計算工学講演会論文集 Vol. 15 (2010 年 5 月) **計算工学会**

FDTD 弾性波ソルバーのV-Sphereへの実装と その大規模並列化計算への応用

Implementation of FDTD elastic wave solver to the V-Sphere framework and it's application to a large-scale parallel computation

横尾観周 [1)]，扇裕和 [1)]
Kanshu Yokoo and Hirokazu Ougi

[1)]Advanced Algorithm and Systems (〒 150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6,E-mail yokoo@aasri.jp,ougi@aasri.jp)

We developed the FDTD (finite-difference time domain) solver for three dimensional elastic wave analysis in order to compute elastic wave propagation through the material which has a complicated geometry and multi medium layers such as biological matters. FDTD method has been developed with electromagnetic wave analyses and recently has been applied to other wave equation problems. There is the advantage to use a structured grid in terms of automatic and robust grid generation. V-Sphere framework is the framework to manage several numerical simulation solvers and enhance the construction of parallel physics simulations. This framework also supports Voxel grid modeling and automated grid generation. Voxel data structure has the capability of storing three dimensional physical attributes of internal structure as well as the data of it's shape.This feature of Voxel makes it possible to perform numerical physics simulation on complicated materials using a CAD system. It is very effecient for engineering industries. We consider the implementation of this elastic wave solver into V-sphere framework to a perform large scale parallel computation.

Key Words : *FDTD method, Elastic waves, PML, Voxel, Parallel computation*

1. はじめに

本稿では複雑形状をもつ対象物の弾性波解析をボクセル（構造格子）で行うため弾性波動解析を FDTD 法を用いて行い，その計算結果について報告する．FDTD(時間領域差分法）は電磁解析で利用されている一般的手法であるが電磁解析に限らず音響解析にも利用できる事が知られている．[2] [3] V-Sphere は理化学研究所で開発された物理シミュレーション用のフレームワークであり複数の物理解析ソルバを管理することができる．各種シミュレーションに必要なライブラリが用意されており，物理計算ソルバ開発者は格子生成や可視化部分などの開発を省略することができるのでプログラム開発をより効率的に行える．本研究では三次元の弾性解析を FDTD 法を用いて行った．またこの計算ソルバを V-Sphere に移植しボクセルを用いた三次元弾性波解析の大規模並列化計算の応用について検討する．V-Sphere はボクセルによる形状表現を用いた解析を行う．ボクセルの基本単位格子は構造格子であり、構造格子を用いた数値解析は格子生成の安易で自動化が可能であるという点で実用上有利である．またボクセルの単位格子に温度や密度などの物性値をもたせて解析を行うことが可能である．CAD で物性値を持たせた物理解析を対象物の表面だけでなく内部構造を含めてシミュレーションできるという点で工学上非常に有用な技術である．これは従来の CAD ではできない機能である．V-Sphere にはボクセルデータの前処理、境界条件制御等の機能が用意されているので，これらの機能を使えば計算領域のボクセル分割が行える．したがって開発者としては物理計算用ソルバだけを開発すればボクセルデータを用いた物理解析が可能となる．さらに V-Sphere には並列化ライブラリも用意されているのでこれらを利用した大規模並列化計算も可能である．3 次元の解析の場合は空間の分割は構造格子になるが構造格子と非構造格子を比べた場合，形状の再現に関しては対象物が複雑構造を持つ場合非構造格子が一般的に構造格子より優れている．しかし非構造格子の場合には格子生成は簡単ではなく労力と時間を要する事が大きな問題とっている．構造格子を用いれば等間隔な格子状に分割されるので非構造格子に比べてメッシュ生成の労力は少ない．また格子生成を自動化する事も可能である．これらは構造格子のもつ大きな利点である．ただし複雑形状物を解析する場合には構造格子では非構造格子と比べ形状近似誤差などが問題になる．形状近似誤差は分割格子幅を十分に小さくし許容できる誤差範囲にすれば構造格子であっても良い結果が得られると考えられる．V-Sphere フレームワークに用意されている各種ツールを利用すれば複雑形状かつ多媒

質体のモデリングもボクセルを用いて比較的安易に行う事が可能である．V-Sphere を利用し，ボクセルを用いた物理シミュレーションを可能とすることは工業製品開発や医療分野等の最先端シミュレーションにおいて有効な手段であるといえる．今研究では構造格子をもちいた物理解析の一例として FDTD 法による弾性波動解析ソルバを開発した．このソルバを今後 V-Sphere 上に移植することで行える大規模計算について検討したい．今回の弾性波解析では応力と粒子速度を変数に選んだ. 今回は時間微分に関しては二次の中心差分また空間方向には 4 次の高次中心差分を用いた.

