は

$$\frac{\partial Ez}{\partial x} - \frac{1}{v} \frac{\partial Ez}{\partial t} = 0 \quad (13)$$

を満たす。ここで v は平面波の伝搬速度であり、真空中では光速となる。式(13)を差分表記すると次式ようになる。

$$\left(\frac{Ez_{i_{\max}}^{n+1/2} - Ez_{i_{\max}-1}^{n+1/2}}{\Delta x} \right) - \frac{1}{v} \left(\frac{Ez_{i_{\max}-1/2}^{n+1} - Ez_{i_{\max}-1/2}^n}{\Delta t} \right) = 0 \quad (14)$$

ところで、式(14)の電界 Ez の時間と空間の配置は、2 節に示した Yee 格子の配置と一致していない。そこで、次のように前後に配置されている電界 Ez の値の平均値を用いる。

$$Ez_i^{n+1/2} = \frac{Ez_i^{n+1} + Ez_i^n}{2} \quad (15)$$

$$Ez_{i-1/2}^n = \frac{Ez_i^n + Ez_{i-1}^n}{2}$$

式(15)を式(14)に代入して整理すると

$$Ez_{i_{\max}}^{n+1} = Ez_{i_{\max}-1}^n + \frac{v\Delta t + \Delta x}{v\Delta t - \Delta x} (Ez_{i_{\max}-1}^{n+1} - Ez_{i_{\max}}^n) \quad (16)$$

となる。

式(16)によって終端面上の電界 E_z の値を更新することにより、平面波の吸収境界条件が満たされる。終端面上に設定した他の電界についても、同様の処理を行うことで吸収境界条件が満たされる。

Mur の 1 次の吸収境界条件は、終端面に平面波が垂直入射することを前提としているため、斜めに入射する成分が増加すると、誤差としての反射が増加する。これを改善するために、高精度な吸収境界条件として、Mur の 2 次の吸収境界条件 [5] や Berenger の PML 吸収境界条件 [6]などの他、さまざまな吸収境界条件が提案されている。

6. 波源

波源は、解析領域にある特定の位置の電界または磁界に、時間変動を与えることで設定される。波源の領域形状によって点、線、面の各波源が設定でき、強度分布や位相差を調整することで平面波や球面波を発生させることが可能である。

波源で生じさせた電界または磁界の時間変動が、時間発展とともに解析空間内に伝搬していく現象を逐次的にシミュレーションすることで、さまざまな電磁波問題を解析することができる。

7. 解析事例

解析領域終端面にすべて吸収境界条件を設定し、解析領域の中心にある電界 E_z を正弦波で励振して定常状態になった時点での xy 面上の電界分布を図 7 に示す。

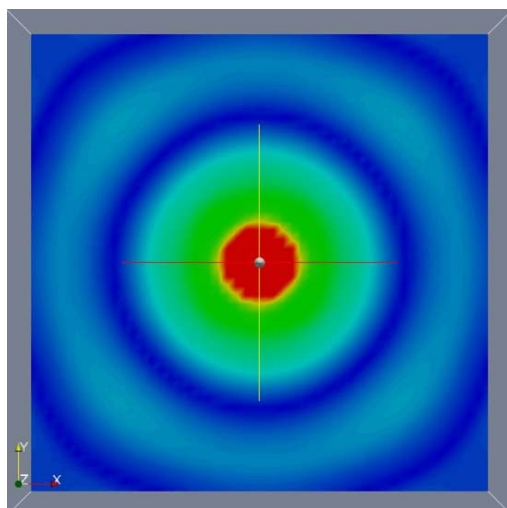


図 7 電界分布

同心円上の分布になっていることから、電磁波が正常に伝搬し、吸収境界条件が良好に機能していることが分かる。

8. 並列化

8.1. 並列化方式

本ソフトウェアでは、SPMD (Single Program Multiple Data) 方式の並列化を行った。FDTD 法の解析領域は直方体であるため、ユーザーが指定した各軸方向での並列化用分割数 (とその幅) により領域分割を行う。その分割で作成された小さな直方体領域が 1 領域となる。ソフトウェア内部では、1 プロセスが 1 領域を担当し、隣接する領域間で必要な電磁界の通信を行う。図 8 に改めて電磁界の定義位置を示す。

