

「FDTD 法 基礎から最新技術まで」

有馬 卓司

第1章 FDTD 法の基礎と特徴	7
1.1 マクスウェルの方程式	7
1.1.1 微分形のマクスウェルの方程式	7
1.1.2 積分形のマクスウェルの方程式	8
1.2 差分の考え方と精度について	8
1.3 中心差分のためのセル配置と時間配置 (Yee アルゴリズム)	9
1.3.1 1次元の例	9
1.3.2 2次元の例	13
1.3.3 3次元の例	16
1.5 FDTD 法におけるセルサイズおよびタイムステップサイズの決定法	18
1.6 いくつかのプログラム例	19
1.6.1 1次元解析プログラムと解析例	19
1.6.2 2次元解析プログラム	21
1.7 積分形のマクスウェルの方程式を用いた定式化	21
1.8 FDTD 法の特徴	22
1.8.1 計算時間について	22
1.8.2 基本的なアンテナ解析における必要メモリと解析精度について	23
第2章 吸収境界条件	26
2.1 吸収境界条件とは	26
2.2 Mur の吸収境界条件	27
2.2.1 基本的な考え方と一次元の定式化	27
2.3 PML 吸収境界条件	30
2.3.1 PML 吸収境界条件の考え方と1次元モデルに対するPML 吸収境界条件	30
2.3.2 2次元PML 吸収境界条件	33
2.3.3 UPML (Un-split 型)	37
2.4 解析例	41
第3章 FDTD 法における電磁界解析方法およびアンテナ解析手法	42
3.1 FDTD 法における電気定数の考え方	42
3.2 完全導体のモデル化	43
3.3 誘電体のモデル化	44
3.4 半空間および無限基板のモデル化	44
3.4.1 半空間もしくは無限空間のモデル化	45
3.4.2 散乱界の計算手法	47

3.5	入射波，給電方法および給電部の取り扱い	50
3.5.1	平面波の与え方	50
3.5.2	給電電圧の与え方	50
3.5.3	給電電流の与え方	52
3.5.4	負荷抵抗の与え方	52
3.5.5	給電電流の求め方	52
3.5.6	入射波源の種類	53
3.6	各種アンテナにおける入力インピーダンス・S パラメータの求め方と解析例	55
3.6.1	基本的なアンテナ	55
3.7	平衡給電・不平衡給電	57
3.8	時間応答・遠方界・指向性・利得・放射効率の求め方	58
3.8.1	時間応答の記録	58
3.8.2	遠方界変換	59
3.8.3	利得の求め方と実例	61
3.8.4	放射効率の求め方と実例	62
3.8.5	tips	63
第4章 周期構造の解析		65
4.1	周期構造と周期境界条件について	65
4.1.1	周期構造と境界条件 (Floquet の定理)	65
4.1.2	k - ω 図・ブリュアンゾーンについて	66
4.2	垂直入射に対する電気壁・磁気壁を用いた周期構造のモデル化手法	67
4.2.1	解析例とそのプログラム	67
4.2.2	導体ストリップによる平面波の散乱	67
4.2.3	無限周期微小ダイポールアレー	68
4.3	斜め入射問題	69
4.3.1	斜め入射と境界条件	69
4.3.2	FT-FDTD 法	70
4.3.3	スペクトラルドメイン法	71
4.3.4	反射係数の求め方	72
4.4	周期構造の解析例	72
4.4.1	周期ストリップ構造 (FSS) の解析例	72
4.4.2	EBG 構造の解析	73
4.5	アレイアンテナ	75
第5章 さまざまな媒質の解析		76

5.1 周波数分散性媒質	76
5.1.1 各種分散性媒質について	77
5.1.2 ADE-FDTD 法.	78
5.1.3 (PL)RC-FDTD 法	79
5.1.4 分散性媒質の解析例	81
5.1.5 実測値のFDTD 法への組み込み方.	81
5.2 周波数分散性媒質に対する吸収境界条件	82
5.3 異方性媒質の解析方法	83
5.3.1 分極ベクトルの利用	83
5.3.2 運動方程式の利用	85
5.3.3 異方性媒質の解析例	86
第6章 マルチフィジックスと計算機アーキテクチャ	87
6.1 マルチフィジックス解析	87
6.1.1 電磁界と熱のマルチフィジックス解析	87
6.1.2 電磁界と流体のマルチフィジックス解析	88
6.1.3 電磁界と量子効果のマルチフィジックス解析	88
6.1.4 電磁界と回路のマルチフィジックス解析	90
6.2 高速化・高精度化および最新のFDTD 解析手法.	91
6.2.1 OpenMP	91
6.2.2 GPGPU.	92
6.2.3 陰解法型FDTD 法.	95
6.2.4 不等間隔メッシュ	96
6.2.5 サブグリッド技術	97
第7章 まとめ	99
付録	
付録A 各種厳密解.	103
付録A.1 1次元問題.	103
付録A.2 2次元問題.	104
付録A.3 3次元問題.	104
付録B 実験値.	104
付録C 各種データ.	105