2. 弾性波解析の FDTD 計算

(1) 弾性波の方程式

FDTD 法は電磁気解析でマクスウェルの方程式を差分近似して界を求めるアルゴリズムとして発展し現在では広く使われている．FDTD 法は電場と磁場を交互に格子上に配置する Yee 格子と呼ばれる独特のメッシュ構造を利用した解析手法である [1]. 基本的には微分に中心差分を使った近似計算であるが，この Yee 格子を用いることで電場の時間変化から磁場の時間変化を求め磁場の時間変化から電場の時間変化を交互に求めるといったマクスウェルの方程式に沿った計算が可能になる．弾性波動の解析の場合においても応力と粒子速度を変数にとりその方程式を差分化する事で応力と粒子速度を交互に計算する FDTD 計算が可能になる．固体中を伝播する弾性波の基本方程式は応力と粒子速度で表す場合にはラメ定数 λ と μ および密度 ρ を用いて以下のようになる.

$$\frac{\partial}{\partial t}T_1 = (\lambda+2\mu)\frac{\partial}{\partial x}\dot{u} + \lambda\frac{\partial}{\partial y}\dot{v} + \lambda\frac{\partial}{\partial z}\dot{w} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_2 = \lambda\frac{\partial}{\partial x}\dot{u} + (\lambda+2\mu)\frac{\partial}{\partial y}\dot{v} + \lambda\frac{\partial}{\partial z}\dot{w} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_3 = \lambda\frac{\partial}{\partial x}\dot{u} + \lambda\frac{\partial}{\partial y}\dot{v} + (\lambda+2\mu)\frac{\partial}{\partial z}\dot{w} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_4 = \mu(\frac{\partial}{\partial z}\dot{v} + \frac{\partial}{\partial y}\dot{w}) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_5 = \mu(\frac{\partial}{\partial z}\dot{u} + \frac{\partial}{\partial x}\dot{w}) \quad (5)$$

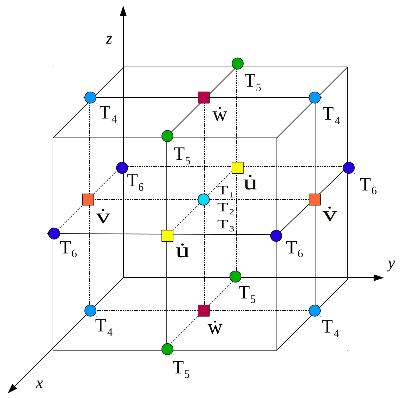
$$\frac{\partial}{\partial t}T_6 = \mu(\frac{\partial}{\partial y}\dot{u} + \frac{\partial}{\partial x}\dot{v}) \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{u} = \frac{1}{\rho}(\frac{\partial}{\partial x}T_1 + \frac{\partial}{\partial z}T_5 + \frac{\partial}{\partial y}T_6) \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{v} = \frac{1}{\rho}(\frac{\partial}{\partial y}T_2 + \frac{\partial}{\partial z}T_4 + \frac{\partial}{\partial x}T_6) \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{w} = \frac{1}{\rho}(\frac{\partial}{\partial z}T_3 + \frac{\partial}{\partial y}T_4 + \frac{\partial}{\partial x}T_5) \quad (9)$$

ここで $(T_1,T_2,T_3,T_4,T_5,T_6)^t$ は応力ベクトルまた $(\dot{u},\dot{v},\dot{w})^t$ は粒子速度ベクトルである. これらの方程式を中心差分近似することで弾性波動を FDTD 法を用いて解析する離散式が得られる．今回は空間に関して 4 次の中心差分また時間に関しては 2 次の中心差分で近似をした. 一般に FDTD 法では空間 2 次精度の中心差分を用いるが，4 次精度にすることで高周波領域での解の精度向上や位相誤差の低減が期待できる．今回空間の離散化にはスタガード格子を使用した. 図- 1 参照.



