

ベクトル化・並列化に適したFDTDプログラミングの一手法

王 建青[†] 岡部公起[‡] 曾根秀昭[‡] 藤原 修[†]

[†]名古屋工業大学 大学院工学研究科 〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町

[‡]東北大学 情報シナジーセンター 〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉

E-mail: [†]wang@elcom.nitech.ac.jp

あらまし FDTD (Finite-Difference Time-Domain) 法で大規模・高精度な電磁界シミュレーションを可能とするには、コンピュータのベクトル機構と並列処理の効果を最大限に発揮させることが必要にして不可欠である。FDTD 法においては、解析領域を仮想的な境界で閉じておく Berenger の PML (Perfectly Matched Layer) 吸収境界条件が重要な役割を占めており、そのコード化が FDTD プログラム全体の性能を大きく左右する。本稿では、この Berenger の PML 吸収境界条件のプログラミング手法を取り上げ、ベクトル並列型コンピュータに適したプログラミング手法を述べ、それを適用した場合のプログラム例を示した。スーパーコンピュータ (NEC SX-7) での性能評価の結果から演算速度は、従来法に比べ 8 並列では 4~5 倍、16 並列では 8 倍、非並列計算に比して 26 倍の向上が確認できた。

キーワード FDTD 法, ベクトル化, 並列化, PML, 電磁界解析

A Programming Method for Vector and Parallel FDTD Computation

Jianqing WANG[†] Kouki OKABE[‡] Hideaki SONE[‡] and Osamu FUJIWARA[†]

[†]Nagoya Institute of Technology, Gokiso-cho, Showa-ku, Nagoya, 466-8555 Japan

[‡]Tohoku University, Aramaki-aza Aoba, Aoba-ku, Sendai, 980-8578 Japan

E-mail: [†]wang@elcom.nitech.ac.jp

Abstract For large-scaled and high precision electromagnetic field simulations with the FDTD (Finite-Difference Time-Domain) method, it is essential to utilize effectively the vector and parallel computation structure of computers. In the FDTD method, Berenger's PML (Perfectly Matched Layer) absorbing boundaries have a quite large weight, which may affect directly the performance of the whole FDTD program. In this paper, a basic consideration of the PML programming which is adequate to the vector and parallel computation was given, and the consequent programming was shown as an example. From the evaluation results on a super-computer (NEC SX7), it was found that the speed was raised 4~5 times for 8 parallel computations and 8 times for 16 parallel computations, respectively. Compared to the case without parallelism, a speed-up of 26 times was achieved for 16 parallel computations.

Keyword FDTD method, vector computation, parallelism, perfectly matched layer, electromagnetic field simulation.

1. まえがき

電子機器のデジタル化, 高速化, 無線通信機器との融合などにより, マイクロ波回路, アンテナ, EMC 設計においては, コンピュータ設計ツールが非常に重要な役割を果たしており, マクスウェル方程式を出発点とした大規模な電磁界シミュレーションの必要性が急増している[1][2]. 電界 E, 磁界 H に関するマクスウェルの方程式を時間領域と空間領域とで差分化し, その差分式を時間領域で逐次計算することで計算領域内の電磁界を数値的に求める手法として, FDTD (Finite-Difference Time-Domain) 法[3][4]が特に注目されている. この手法での空間領域における差分は, 計算対象を 3次元の微小立方体(セル)に分割し, 各セルに媒質と対応する電気定数(誘電率 ϵ と導電率 σ)を割り付

けて行うので, FDTD 法は複雑な形状と構造をもつ物体のモデリングに対応できるといった汎用性を有する. さらに, 単位セル内の電磁界各成分の空間配置においては, 基本的に電界はセルの各辺に沿って, 磁界は面の中心に垂直に割り当てられ, 電界と磁界は空間的には相互に配置される. これは, 電界の回転が磁界を, 磁界の回転が電界を作るというマクスウェルの方程式を満たす配置でもある. また, 時間軸では, 電界と磁界は時間的には相互に配置される. 例えば, 電界を $t=n\Delta t$ (Δt : 時間ステップ)の整数次の時刻に, 磁界を $t=(n+1/2)\Delta t$ の半整数次の時刻にそれぞれ割り当てることで電磁界が順次計算される. 図1にFDTD法のフローチャートを示す. このように, FDTD法はベクトル並列型コンピュータとの適合性がよく, それ故にベク

```

CALL SETUP
T=0
DO N=1, N_T1 MESTEP
  CALL E_FIELDCALCULATION
  CALL E_FIELDPML
  T=T+DT/2
  CALL H_FIELDCALCULATION
  CALL H_FIELDPML
  T=T+DT/2
END DO
    
```