はじめに

FDTD(Finite Difference Time Domain)法[1, 2, 3]は電磁界解析手法の一つである。FDTD法は非常にシンプルなアルゴリズムを使用しているために比較的多くの計算機資源を必要とするが、計算機の性能さえ許せば解析対象の制約は非常に少ない手法である。FDTD法が活躍する場面は今後増えると予測される。その理由は2つあり、1つ目は通信機器の小形化やアンテナを複数使う通信技術の台頭などで開発対象がより複雑になっている事である。2つ目は継続的に新解析手法が開発されている事である。初期の頃には導体、誘電体のような基本的な媒質のみが対象とされていたが、近年では分散性媒質、異方性媒質、微小周期構造等も扱えるようになってきた。その結果、プラズマやメタマテリアル等の複雑な媒質をマクロ的に扱ったり、光学の分野への展開等も期待できる。3つ目として、計算機の性能進化が進んでおり、メモリの低価格化、GPGPUの登場などで、これまでPCでは解析できなかった複雑な問題を容易に解析できるようになった。言い換えれば、FDTD法の普及は計算機の性能進化の賜物であるといえる。計算機性能の進化は今後も続くと考えられる。ここに、FDTD法の歴史の一部を記す。

FDTD法は、1966年にK. S. Yeeによって提案された[1]。K. S. Yeeは、マクスウェルの方程式が電界と磁界の連立微分方程式であることに注目し、中心差分によって同方程式を解くのに適した電磁界の時間及び空間配置を考案した。これらはYeeアルゴリズムと呼ばれている。後にK. S. Kunz, A. Tafloveをはじめとする多くの研究者によって発展した。そして、1994年にJ. P. Berengerによって非常に性能の良い吸収境界が発明され、一気に普及した感がある。この吸収境界は、BerengerのPML吸収境界と呼ばれる[4]。

一方、吸収境界以外の開発においては、FDTD法の欠点であった精度と計算時間を改善する研究が多く行われた。1983年に、R. Hollandは非直交系の座標を用いたFDTD法を発表した。これにより、高精度化および計算時間の短縮に貢献した[5]。また、1997年にR. J. Luebbersらのグループは、局所的に細かなセルを用いる手法を提案した。この手法はサブグリッド法と呼ばれ、この手法も高精度化および計算時間の短縮に貢献した[6]。

一方、FDTD法はセルサイズと計算時間間隔(タイムステップ)にはCourant条件と呼ばれる関係があり、任意にタイムステップを設定することはできない。この問題に関し、2000年から2001年にかけてZhengらは、陰解法(implicit)と呼ばれるアルゴリズムを用いたFDTD法を発表した。このアルゴリズムは、精度を気にしなければ、任意にタイムステップを設定することができるので、通常FDTD法よりも大きなタイムステップを用いることにより少ないタイムステップ数で解析を終えることができ、計算時間の短縮を実現している[7, 8]。さらにこのアルゴリズムは2005年に柴山らによって大幅に改善されたLOD-FDTD(LocallyOne-Dimensional)が発表された[9]。

FDTD法は電磁界解析の手法であるが、電磁界と回路、電磁界と熱など電磁界以外の物理現象が混在するような問題に対して有効な、ハイブリッド解析手法も提案されている。1992

年にSuiらが回路解析とのハイブリッド解析法を[10]，2000年に宇野らが熱解析とのハイブリッド法を発表している[11]．現在においてこれら手法は，複数の物理現象を統一的に解析することからマルチフィジックス解析とも呼ばれる．

FDTD法はその名前のおり時間領域の解法であるが，単一の周波数成分を持つ連続波を励振し定常状態に達するとその解を1周期積分すれば，周波数領域の答えを容易に得ることが出来る．この考え方はスペクトラルドメインFDTD法と呼ばれ広く活用されている．たとえば1994年にMittraらが発表した，Sine-Cosine法などがある[12]．Sine-Cosine法は周期構造を単一の構造と周期境界を用いて解析する方法であったが，複素数で表される周期境界条件であるフロケの条件を，複素数のままFDTD法に組み込んでいる．この考え方は，現在周期構造解析のスタンダードとなっているConstant-k法[13]の基礎である．

