2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　６ 月　４ 日現在

機関番号：３２６６５

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2015～2017

課題番号：１５Ｋ００１７７

研究課題名（和文）3次元複雑領域における電磁波伝搬解析のための安定なメッシュレス法の開発と高速化

研究課題名（英文）Development of a Stable Meshless Method for Electromagnetic Wave Propagation Analysis in Three-Dimensional Complex Shaped Domains and its Acceleration

研究代表者

伊東　拓（ITOH, Taku）

日本大学・生産工学部・助教

研究者番号：８０４３３８５３

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は，複雑領域での効率的な電磁波伝搬シミュレーションを実現することである．そのために本研究では，まず，IMLSで生成された形状関数をMTDMに導入した．その結果，MTDMの安定性が向上し，従来と比較して長時間のシミュレーションを可能とした．また，複雑領域の一部に存在する矩形領域にFDTD，その他の領域にMTDMを適用するHybrid法を提案し，MTDMのみを使う場合と比較して最大1.9倍の高速化を実現した．加えて，Hybrid法によって得られたElectric FieldはFDTDとMTDMの結合部分まで含めて滑らかに分布しており，比較的少ない節点数でFDTDよりも高精度であった．

研究成果の概要（英文）：The purpose of this study is to improve the performance of electromagnetic wave propagation simulations by MTDM in complex shaped domains. To this end, IMLS based shape functions have been employed to MTDM. Numerical experiments show that the simulations by IMLS-based MTDM is more stable than that of conventional one. On the other hand, to utilize the advantages of both FDTD and MTDM, a hybrid method of FDTD and MTDM has been proposed for electromagnetic wave propagation simulations in complex shaped domains. In the hybrid method, FDTD is employed in rectangle domains, and MTDM is used in other kinds of domains. Numerical experiments show that the computation time of hybrid method is up to about 1.9 times faster than that of MTDM. In addition, the electric field is smoothly propagated, containing connection parts of domains calculated by FDTD and MTDM, and the accuracy of hybrid method is better than that of FDTD for the case where the number of nodes is relatively small.

研究分野：数値解析，コンピュータグラフィクス

キーワード：メッシュレス法　電磁波伝搬シミュレーション　MTDM　FDTD　IMLS

１．研究開始当初の背景

電磁波伝搬シミュレーションをするために，Finite-Difference Time-Domain method (FDTD) が従来用いられてきた．一方，FDTD では直交メッシュが通常必要となるため，複雑領域（曲がった導波管等）でのシミュレーションをする際に，領域形状を精度よく表すことは難しい．仮にメッシュを非常に細かく出来れば領域形状の精度は上がるが，同時にシミュレーションにおける演算量も増加してしまう．

上述の問題点をある程度克服した方法として，近年直交メッシュを使う必要のない方法が提案された．同方法を研究代表者らは Meshless Time-Domain Method (MTDM) と呼び，2012 年頃から MTDM を用いた電磁波伝搬シミュレーションについて，研究を進めて来た．MTDM では電場 $\boldsymbol{E}$ や磁場 $\boldsymbol{H}$ などの物理量を離散化する際，メッシュレス法で用いられる形状関数を使用することで直交メッシュを排除している．すなわち，メッシュレス法では，その名の通りそもそもメッシュという概念がなく，入力は節点のみであり，形状関数も節点のみから生成される．そのため，シミュレーションを行う領域の形状に沿って節点を配置可能であり，少ない節点数でも複雑領域を精度良く表せるのである．

一方，研究を進める中で，次のことが判明した．

(1) 矩形領域等で節点配置を FDTD と全く同じにしたとき，演算量は MTDM の方が大きい．
(2) 安定条件を満たしていても複雑領域でのシミュレーションが原因不明で不安定になることがある．

まず，(1)を解決するために，研究代表者らはこれまで Graphics Processing Unit (GPU) や Many Integrated Core architecture (MIC) などを利用した 2 次元問題に対する並列アルゴリズムを提案し，矩形領域では高速化が実現できた．一方，(2)は長時間のシミュレーションをしたときにしばしば観測されるため，3 次元複雑領域でのシミュレーションを困難にしていた．そのため，提案した並列アルゴリズムを 3 次元問題に拡張しようにも，そもそも安定面に問題があり，足踏みしている状態であった．すなわち，MTDM は「節点配置の自由度を上げることで複雑領域にも容易に適用可能」になるように提案された方法であるにもかかわらず，実際には複雑領域で長時間の安定したシミュレーションは難しかった．従って，MTDM の利点を生かしきれておらず，現時点では複雑領域で実用的な方法とはいえない．