図1 FDTD法のフローチャート

トル計算と並列計算に適している。特に、大量メモリを有するベクトル並列型スーパーコンピュータでの処理によって、大規模かつ高精度な電磁界解析が可能になると期待される。しかしながら、ベクトル並列型コンピュータを効果的に発揮させるには、ベクトル機構と並列処理を効率よく使うことが必要にして不可欠である。FDTD法では、コンピュータの取り扱える解析領域は有限であるため、解析領域を仮想的な境界で閉じ

ておく必要がある。これは吸収境界条件と呼ばれ、代表的な条件としては、解析境界に仮想的な吸収媒質を設置して入射波を減衰させる Berenger の PML (Perfectly Matched Layer) 吸収境界条件[5]が有名である。しかしながら、PML 吸収境界条件は FDTD プログラム上ではベクトル化、並列化が困難であり、それ故にこの部分のコード化が FDTD プログラム全体の性能を左右する。

本稿では、Berenger の PML 吸収境界条件のプログラミング手法を取り上げ、ベクトル並列型コンピュータに適した処理機構を最大限に活かすための考え方とプログラミング手法を述べ、それを適用した場合のプログラム性能に対する評価結果を示す。なお性能評価は、東北大学情報シナジーセンターのベクトル並列型スーパーコンピュータ (NEC SX-7) 上で行った。