最後に計算機の進化について触れる．2000年代ころよりCPUを複数用いるクラスタ技術や，CPUとは異なる発展を遂げたGPGPU(General-Purpose computing on Graphics Processing Units)などが広く用いられるようになった．これらは比較的安価に入手でき，超高速計算を可能とすることから，FDTD法をより一層身近なものとしている．FDTD法はそのアルゴリズムより並列化計算に向いているが，GPGPUは圧倒的なコア（演算器）の数を持つことからFDTD法に向いていると考えられ，特に注目されている．今後のGPGPUをはじめとする各種計算機の発展によってはこれまで応用が困難であった領域にFDTD法が適応される可能性がある．本ワークショップの概要を記す．本ワークショップでは1，2，3章においてFDTD法の基礎を説明する．その後，最新の技術を交えながら応用技術を説明する．応用的な内容を含むことから是非予習をお願いしたい．

第1章 FDTD法の基礎と特徴

FDTD法は日本語で、時間領域差分法と表される。この言葉の通り、FDTD法では微分形のマクスウェルの方程式を、時間領域で差分近似し、電磁界の時間経過に関する振る舞いを解析する方法である。一方、積分形のマクスウェルの方程式を用いて定式化も行うことが出来、結果的に同じ方程式が得られることはよく知られている。これらは、微分形のマクスウェルの方程式と積分形のマクスウェルの方程式が、本質的に同じ現象を表しているためである。本章では、FDTD法の基本的な考え方を説明し、FDTD法の定式化を行う。最後にFDTD法の特徴について解説する。

1.1 マクスウェルの方程式

1.1.1 微分形のマクスウェルの方程式

本節では、FDTD法の基礎となる微分形のマクスウェルの方程式[14]について簡単に述べる。電磁界を構成する要素のうち、電界を $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ [V/m], 電束密度を $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ [C/m²], 磁界を $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ [A/m], 磁束密度を $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ [T]とする。さらに電荷密度を $\rho(\mathbf{r}, t)$ [C/m³], 電流密度を $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ [A/m²]と表すことにすると

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.4)$$

と表される。媒質を非分散性かつ等方性とする、電束密度および磁束密度はそれぞれ $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ と表される。よく知られているように、式(1.3), (1.4)は、式(1.1), (1.2)と電荷保存の法則を用いて導くことが出来る。よって本質的な式は式(1.1), (1.2)であり、FDTD法では式(1.1), (1.2)のみを用いて解析を行う。

” $\nabla \times$ ”は微分演算子であり、たとえば式(1.1)に現れる” $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ”は電界ベクトルの回転量を表す。図1.1にベクトルの回転量のイメージを示す。よって、式(1.1)は電界ベクトルの回転量は磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ の時間変化とつりあっていることを表す。逆に言うと、時間的に磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ が変化すると、それとつりあう量の回転する電界ベクトルが発生していることになる。これはFDTD法の定式化においても非常に必要な概念である。式(1.2)も同様に物理的解釈が出来る。

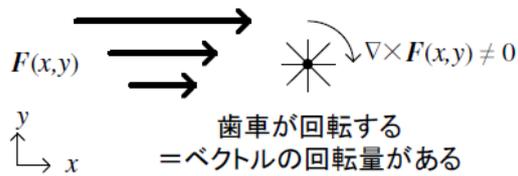


図1.1: ベクトルの回転

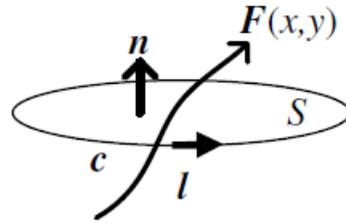


図1.2: 積分系のマクスウエルの方程式

1.1.2 積分形のマクスウエルの方程式

FDTD法は、微分を差分近似して電磁界の時間変化を求める手法と説明した。しかし、積分形のマクスウエルの方程式を用いても、全く同じく定式化が可能である。また、積分形を用いたほうが物体のモデル化が高精度に行える時もある。図1.2のようにベクトルを定義すると、積分形のマクスウエルの方程式は

$$\oint_c \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS \quad (1.5)$$

$$\oint_c \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{l} = \frac{\partial}{\partial t} \int_S \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS + \int_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} \quad (1.6)$$