上記(2)における「シミュレーションが不安定になる原因」を突き止められなければ，結局複雑領域での安定したシミュレーションは難しいと考えたため，研究代表者は MTDM の特徴である「メッシュレス法の形状関数」について調査した．MTDM が提案されている論文では，メッシュレス法の 1 つである Radial Point Interpolation Method (RPIM) の形状関数を採用している．その理由は，入力節点 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_N$ に付随する形状関数をそれぞれ $\phi_1(\boldsymbol{x}), \phi_2(\boldsymbol{x}), \ldots, \phi_N(\boldsymbol{x})$ としたとき，MTDM では，$\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}\ (i, j = 1, 2, \ldots, N)$ という性質を満足することを前提としているからである．ただし，$\delta_{ij} = 1\ (i = j), \delta_{ij} = 0$ (others) である．RPIM の形状関数はこの性質を満足するのである．

研究代表者も MTDM を使用する際には，RPIM の形状関数を用いてきたが，最近の検証の結果，形状関数は Support domain の境界で不連続に値が 0 になるということが判明した．Support domain とは，形状関数が影響を与える範囲と考えて差し支えないが，Support domain の境界において値が 0 に収束しないのである．すなわち，本来ならば影響を与えるはずの部分をカットしていることになるため，研究代表者はこれがシミュレーションが不安定になる原因であると考えている．

RPIM の形状関数を使っている限り上記問題は解決しないため，研究代表者は他の形状関数を使用することを考え，MTDM で使用可能なもの，すなわち $\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}$ を満足するメッシュレス法の形状関数について調査した．その結果，Interpolating Moving Least-Squares method (IMLS)という形状関数生成法が存在することが分かった．IMLS では $\phi_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}$ を満たすように形状関数を生成するため，理論上は MTDM に組み込むことができる．また，Support domain 境界で形状関数が 0 に収束するため，MTDM の安定性が向上する可能性がある．安定性が高まれば，並列アルゴリズムを 3 次元に拡張する際の障壁を取り去ることができ，効率的な 3 次元シミュレーションができると考えている．すなわち，IMLS は MTDM を実用的な方法にするための道を切り開くのである．その一方で，IMLS の処理過程で使用する重み関数は特異性をもっていることも判明しており，実際にはこれを回避しなければならない．詳細は研究計画に示すが，研究代表者は，IMLS を MTDM で使うことに特化させれば特異性の回避は可能であると考えている．

２．研究の目的

本研究の目的は，IMLS で生成された形状関数によって MTDM を安定化させ，複雑領域での効率的な電磁波伝搬シミュレーションを実現することである．目的達成のために，以下の 3 つを明らかにすることを目指す．

(1) IMLS の重み関数の特異性回避法．
(2) MTDM に IMLS を組み込んだときの安定性．
(3) 複雑領域での MTDM を用いた電磁波伝搬シミュレーション用並列アルゴリズム．

３．研究の方法

(1) IMLSによるMTDMの安定性向上

IMLSの処理過程で使用する必要のある重み関数 $w_i(\boldsymbol{x})$ は特異性をもっており，重み関数の分母が $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_i$ のときに0になってしまう．本研究では，$\phi_i(\boldsymbol{x}_j)=\delta_{ij}$ を満たすという性質を利用して，形状関数 $\phi_i(\boldsymbol{x})$ の値を計算するときに特異な計算が現れないようにする．具体的には，$|\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_i|<\varepsilon$ を判定し，この条件を満足する場合には，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{x}_i$ がほぼ同じ位置であるため，$\phi_i(\boldsymbol{x}_j)=\delta_{ij}$ の性質を利用して，強制的に $\phi_i(\boldsymbol{x})=1$ とするのである．ただし，は微小値である．このようにすることで，重み関数 $w_i(\boldsymbol{x})$ の計算をスキップして形状関数 $\phi_i(\boldsymbol{x})$ の値を決定できるため，分母が0になる計算を回避できる．

MTDMにIMLSを組み込んだときの安定性を調べる際には次のAmplification/Damping rate，R_{AD} を用いる．

$$R_{\mathrm{AD}} \equiv \left\langle \int_{\Gamma_2} (\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\ell \right\rangle_t \Bigg/ \left\langle \int_{\Gamma_1} (\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\ell \right\rangle_t .$$