図–1 離散化の図．速度 $(\dot{u},\dot{v},\dot{w})^t$ と応力 $(T_1,T_2,T_3,T_4,T_5,T_6)^t$ の各成分の Yee 格子上での配置．各変数が格子点上に交互に並んでいる．

(2) PML 吸収層

吸収境界には電磁界解析で一般的に用いられている PML（Perfectly Matched Layer）吸収境界を用いた.[4][5] PML 吸収境界は仮想的な PML 吸収層で解析領域の外枠を囲む．解析領域の媒質と PML 媒質のインピーダンスを整合させることで吸収層に入射する波の解析領域への反射を理論的に無くしている．さらに減衰項を PML 領域内で与えることで解析領域から入射してきた波を PML 吸収層内で段階的に減衰させていく．弾性波動の方程式に減衰項 σ 及び $\sigma*$ を加える．減衰項はおのおの境界面に垂直であるので，波は PML 層に垂直な成分のみが減衰されていく．したがって PML 領域内においては応力ベクトルと粒子速度ベクトルの各成分について (x,y,z) の 3 方向に分割して計算する必要がある．例えば T_1 であれば $T_1 = T_{1x}+T_{1y}+T_{1z}$ のように分割し x 方向，y 方向及び z 方向でそれぞれ減衰させていく．PML 境界内の方程式は以下に示す.

$$\frac{\partial}{\partial t}T_{1x} + \sigma_x T_{1x} = (\lambda+2\mu)\frac{\partial}{\partial x}(\dot{u}_x+\dot{u}_y+\dot{u}_z)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_{1y} + \sigma_y T_{1y} = \lambda\frac{\partial}{\partial y}(\dot{v}_x+\dot{v}_y+\dot{v}_z)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T_{1z} + \sigma_z T_{1z} = \lambda\frac{\partial}{\partial z}(\dot{w}_x+\dot{w}_y+\dot{w}_z)$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{w}_z + \sigma*_z\,\dot{w}_z = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}(T_{3x}+T_{3y}+T_{3z})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{w}_y + \sigma *_y \dot{w}_y = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial y}(T_{4y} + T_{4z})$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{w}_x + \sigma *_x \dot{w}_x = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x}(T_{5x} + T_{5z}) \tag{10}$$

方程式の形からインピーダンス整合は $\sigma = \sigma*$ である．減衰項 σ は PML 内で以下のように決定する．

$$\sigma(r) = \sigma_{max}(\frac{r}{\delta})^n \tag{11}$$

δ は PML 全体の厚さで r は境界面からの距離である．減衰項 σ は吸収領域内でなめらかに増加させていき吸収領域の端において σ_{max} の値を持つ．σ_{max} は理論反射係数より求める．反射係数は入射角 θ の関数として以下のように表せられる．

$$R(\theta) = \exp[-\frac{\cos(\theta)2}{c_p}\int_0^{\delta}\sigma(r)dr] \tag{12}$$
$$R(\theta) = \exp[-\frac{\cos(\theta)2}{c_s}\int_0^{\delta}\sigma(r)dr] \tag{13}$$

したがって $\theta = 0$ すなわち垂直入射の反射係数 $R(0)$ を利用すれば

$$\sigma_{max} = -\log(R(0))\frac{n+1}{2\delta}c_p \tag{14}$$
$$\sigma_{max} = -\log(R(0))\frac{n+1}{2\delta}c_s \tag{15}$$
$$\tag{16}$$