2. PML 吸収境界条件のプログラミング時の問題点

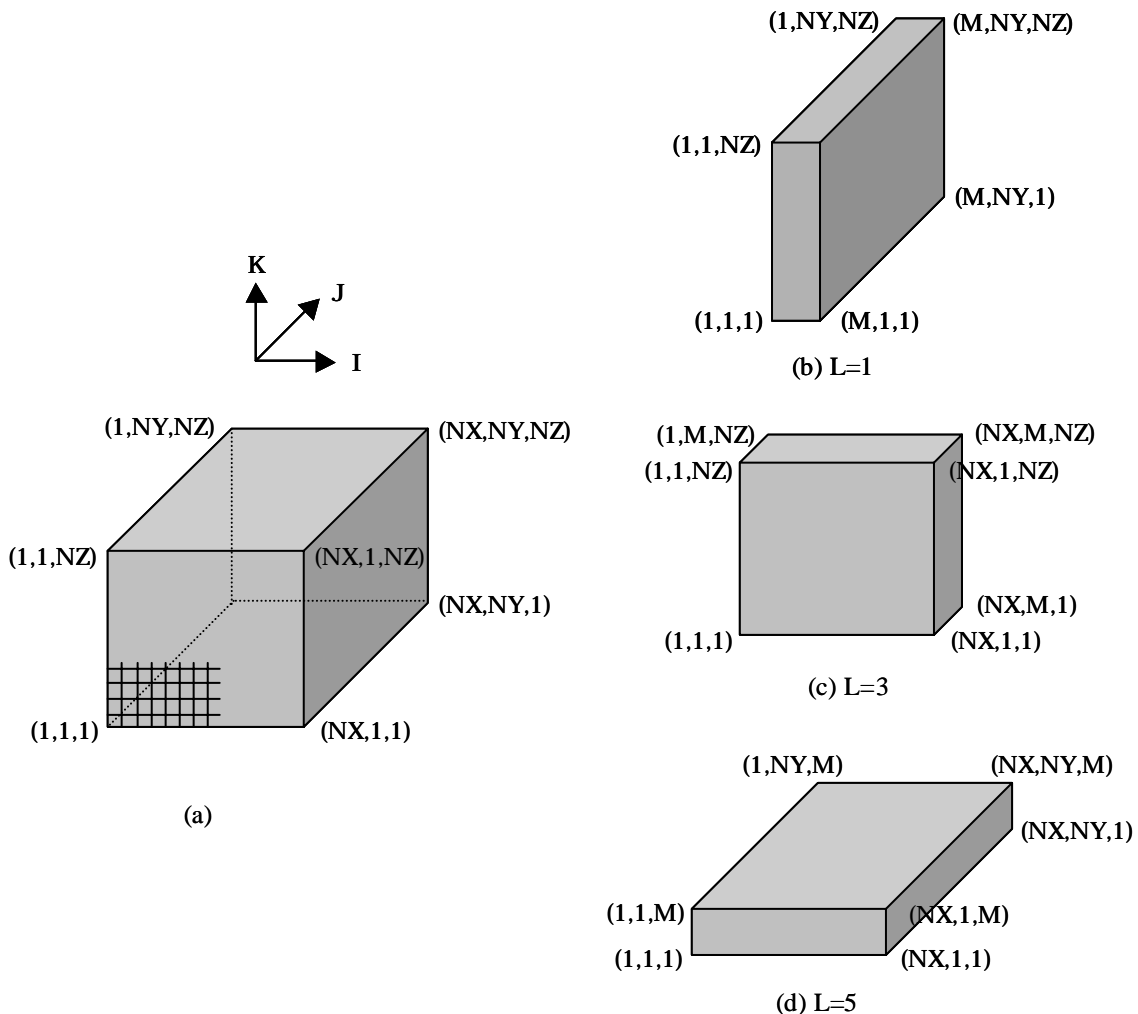


図2 FDTD解析空間とPML層の配置
 (a) 全FDTD解析空間；(b) L=1のPML層；(c) L=3のPML層；(d) L=5のPML層。

現在，わが国では FDTD 法に関する教科書は既に少なからず出版されており，PML プログラム例を掲載しているものもある[4]．図 2 に FDTD 解析領域と PML 媒質の配置を示す．PML 媒質層は一般に解析領域を囲んで $L=1$ から 6 まで計 6 面がある．但し， $L=1$ は， $I=1$ に接する PML 層， $L=2$ は $I=NX$ に接する PML 層，同様に，例えば， $L=6$ は $K=NZ$ に接する層としている．なお，図 2 には $L=1, 3, 5$ の PML 層だけ，層の厚さを M として示してある．

図 3 は電界に対する PML のプログラム例 (E_FIELD_PML) を示す．このプログラムは FDTD 法の教科書[4]に掲載されたもので，現在わが国において広く利用されているようである．PML 媒質層が解析領域を囲んで 6 面あるので，各 PML 媒質の始点の座標，終点の座標を LPMLII(L,1)，LPMLJJ(L,1)，．．．，LPMLKK(L,2)によって定めている．このプログラムは非常に簡潔でコンパクトに書かれているが，ベクトル並列型コンピュータ上での使用を最優先したわけではなく，次のような問題点が挙げられる．

(1) ベクトル化率を向上させるには，最内側のループ長が最大となるようなループ構成にする必要がある．しかし，図 3 のプログラムでは $L=5$ と 6 のときに最内側の K に関するループは PML の層数 M の長さしかなく，ベクトル長は極めて短い．

(2) 並列化の効率を向上させるには，外側のループをできるだけ並列化する必要がある．しかし，図 3 のプログラムでは，最も外側の L のループ長が 6 しかないので，7 CPU 以上では並列化の効果は期待できない．また，その内側の I のループで並列化する場合は粒度が小さくなり，それ故に並列化の効率が悪くなる．

実際，NEC SX-7 でのトレース解析結果によれば，E_FIELD_PML の平均ベクトル長は理想値 256 に対して僅か 31 であり，また，FDTD 全計算時間の 6 割が PML の部分で費やされていることが判明している．

3. ベクトル化・並列化に適したプログラミング手法

この問題に対処するための基本的な考え方は，最内側のループを長くしてベクトル化率を上げると共に，最外側のループを長くして並列化効果を発揮させることである．つまり，図 2 で示している PML 各層に対して，ループ長 NX, NY, NZ の演算を多重ループの最内側か最外側に変更し，PML 層数 M しかない短いループの演算を多重ループの中間で行うようにすることである．このために，図 3 の PML プログラムに対して以下のような変更を行った．

(1) 変数 L をなくし，従来の L, I, J, K に関する 4 重ループを各 PML 層 ($L=1 \sim 6$) での I, J, K に

関する 3 重ループに変更した．その結果，最外側のループ長を長くすることが可能となった．

(2) $L=1$ と 2 に対応する PML 層については J を最内側のループ変数， $L=3 \sim 6$ に対応する PML 層については I を最内側のループ変数にそれぞれ取り，ループ長が PML の層数 M しかないような変数は中間ループとなるようにした．その結果，最内側のループ変数をループ長の長いものにでき，ベクトル化率を向上させた．

(3) $L=1 \sim 4$ に対応する PML 層については K を最外側のループ変数， $L=5, 6$ に対応する PML 層については J を最外側のループ変数にそれぞれ変更し，最外側のループはできるだけループ長の長いものにするこ

とで，並列化の効率を上げた．
このように変更した電界に関する PML のプログラムを図 4 に示す．なお，磁界に関する PML プログラムも全く同様である．

表 1 と表 2 にベクトル化と並列化の向上効果の評価結果を示す．このとき $NX=NY=NZ=400$ ，時間ステップ数 $N_TIMESTEP=1000$ とし，PML の層数をそれぞれ $M=6$ と $M=12$ とした．また，演算時間は $M=6$ と $M=12$ それぞれにおいて従来のプログラムで並列化しない場合の値を 1.0 とした．表から，ベクトル化率の向上によるだけで，FDTD プログラム全体の平均ベクトル長は $M=6$ のときは 88.9 から 194.7， $M=12$ では 91.0 から 189.9 にそれぞれ改善され，またこうしたベクトル化の改善で演算速度は 2 倍も向上されたことがわかる．さらに，従来のプログラムでは L が最大 6 で，16 並列でも 8 並列時とあまり変わらない演算時間であったが，プログラムの変更で 8 並列では約 4~5 倍，16 並列では約 8 倍もの並列化の効果が向上し，演算速度は 16 並列では変更前の非並列計算に比べて 26 倍の向上が確認できた．