ただし，$\boldsymbol{E}$ は電場，$\boldsymbol{H}$ は磁場，$\boldsymbol{n}$ は波面に垂直な単位ベクトルを表し，$\langle x\rangle_t$ は x の時間平均を意味する．また，Γ_1 は入力ソース付近，Γ_2 は入力ソースから遠い位置(導波管の終端部付近など)を想定している．シミュレーションを比較的長いステップ数動作させた後，R_{AD} が1に近ければ，Γ_1 から Γ_2 にかけて，入力波が安定して伝搬していることを意味する．まずは直線導波管で安定性を調べ、その後曲がった導波管での調査をする．

(2) MTDMの高速化

RPIMの形状関数を用いたMTDMに対しては，直線導波管において，2次元シミュレーション用並列アルゴリズムを提案している．このアルゴリズムでは，節点が一様に分布していることを利用して高速化に成功している．また，アルゴリズム作成時に，下記の2つは完全に分離できることが分かっている．

(a) 形状関数の生成と(b)で使う値の計算．
(b) 電磁波伝搬シミュレーションにおける時間発展部のループ．

(b)については，直線導波管で節点配置が全く同じであれば，IMLSになってもアルゴリズムに変更はない．一方，(a)において，RPIMとIMLSでは形状関数生成に必要な計算アルゴリズムは全く異なる．したがって，(a)が並列化できたならば，まずは2次元の直線導波管での安定的な並列計算が可能かどうかを調査する．一方，IMLSにおける形状関数の計算は比較的複雑であるため，場合によっては(a)の並列化が難しい可能性がある．その場合，本研究では(b)を安定的に長時間続けることに重点をおいているため，(a)の並列化は後回しにする可能性もある．また，(b)のループ回数が多くなると(a)が全体の計算時間に及ぼす影響は小さいという側面もある．

3次元で並列化を目指す際にも，最初は直線導波管で実験を行ってから，曲がった導波管での実験を行う．ただし，曲がった導波管では，節点に偏りがでるため，単純に現状のアルゴリズムを適用できない可能性もある．その場合には，比較的単純なスレッド並列から始める．曲がった導波管におけるスレッド並列も，2次元，3次元の順に実験することを考えているが，2次元の実験を行う際には，3次元問題において参考になるデータが得られるように，できるだけ大規模な問題を扱う．

並列計算以外にも，単純にMTDMのみを使うのではなく，従来法などと組み合わせることで，お互いの利点を生かして効率的なアルゴリズムにすることも考えている．すなわち，並列計算による高速化の前に，複雑領域における電磁波伝搬シミュレーションのためのアルゴリズムを洗練させることも目指す．

４．研究成果

(1) IMLSによるMTDMの安定性向上について

まず，我々はMTDMで電磁波伝搬シミュレーションをする際，IMLSによって形状関数を生成することで，複雑領域におけるMTDMの安定性を向上させることを目指した．具体的には，まず，研究方法に示した方法を実装し，MTDMで使用することに特化させることで形状関数の特異性を除去した．また，曲がった領域を含む導波管において，IMLSを組み込んだMTDMによって電磁波伝搬シミュレーションを行った．その際，従来の形状関数生成法であるRPIMを組み込んだMTDMとの比較を行い，IMLSを組み込んだときの方が時間刻み幅を大きめに取っても，シミュレーションが安定することを実験的に示した．また，シミュレーション開始前に必要な処理もIMLSを用いたときの方が効率的であることも示した．

従来，MTDMによるシミュレーションの安定条件には，形状関数に依存した部分は含まれていなかったが，今回得られた結果は，安定性が形状関数にも依存することを示すものである．したがって，MTDMには，従来から知られている安定条件だけでなく，その他の安定条件が存在することが示唆された．

(2) MTDMの高速化について

並列計算による高速化の前に，まずは電磁波伝搬シミュレーションのアルゴリズムの効率化を図った．具体的には，複雑領域における電磁波伝搬解析をする際，全領域でMTDMを使うのではなく，FDTDと組み合わせて計算を行うHybrid法を提案した．以下では，Hybrid法について説明する．

MTDMはFDTDと比較して節点を柔軟に配置できるため，複雑領域での電磁波伝搬解析を比較的簡単に実現できるという利点を持っている．一方，MTDMの計算時間は，節点数が同程度の場合，FDTDと比較して大きくなる傾向がある．Hybrid法では，複雑領域であっても領域の一部では矩形の領域が存在することに着目して，矩形領域にFDTDを適用し，その他の領域でMTDMを使うことで，FDTDの高速性