と表される。式(1.5), (1.6)が本質的に、式(1.1), (1.2)と同じ物理現象を表していることは容易に理解できるだろう。しかし、積分形のマクスウエルの方程式においては、ある有限の大きさの面積 S を考えている。FDTD法においても、有限の大きさのセルを考えるために、モデル化の際に積分形のマクスウエルの方程式のほうが親和性が良いことが伺える。

1.2 差分の考え方と精度について

本節では、差分近似について述べる。微分の定義式は

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (1.7)$$

である。一般的にコンピュータにおいては、上式にある $\lim_{\Delta x \rightarrow 0}$ のような操作は非常に不得意である。一方、差分近似においては、 $\lim_{\Delta x \rightarrow 0}$ の操作をしない。これは Δx が十分小さければ、微分した値に近い解が得られるためである。

・
・
・

1.6 いくつかのプログラム例

1.6.1 1次元解析プログラムと解析例

Fortranを用いた1次元FDTD法のプログラムを示す。Fortranは無料で使用できるコンパイラも容易に入手できるので、是非聴講者自身で実際にプログラムを組み解析することを望む。ソースコード1.1に1次元FDTD法のプログラムを示す。

ソースコード1.1: 1次元のプログラム

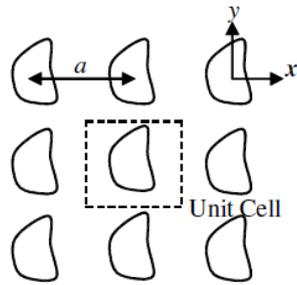
```
1 program fdtdd1d
2 !-----set parameters
3 integer :: nz=900, mstep=800!space size and maxtimestep
4 real :: e(900),h(900)
5 real :: dz=1.0e-2! ftd cell size
6 real :: umu=1.257e-6,eps0=8.854e-12,c=2.998e8
7 real :: sigma=0.0
8 real :: pi=3.141592,freq=0.5e9
9 real :: dt, ec1, ec2, hc
10 character*6 fname
11 !
12 t=0.0
13 !
14 dt=dz/c
15 ec1=(1.0-sigma*dt/(2.0*eps0))/(1.0+sigma*dt/(2.0*eps0))
16 ec2=(dt/(eps0*dz))/(1.0+sigma*dt/(2.0*eps0))
17 hc=dt/(dz*umu)
18
19 do n=1,mstep
20 !
21 if(t.lt.0.5/freq) e(700)=e(700)+sin(2.*pi*freq*t)**4
22 !
23 do k=2,nz-1
24 e(k)=ec1*e(k)+ec2*(h(k)-h(k-1))
25 end do
26
27 !---out put e-fields---
28 if(n.eq.1.or.mod(n,50).eq.0)then !each 50 steps
29 write( fname, '( i4.4 )' ) n
30 open( 77, file = "e_"//fname )
31 do k=1,nz
32 write( 77, * )k,e(k)
33 end do
34 close( 77 )
35 endif
36 !-----
37
38 t=t+dt/2.
```

•
•
•

第4章 周期構造の解析

4.1 周期構造と周期境界条件について

4.1.1 周期構造と境界条件 (Floquet の定理)



(a) イメージ



(b) 周期構造の例

図4.1: 周期構造

周期構造とは，図4.1に示すように，1つの構造を周期的に配置した構造である．近年，周期構造を用いることによりこれまでにない電気特性を実現できることから注目されている．この周期には，1方向にのみ周期性を持たせた1次元周期構造から，1つの構造を3次的に並べる3次元周期構造がある．本章では，周期構造をFDTD法を用いて解析する代表的な手法を示す．

周期構造の解析は，周期構造中のひとつの構造のみを取り出しその構造を囲むように周期境界条件を適応することで，計算時間を大幅に軽減することができる．この周期境界条件は，Floquetの定理またはBlochの定理と呼ばれる．図4.2を考えるとFloquetの定理は

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{F}(\mathbf{r})e^{-j\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{a}} \quad (4.1)$$

と表される．ここで， $\mathbf{k}_t = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ (波数ベクトル) である． \mathbf{a} は周期ベクトルと呼ばれ，図4.2では x 方向にのみ周期があるので $\mathbf{a} = a\hat{x}$ となる．よって， $\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{a} = k_x a = k_0 a \sin \theta$ と表される．また，FDTD法は基本的には時間領域の解法であるので，時間領域において式(4.1)は

$$\mathbf{F}(x, y, z, t) = \mathbf{F}(x + a, y, z, t + a \sin \theta / c) \quad (4.2)$$

と表される．

・
・
・

解析例：

負の誘電率媒質への電波照射