として σ_{max} を計算できる．c_p は p 波速度 c_s は s 波速度である．PML の性能検証として以下の初期条件を与え 2 次元で計算をした．

$$\dot{u}(x,y) = Ax(1-\frac{r}{b})\exp(-\frac{r^2}{b^2}) \tag{17}$$

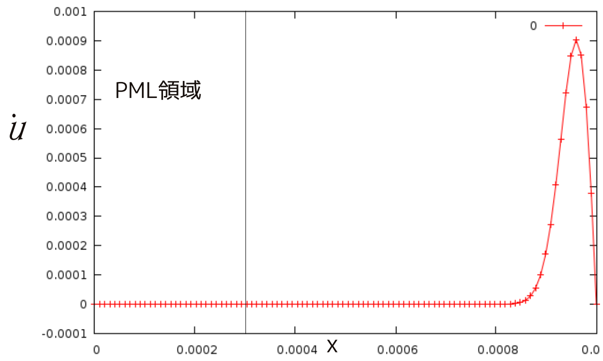
$r = \sqrt{x^2+y^2}$,$b = 6$,$A = 10^{-4}$ である.$c_p = 2\times 10^3$[m/s],$c_s = 10^3$[m/s] また n=4 で PML 層の数を 30 にした．計算の結果は入射波の振幅にたいしておおよそ 0.1% 程度の反射波が解析領域に確認できた．層をさらに厚くすれば反射はさらに抑えられる．図-2

(3) 精度検証

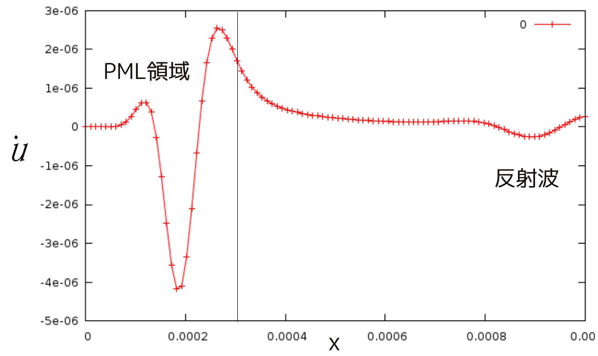
波動方程式の厳密解と FDTD 法の数値解の差をとり計算精度について検証した。弾性波の方程式から速度変位 $\dot{u}, \dot{v}, \dot{w}$ に対して p 波，s 波に関する波動方程式が得られる．検証に使用した厳密解は、下記の正弦波を初期値として与えられる p 波と s 波である。

- p 波の初期値

$$\dot{u}_p(x,y,z) = \sin(k_n x) \tag{18}$$
$$\dot{v}_p(x,y,z) = \sin(k_m y) \tag{19}$$
$$\dot{w}_p(x,y,z) = 0 \tag{20}$$



T=0[s]



T=0.8×10^{-6}[s]

図–2 PML を設定した場合の初期波束 ($T = 0[s]$) と波束が PML 領域に吸収された時点 ($T = 0.8\times 10^{-6}$) で解析領域に戻って来た反射波．図は x 軸に沿った波の振幅の変化．PML 領域に入った波束は減衰され，解析領域には初期の振幅のおよそ 0.1% が反射している．

- s 波の初期値

$$\dot{u}_s(x,y,z) = \sin(k_m y) \tag{21}$$
$$\dot{v}_s(x,y,z) = \sin(k_l z) \tag{22}$$
$$\dot{w}_s(x,y,z) = 0 \tag{23}$$

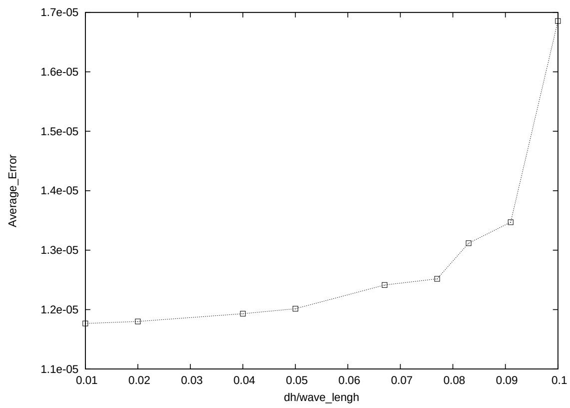
k_n, k_m, k_l は解析の対象とする領域に 1 波長が設定される値に定めた．この初期値に対応する波動方程式の厳密解 u_{ex}, v_{ex} は、以下のストークスの解として知られている。

$$\dot{u}_{pex} = \frac{1}{2}[\sin\{k_n(x-c_pt)\} + \sin\{(k_n(x+c_pt)\}]$$
$$\dot{v}_{pex} = \frac{1}{2}[\sin\{k_m(y-c_pt)\} + \sin\{(k_n(y+c_pt)\}]$$
$$\dot{u}_{sex} = \frac{1}{2}[\sin\{k_m(y-c_st)\} + \sin\{(k_m(y+c_st)\}]$$
$$\dot{v}_{sex} = \frac{1}{2}[\sin\{k_l(z-c_st)\} + \sin\{(k_l(z+c_st)\}]$$