と MTDM の節点配置の柔軟性の両方を生かせる方法とした．

Hybrid 法を U 字と S 字の導波管に適用して電磁波伝搬解析を行った結果，両方の導波管において，MTDM と FDTD の結合部分を含めて Electric Field は滑らかに分布していた．また，シミュレーションは 100 万ステップ以上安定動作する例を確認した．さらに，MTDM を全領域で使用した場合と比較して，1 万ステップあたりの計算時間は，U 字・S 字の導波管でそれぞれ最大 1.9 倍･1.5 倍高速化された．加えて，比較的少ない節点数で，Hybrid 法は FDTD よりも高精度であった．

並列計算による MTDM の高速化については，十分に検討ができなかったものの，スパコン(Oakforest-PACS)において実験を行った．具体的には，1 ノードではあるものの最大 1024 スレッドの計算を行った．この計算では S 字の導波管で 2 次元問題を扱ったものの，3 次元問題を扱う際にも参考になるように節点数を多めに設定し，約 1158 万節点配置した．結果としては，256 スレッドのときがもっとも高速化され，1 スレッドと比較すると，約 20 倍高速化された．

3 次元問題への取り組みとしては，将来的に陰解法を用いたときなどのための基礎研究として，メッシュレス法の 1 つである eXtended Element-Free Galerkin method (X-EFG)を用いて 3 次元 Poisson 方程式を離散化して得られた連立 1 次方程式の解法について調査し，係数行列の構造を考慮した前処理を用いることで，反復解法で効率的に解ける例を確認した．

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 5 件）

① T. Itoh and S. Ikuno, “Efficient Simulation of Electromagnetic Wave Propagation in Complex Shaped Domain by Hybrid Method of FDTD and MTDM Based on Interpolating Moving Least-Squares Method,” IEEE Trans. on Magnetics, Vol. 53, No. 6, 2017, Art. no. 7203004, 査読有, DOI: 10.1109/TMAG.2017.2658194

② S. Ikuno, G. Chen, T. Itoh, S. Nakata, and K. Abe, “Variable Preconditioned Krylov Subspace Method with Communication Avoiding Technique for Electromagnetic Analysis,” IEEE Trans. on Magnetics, Vol. 53, No. 6, 2017, Art. no. 7202204, 査読有, DOI: 10.1109/TMAG.2017.2655513

③ T. Itoh, A. Saitoh, S. Ikuno, and A. Kamitani, “Numerical Investigation of Preconditioning for Iterative Methods in Linear Systems Obtained by Extended Element-Free Galerkin Method,” Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 3, No. 2, pp. 188-205, 2017, 査読有, DOI: 10.15748/jasse.3.188

④ S. Ikuno, G. Chen, S. Yamamoto, T. Itoh, K. Abe, and H. Nakamura, “Krylov Subspace Method with Communication Avoiding Technique for Linear System Obtained from Electromagnetic Analysis,” Plasma and Fusion Research, Vol. 11, 2016, Art. no. 2406021, 査読有, DOI: 10.1585/pfr.11.2406021

⑤ T. Itoh, and S. Ikuno, “Interpolating Moving Least-Squares-Based Meshless Time-Domain Method for Stable Simulation of Electromagnetic Wave Propagation in Complex-Shaped Domain,” IEEE Trans. on Magnetics, Vol. 52, No. 3, 2016, Art. no. 7207404, 査読有, DOI: 10.1109/TMAG.2015.2478935

〔学会発表〕（計 19 件）

① S. Ikuno and T. Itoh, “Parallelization of Variable Preconditioned Krylov Subspace Method for Linear System Obtained from Meshless Approaches,” 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Tokyo, Japan, Mar. 7, 2018.

② S. Ikuno and T. Itoh, “Numerical Investigation of Convergence Property of Iterative Method for Linear System Obtained from Meshless Approaches,” JSST 2017, Tokyo, Japan, Oct. 26, 2017.

③ T. Itoh, S. Ikuno, and H. Nakamura, “Numerical Investigation of Electromagnetic Wave Propagation Simulation in Double-Tapered Waveguide by Meshless Time-Domain Method,” JSST 2017, Tokyo, Japan, Oct. 25, 2017.