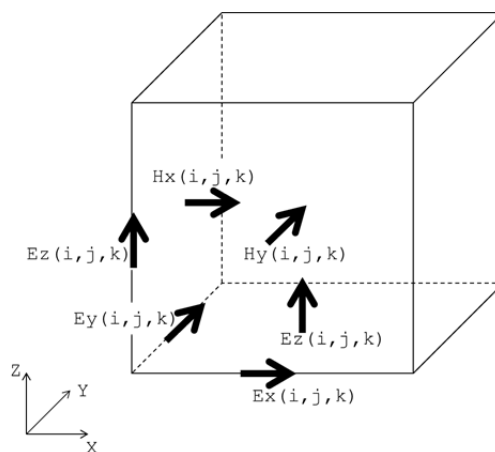


図 8 電磁界の定義位置

領域間の接続情報は、領域ごと (プロセスごと) に持っている。領域間の接続に関するグローバルな情報はどのプロセスも持っていない。この接続区情報はプログラムの実行に先立って行われる前処理プログラムの一部の機能で作成される。時間ループの各時間ステップの処理において、インデクスにしたがった通信により、必要な物理量の整合性をとる。

8.2. 入出力方式

入出力は領域ごと (プロセスごと) で行う。すなわち、領域ごとに入力データを与える必要があり、領域ごとに可視化ファイル等の結果ファイル

が出力される。本ソフトウェアでは計算結果を統合するための仕組みを特に持っていないため、領域全体の結果の可視化等が必要な場合には ParaView 等で統合することを想定している。入出力方式を図 9 に示す。図中で、灰色長方形が並列プログラムであり、白い長方形がファイルである。

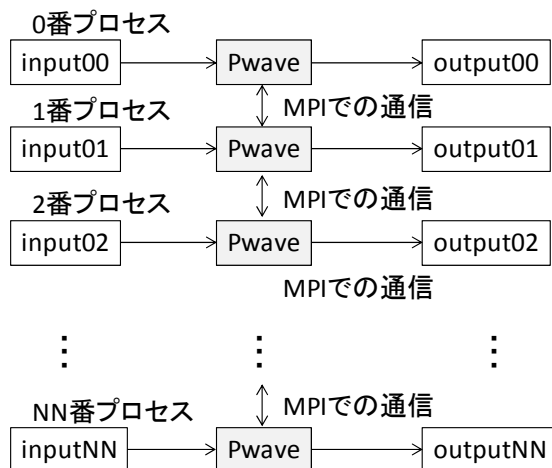


図 9 入出力方式 (:色: プログラム、白:データ)

8.3. 通信する物理量

各プロセスでは、担当する領域よりも x 、 y 、 z の正負方向にひとつのセル分だけ余計にデータを持つ。並列化の用語においては通常は「袖領域」と呼ばれているデータであり、並列化の通信ではこの領域の物理量を隣接する領域間でやりとりをする。なお、本プログラムでは、斜め隣の領域とは通信しない。