なお，この PML プログラムの改良版は，東北大学情報シナジーセンターの WEB ページ[6]からダウンロードできる予定である．

4. むすび

FDTD 法による電磁界の大規模シミュレーションを可能とするには，コンピュータのベクトル機構と並列処理を効率よく利用することが必要不可欠である．本稿では，FDTD プログラムの中で特にベクトル化及び並列化が容易でない Berenger の PML 吸収境界条件を取り上げ，ベクトル並列型コンピュータに適したプログラミング手法を述べ，それを適用したプログラム例を示した．さらに，東北大学情報シナジーセンターのスーパーコンピュータ (NEC SX-7) 上でのプログラミング性能に対する計算評価の結果，演算速度は，従来

```

DO L=1, 6
  I0=LPMLII(L, 1)
  I1=LPMLII(L, 2)
  J0=LPMLJJ(L, 1)
  J1=LPMLJJ(L, 2)
  K0=LPMLKK(L, 1)
  K1=LPMLKK(L, 2)

  L1=LPMLST(L)
  DO I=I0, I1-1
    DO J=J0+1, J1-1
      DO K=K0+1, K1-1
        EX_FIELD_CALCULATION
        L1=L1+1
      END DO
    END DO
  END DO

  L2=LPMLST(L)
  DO I=I0+1, I1-1
    DO J=J0, J1-1
      DO K=K0+1, K1-1
        EY_FIELD_CALCULATION
        L2=L2+1
      END DO
    END DO
  END DO

  L3=LPMLST(L)
  DO I=I0+1, I1-1
    DO J=J0+1, J1-1
      DO K=K0, K1-1
        EZ_FIELD_CALCULATION
        L3=L3+1
      END DO
    END DO
  END DO
END DO
    
```

図3 E_FIELD_PMLのプログラム例
 (文献4より)

```

DO K=M+1, NZ-M
  DO J=2, M
    DO I=1, NX-1
      EX_FIELD_CALCULATION
    END DO
  END DO
  DO J=NY-M+1, NY-1
    DO I=1, NX-1
      EX_FIELD_CALCULATION
    END DO
  END DO
  DO I=1, M
    DO J=M+1, NY-M
      EX_FIELD_CALCULATION
    END DO
  END DO
  DO I=NX-M, NX-1
    DO J=M+1, NY-M
      EX_FIELD_CALCULATION
    END DO
  END DO

  DO J=2, NY-1
    DO K=2, M
      DO I=1, NX-1
        EX_FIELD_CALCULATION
      END DO
    END DO
  DO J=2, NY-1
    DO K=NZ-M+1, NZ-1
      DO I=1, NX-1
        EX_FIELD_CALCULATION
      END DO
    END DO
  END DO
  以下EY, EZ同様
    
```

図4 ベクトル化・並列化に適した
 E_FIELD_PMLのプログラム例

表1 演算性能の評価

	Before			After		
	No parallelism	8 parallelism	16 parallelism	No parallelism	8 parallelism	16 parallelism
Speed-up ratio	1.0	2.8	3.1	2.0	11.1	24.2
Average vector length	88.9	88.9	88.9	194.7	194.7	194.7
Vector operation ratio (%)	97.6	97.2	96.5	99.4	99.3	99.4

PML thickness M=6

表 2 演算性能の評価

	Before			After		
	No parallelism	8 parallelism	16 parallelism	No parallelism	8 parallelism	16 parallelism
Speed-up ratio	1.0	3.0	3.4	2.1	14.0	26.5
Average vector length	91.0	91.1	91.1	189.9	189.9	189.9
Vector operation ratio (%)	97.6	97.2	96.6	99.4	99.4	99.4

PML thickness $M=12$

法に比べて 8 並列では 4~5 倍, 16 並列では 8 倍, 非並列計算に比べて 26 倍の向上が確認できた.

今後の課題としては, 大規模並列演算でのさらなる速度の向上が挙げられる.

文 献

- [1] B. Archambeault, C. Brench and O.M. Ramahi, "EMI/EMC Computational Modeling Handbook," Norwell, Massachusetts, Kluwer Academic Publishers, 2001.
- [2] 高橋丈博, 渋谷 昇, 桜井秋久, "EMC シミュレーション," 信学誌, vol.83, no.11, pp.851-855, Nov. 2000.
- [3] A. Taflove, "Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method," Norwood, MA, Artech House, 1995.
- [4] 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.
- [5] J.-P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetics waves," Journal of Computational Physics, vol. 114, no.1, pp.185-200, 1994.
- [6] <http://www.isc.tohoku.ac.jp>