④ 伊東拓，生野壮一郎，藤田宜久，多田野寛人, “メッシュレス法による電磁波伝搬解析の Oakforest-PACS における高速化，” 計算科学研究センター25 周年記念シンポジウムおよび第 9 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム -計算科学の発展と将来-，2017 年 10 月 11 日．

⑤ S. Nakata, Y. Yokoyama, T. Itoh, G. Chen, and S. Ikuno, “Interactive Finite-Difference Time-Domain Simulation for Designing Multichannel Photonic Crystal Waveguides,” ISEM 2017, Chamonix, France, Sep. 5, 2017.

⑥ S. Ikuno, G. Chen, T. Itoh, S. Nakata, and K. Abe Parallelization of Krylov Subspace Method with Communication Avoiding Technique using Multi-Core Processor and GPU ISEM 2017, Chamonix, France, Sep. 4, 2017.

⑦ T. Itoh, S. Ikuno, and H. Nakamura, “Electromagnetic Wave Propagation Simulation in Tapered Waveguide by Meshless Time-Domain Method,” ISEM 2017, Chamonix, France, Sep. 4, 2017.

⑧ 伊東拓, 生野壮一郎, 中村浩章, “MTDM による多段 Taper 形状導波管での電磁波伝搬解析,” 2017 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 岐阜県土岐市, 2017 年 8 月 8 日.

⑨ T. Itoh and S. Ikuno, “Numerical Investigation of Generation Methods for Shape Functions in Meshless Time-Domain Method for Electromagnetic Wave Propagation Simulations, ICCES 2017, Funchal, Madeira Island, Portugal, Jun. 27, 2017.

⑩ S. Ikuno and T. Itoh, “GPU Acceleration of Variable Preconditioned Krylov Subspace Method for Linear System Obtained by Extended Element-Free Galerkin Method,” ICCEM 2017, Kumamoto, Japan, Mar. 10, 2017.

⑪ T. Itoh and S. Ikuno, “Numerical Investigation of Combination of Meshless Time-Domain Method and Finite-Difference Time-Domain Method,” 1st Japan-Thailand Workshop on Numerical and Experimental Approaches to Nonlinear Problems, Dec. 7, 2016.

⑫ G. Chen, T. Itoh, S. Nakata, and S. Ikuno, “Interactive Shape Optimization of Waveguide for Electromagnetic Wave using GPU-OpenGL,” JSST 2016, Kyoto, Japan, Oct. 28, 2016.

⑬ 生野壮一郎, 伊東拓, 藤田宜久, 多田野寛人, “メッシュレス法より得られる連立 1 次方程式への可変的前処理付き反復解法の適用,” 第 8 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム, 茨城県つくば市, 2016 年 10 月 18 日.

⑭ 伊東拓, 生野壮一郎, “Improved IMLS 法で生成される形状関数について,” 2016 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 岐阜県土岐市, 2016 年 8 月 2 日.

⑮ 伊東拓, 生野壮一郎, 齋藤歩, 神谷淳, “X-EFG 法から得られる非対称連立 1 次方程式への対称行列用前処理の適用,”【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】&【プラズマ工学・電磁界解析とその数値解析手法およびビジュアライゼーションに関する研究会】合同研究会第 2 回非線形・可視化部門研究会, 岐阜県多治見市, 2016 年 3 月 4 日.

⑯ 生野壮一郎, 廣川祐太, 伊東拓, 藤田宜久, 多田野寛人, “HA-PACS/COMA で実装された可変的前処理付き反復法による電磁界解析の高速化,” 第 7 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム, 茨城県つくば市, 2015 年 10 月 20 日.

⑰ S. Ikuno, G. Chen, and T. Itoh, “Parallelization of VP Krylov Subspace Method for Linear System Obtained by XEFG on Multi-GPU Cluster,” JSST 2015, Oct. 12, 2015.

⑱ 伊東拓, 生野壮一郎, “Poisson Disk Sampling に基づく節点配置を用いた Meshless Time-Domain Method,”【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】&【プラズマ工学・電磁界解析とその数値解析手法およびビジュアライゼーションに関する研究会】合同研究会第 1 回非線形・可視化部門研究会プログラム, 岐阜県多治見市, 2015 年 9 月 29 日.

⑲ T. Itoh, and S. Ikuno, Investigation of Shape Functions for Meshless Time-Domain Method in Electromagnetic Wave Propagation Simulation, ICCES'2015, Reno, NV, USA, Jul. 22, 2015.

６．研究組織

(1)研究代表者

伊東　拓（ITOH, Taku）
日本大学・生産工学部・助教
研究者番号：80433853