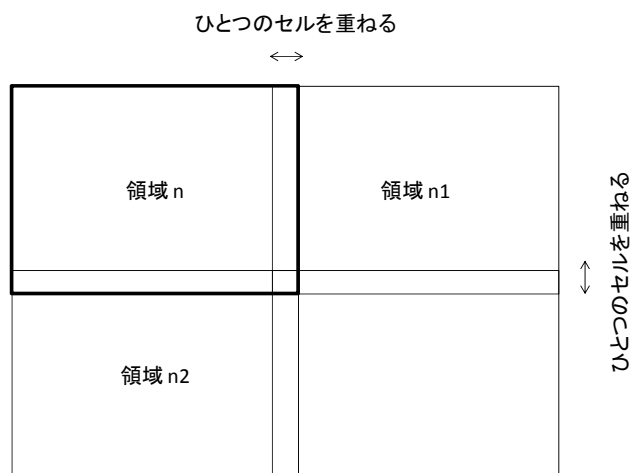


図 10 計算領域と袖領域

FDTD 法では、電界 E を边上（電界の向きと辺の方向が同一方向）に持っており、磁界 H を面の中心位置（磁界の向きと面の法線方向が同一方向）に持っている。边上の電界は、その辺を共有する面の中心に位置する磁界から計算される。また、面の中心にある磁界はその面の 4 つの边上の電界から計算される。従って、袖領域も含めて磁界 H を面の中心で正しい値を設定しておけば、边上の電界 E はすべて正しく計算できる。従って、袖領域の磁界の通信さえしておけば、全領域の計算を正しく進めることが可能となる。従って、本ソフトウェアは領域分割の方法から磁界 H のみを通信する方式とする。また、もちろん電界 E のみを通信する方式も理論的に可能であるが、どちらの方式も並列化性能等は同程度である。

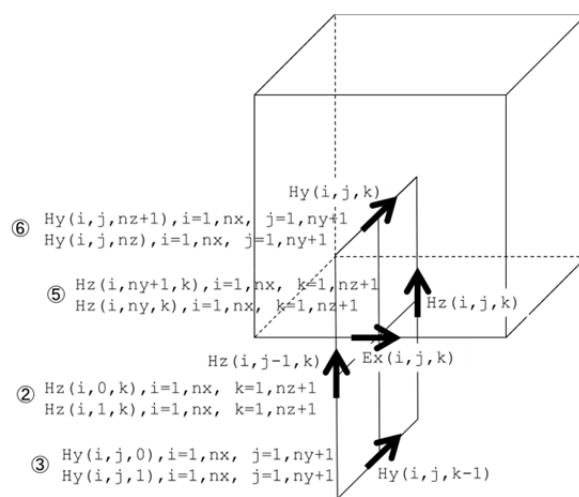


図 11 X方向の電界に関する通信する物理量

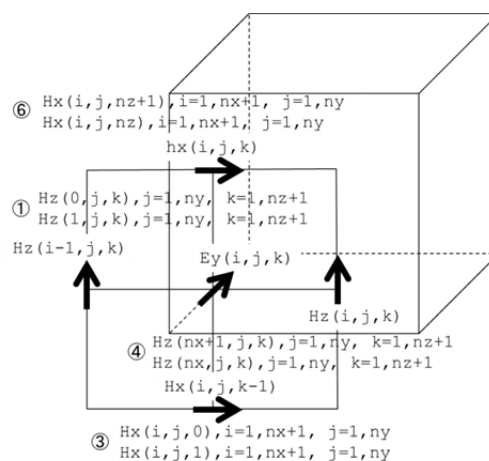


図 12 Y方向の電界に関する通信する物理量

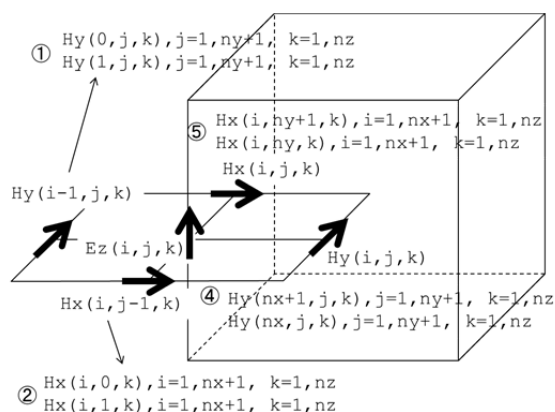


図 13 Z 方向の電界に関する通信する物理量

8.4. 演算量と通信量

領域分割されたひとつの領域に対して、演算量はセル数、すなわち、 x 、 y 、 z 方向への分割数 N_x 、 N_y 、 N_z の積に比例する。通信量については、領域の 6 つの面に対して行う。1 つの面に対して通信する必要のある量は、例えば、 x 方向の面であれば N_y と N_z の積に比例する。これらは通常の並列化方式と同じく通信量はメッシュ数の $2/3$ 乗に、通信量はメッシュ数に比例する。