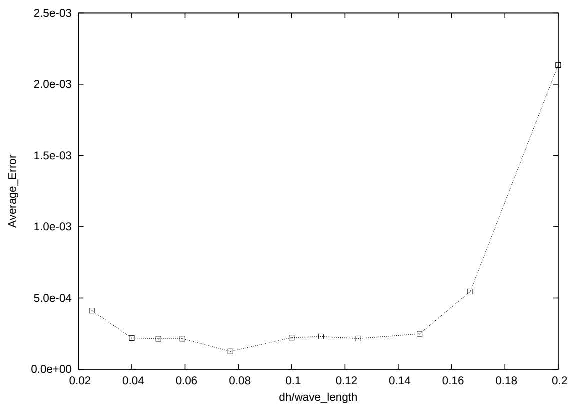
数値解析において、時間差分を一定にして空間の刻み幅 dh を変化させ誤差と dh との関係を求めた。誤差は式 (24) を用いて各格子点での厳密解と数値解との差 (ユークッリッド距離）をとり、全空間の格子点 N で平均し縦軸にプロットした.

$$Error = \frac{1}{N}\sum_{i,j}^{N}\sqrt{|\dot{u}-\dot{u}_{ex}|^2+|\dot{v}-\dot{v}_{ex}|^2} \qquad (24)$$

初期値として、正弦波 1 波長を与え、時間刻みを $dt = 10^{-11}$ に固定すると、今回使用した弾性体の物理定数、λ, ν から、１周期は、P 波で、124620 ループ、s 波で 293160 ループとなり、この 1 周期分の回数だけ、FDTD 法の演算を繰り返した。　空間差分が 1/10 波長〜1/20 波長以内で、図-3, 図-4 に示す通り、1 周期後の誤差は、p 波で 10^{-5} 程度、s 波で 10^{-4} 程度の結果が得られた。ある時点から刻み幅 dh を小さくしても精度が上がらなくなるのは丸め誤差の影響だと思われる.



図–3　P 波１周期後の誤差．$dt = 10^{-11}$ に固定し空間の刻み幅 dh は波長で正規化した値．



図–4　S 波１周期後の誤差．P 波と同様に $dt = 10^{-11}$ に固定し空間の刻み幅 dh は波長で正規化した値．

3.　V-Sphere を利用した大規模計算への展開

ボクセルには空間の各点に実測されたデータから物理定数を与えることができるので複雑形状をもった多媒質体の弾性波動解析には有効であると考えられる．これは医療など多くの分野で弾性波を使った非破壊検査, 超音波解析等の応用が期待できる．弾性波ソルバー側には物理定数を場所の関数として配列で定義しておりその配列に実測データを初期値として与えることができるので多媒質系の解析を同一のアルゴリズムで全空間について解析でき汎用性に富んでいる．生体物などを扱う場合は媒質の種類は数百種類になり三次元での解析に使用する計算メモリや計算資源は大幅に増大してしまう．大規模並列化計算に対応させることで利用可能メモリの増大また計算時間の短縮が期待される．既存の解析ソルバを V-Sphere に移植する事でこれらの大規模計算に比較的少ない労力で対応できるのは実用上非常に有用である．

参考文献

1) K.S. Yee "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media",Antennas and Propagations, 14 302,1966
2) J.Virieux, "P-SV wave propagation in heterogeneous media: velocity-stress finite-difference method", Geophysics,51-4,889/901,1986
3) M. Sato, "Formation of the FDTD method for separating the particle velocity vectors of an elastic wave field into longitudinal and shear wave components ", Acoust. Sci. & Tech, 25,5 382-385,2004
4) J-P.Berenger, "A perfectly mathed layer for absorption of electromagnetic waves" J.Comput. Phys., vol.114, no.1, pp. 185-200,1994
5) J-P.Berenger, "Three-Dimensional Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves" J.Comput. Phys., vol.127, pp. 363-379,1996