3次元疑似スペクトル時間領域 (PSTD) 法の GPGPU による高速化

Accelerated Computing of 3D pseudospectral time-domain method with GPGPU

阪府大工, °水谷 彰夫, 菊田 久雄

Osaka Prefecture Univ. °Akio Mizutani, Hisao Kikuta

E-mail: mizutani@me.osakafu-u.ac.jp

疑似スペクトル時間領域 (pseudospectral time domain; PSTD) 法[1]は, マクスウェル方程式の空間微分を時間領域差分 (finite difference time-domain; FDTD) 法[2]よりも高精度に解く方法である. 電磁界の空間微分を高速フーリエ変換によって解くため, セルサイズを理論的には波長の 1/2 以下で近似可能な手法である. そのため, メモリ利用効率がよく, 数 mm の大きさの大規模問題の解析が期待されている. しかし, PSTD 法はモデルの次元に関わらず, 1次元フーリエ変換と逆変換を微分方向に対して計算領域にわたって複数回行うため, FDTD 法の単純な差分と比べると計算負荷が高い. そこで我々は近年, FDTD 法においても注目を集めている GPU に注目し, GPGPU の FFT ライブラリによる高速化[3]と GPU 計算を用いた高速化について検討し, 2次元 PSTD 法に対して, 解析領域が 1000×1000 のとき CPU の約 4.6 倍の高速化を達成した[4]. 今回, 3次元 PSTD 法について, 同様に GPU による高速化を確認したので報告する.

3次元 PSTD モデルを作成し, 周囲六方向に各 10 層の UPML 吸収境界条件を設けることで無限領域として扱う. x, y, z 方向のセルサイズ Δ はともに波長の 1/8 とした. 時間ステップは

Fig. 1 An example of 3D-PSTD simulation.
(a) Schematic model of birefringent half-wave plates.
(b) Transmitted light intensity profiles and E-field vectors.

PSTD 法のクーラン条件を満たすように $\Delta/(4c)$ とした. 図 1 に例として構造複屈折 1/2 波長板の計算例を示す. 高さ 5000nm, 周期 500nm, Duty 比 0.6, 屈折率 1.5 の矩形格子に波長 800nm の 45 度直線偏光をビーム径 $4\mu\text{m}$ のガウス型強度分布で垂直入射したところ, 透過光が -45 度直線偏光に変換されていることが確認できた.

次に, 解析領域を $10 \times 10 \times 10$ セルから $100 \times 100 \times 100$ セルまで変えたときの CPU と GPU による 3次元 PSTD 法の計算時間を図 2 に示す. CPU には Core i7-3770K 3.5GHz を, GPU には NVIDIA の GTX TITAN を用い, CPU 用ライブラリには Intel の MKL11.0, GPU 用ライブラリには CUDA5.0 を用いた. 両者の計算値は一致し, すべての解析領域において計算時間は GPU のほうが短くなり, 特に $100 \times 100 \times 100$ セルのとき GPU は CPU の約 7.2 倍速くなった. PSTD 法の有用性が広がったことから, 今後は大規模散乱解析問題等への適用を目指す.

参考文献

- [1] Q. Lin and G. Zhao, "Advances in PSTD Techniques," in *Computational Electromagnetics: the Finite-Difference Time Domain Method* (Artech House, 2005), pp. 847-882.
[2] K. S. Yee, *IEEE Trans. Antennas. Propag.*, **14**, 302-307 (1966).
[3] 水谷彰夫: GPGPU 用 FFT ライブラリによる PSTD 法の高速化, 第 75 回応用物理学会秋, 予稿集 19p-C1-18(2014)
[4] 水谷彰夫: GPGPU による疑似スペクトル時間領域 (PSTD) 法の高速化, OPI 2014, 7pPD4

Fig. 2 Comparison of calculation time between CPU and GPU with respect to mesh size N_x for 3D-PSTD.