データ通信においてはそのデータを送信および受信し、それらの値を適切なデータ領域に再配置しなければならない。ここで注意すべきことは、通信する物理量は連続するアドレスに置かなければならないが、領域で持っている物理量はほとんどが連続番地ではない、ということである。従って、送信および受信ともに、その手順は、物理量をバッファにコピー、バッファを送信、バッファを受信、バッファの物理量を再配置という手順になる。従って、本ソフトウェアの実行においては、並列数が多くなることによって 1 プロセスの割り

当て領域が小さくなると、演算時と通信の前処理・後処理とでキャッシュミスが減少して、理論値よりも高速化される場合がある。

図 14 に本ソフトウェアの並列化効率を示す。格子数が 12 億のデータと 48 億のデータについて、並列数が 1、2、4、8、12 の結果を記載している。この結果から、本ソフトウェアの並列化効率が非常に高いことが分かる。

9. まとめ

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave について紹介した。本ソフトウェアは、時間領域差分法 (FDTD 法) を採用し、PC クラスタなどの並列計算機を用いた大規模計算が可能である。

現在のバージョンは、電磁波解析の基本的な機能を搭載したものだが、今後、ニーズに合わせて必要な機能を順次追加していく予定である。

適用対象としては、以下のようなシミュレーションを想定している。

- ・マイクロ波デバイスやアンテナの高周波特性
- ・電子機器からの漏洩電磁界
- ・電子機器への静電気放電
- ・レーダの散乱断面積
- ・自動車や電車の周囲および内部の電磁界
- ・人体や生体の周囲および内部の電磁界
- ・落雷による過渡電磁界
- ・光の反射、吸収、伝搬特性

参考文献

- [1] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," IEEE Trans. Antennas Propagat., vol. AP-14, pp. 302-307, May 1966.
- [2] A. Taflov, Computational Electrodynamics., Norwood, MA: Artech House, 1995.
- [3] T. Namiki, "A new FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method," IEEE Trans. Microwave Theory Tech., vol. 47, pp. 2003-2007, Oct. 1999.
- [4] T. Namiki, "3-D ADI - FDTD method -

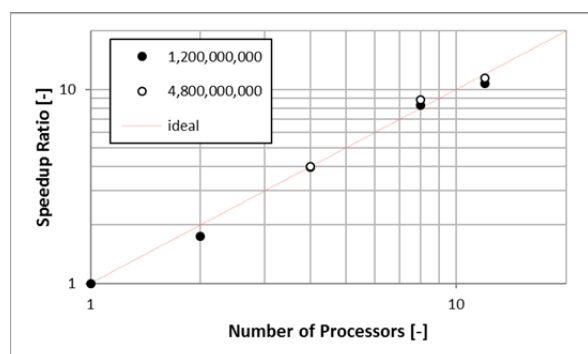


図 14 並列化効率

Unconditionally stable time-domain algorithm for solving full vector Maxwell's equations,” IEEE Trans. Microwave Theory Tech., vol. 48, pp. 1743-1748, Oct. 2000.

- [5] G. Mur, “Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations,” IEEE Trans. Electromag. Compat., vol. EMC-23, pp. 377-382, Nov. 1981.
- [6] J. Berenger, “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves,” JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 114, 185-20, 1994.
- [7] G. D. Smith, Numerical Solution of Partial Differential Equations, Oxford, U.K.: Oxford Univ. Press, 1965..

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)