

時間領域差分法を用いた超音波伝搬シミュレーションの 並列演算による高速化

細川 篤*

Acceleration of a Finite-Difference Time-Domain Simulation of Ultrasonic Wave Propagation by Using Parallel Processing

Atsushi HOSOKAWA

ABSTRACT

In recent years, a finite-difference time-domain (FDTD) method has been used to simulate various phenomena of ultrasonic wave propagations. The FDTD method has some advantages, e.g., it is able to easily calculate a temporal waveform because of a time-domain method. On the other hand, enormous computer performances, CPU and memory, are required for an accurate simulation in three dimensions (3D) because these requirements increase with the spatial region of the simulation model. In this study, the reduction of computation time and memory was attempted using four personal computers (PCs) connected with a local network. The exchanges of the data between PCs were performed by utilizing a message-passing interface (MPI). The ultrasonic pulse wave propagating through water-saturated honeycomb ceramics, that is the phantom of a cancellous bone, was simulated using the 3D FDTD method with parallel processing, and the computation time and memory used in this simulation were measured to evaluate the performance of the parallel FDTD method.

KEY WORDS: finite-difference time-domain (FDTD) method, parallel processing, message-passing interface (MPI), ultrasonic wave propagation

1. はじめに

近年、超音波伝搬現象のシミュレーション手法として、時間領域差分法 (Finite-Difference Time-Domain method: FDTD 法) が頻繁に用いられている¹⁾。FDTD 法は、時間領域における計算のため時間波形が容易に得られる、シミュレーション対象のモデル化が比較的簡単である等、多くの利点を有している。他方、モデルの領域とともに、計算に必要な時間およびメモリ量が著しく増大する欠点がある。海綿骨のように立体構造を有するシミュレーション対象については、三次元 FDTD 法を用いなければ正確な結果は得られないこ

とが以前の研究^{2,3)}で示されている。しかし、三次元 FDTD 法では膨大な計算時間とメモリ量を要するため、計算機の急速な発展が見られる現在においても、それは容易とは言えない。

本研究では、三次元 FDTD 法の並列演算を行うことによって、計算時間とメモリ量の低減を試みた。複数台のパーソナルコンピュータ (PC) をネットワーク接続した並列計算機を構築するとともに、複数の計算プロセスで動作する三次元 FDTD 法のプログラムを作成した。並列演算に必要とされるプロセス間 (PC 間) のデータの転送 (メッセージ交換) は、MPI (Message-Passing Interface)⁴⁾を利用して行われた。

*電気情報工学科

この並列計算機を用いて、水で飽和したハニカムセラミックス中を伝搬する超音波パルス波形の計算を行った。計算に必要な時間およびメモリ量を測定し、並列演算 FDTD 法のパフォーマンスについて評価した。

2. 並列演算 FDTD 法

2・1 粘弾性 FDTD 法

粘性損失を考慮した三次元弾性体中の超音波（弾性波）伝搬は、次式のような連立偏微分方程式で表すことができる。

$$\rho \frac{\partial \dot{u}_\xi}{\partial t} = \frac{\partial \tau_{\xi\xi}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tau_{\xi\psi}}{\partial \psi} + \frac{\partial \tau_{\xi\zeta}}{\partial \zeta} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tau_{\xi\xi}}{\partial t} + \gamma_{\xi\xi} \tau_{\xi\xi} = (\lambda + 2\mu) \frac{\partial \dot{u}_\xi}{\partial \xi} + \lambda \frac{\partial \dot{u}_\psi}{\partial \psi} + \lambda \frac{\partial \dot{u}_\zeta}{\partial \zeta} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \tau_{\xi\psi}}{\partial t} + \gamma_{\xi\psi} \tau_{\xi\psi} = \mu \left(\frac{\partial \dot{u}_\xi}{\partial \psi} + \frac{\partial \dot{u}_\psi}{\partial \xi} \right) \quad (3)$$

ここで、 $\xi, \psi, \zeta = x, y, z, v_\xi$ は ξ 方向における粒子速度、 $\tau_{\xi\xi}$ は垂直応力、 $\tau_{\xi\psi}$ は剪断応力、 ρ は媒質密度、 λ, μ はラメの定数、 $\gamma_{\xi\xi}, \gamma_{\xi\psi}$ はそれぞれ垂直応力、剪断応力に対する損失を表す抵抗係数である。

粘弾性 FDTD 法（あるいは、媒質における粘性損失を考慮しない弾性 FDTD 法）の定式化は、応力および粒子速度を空間・時間の両方の領域において離散化し、偏微分を中心差分で近似することで行われる。このとき、離散化された応力と粒子速度は、空間・時間領域において交互に配置される。ある時間ステップにおける全空間グリッドの粒子速度、応力は前の時間ステップにおける粒子速度、応力から得られ、時間ステップ毎に更新される⁵⁾。

2・2 FDTD 法の並列化

並列演算は計算領域を分割することによって実行され、FDTD 法では空間領域を分割する。空間領域を分割すると、分割した領域の境界において空間差分を行うためには隣接する領域のデータが必要となる。粘弾性 FDTD 法（弾性 FDTD 法）の場合、ある領域の境界における応力の計算には隣接領域の粒子速度のデータが必要となり、粒子速度の計算には応力のデータが必要となる。したがって、本研究で取り扱っているような複数の計算機をネットワーク接続した分散メモリ型並列計算機（3・1 節参照）では、計算機間のデータの転送（メッセージ交換）が必要不可欠である。

メッセージ交換ライブラリとして、MPI フォーラムによって MPI (Message-Passing Interface) と呼ばれ

るフォーマットが作成されている⁴⁾。MPI ライブラリは、Fortran および C (C++を含む) で使用することができる。

3. シミュレーション条件

3・1 並列計算機の構築

並列計算機は、分散メモリ型と共有メモリ型に分類できる⁴⁾。分散メモリ型並列計算機は、複数台の計算機がメッセージ交換を行うためのネットワークで接続された計算機で、各計算機の中央処理装置 (CPU) にそれぞれメモリとオペレーティングシステム (OS) が存在する。共有メモリ型並列計算機では複数の CPU が 1 つのメモリを共有し、1 つの OS で管理が行われる。本研究では、入手容易な市販の 4 台の PC を使用して分散メモリ型並列計算機を構築した。

使用した PC のスペックは、CPU : Intel Pentium 4 プロセッサ 660 (クロック周波数 : 3.6 GHz)、メモリ : 4 Gbyte であり、PC 間のネットワークを 1000BASE-T のイーサネットに接続した。OS として Microsoft Windows XP Professional を使い、MPI の実行を Argonne National Laboratory MPICH2 (フリーソフトウェア) を用いて行った。MPICH2 には、MPI ライブラリだけでなく並列ジョブを管理するアプリケーションも含まれている。

3・2 プログラムの作成

Intel Visual Fortran 9.0 を利用して、FDTD 法のプログラム作成を行った。まず、1 台の PC (1 つの計算プロセス) で動作するプログラムを作成し、これを基にして 2 台以上の複数台 (複数プロセス) で動作するプログラムを作成した。したがって、後者と前者のプログラムの違いは、計算する空間領域を分割していることと領域境界におけるメッセージ交換を行っていることだけである。

3・3 シミュレーションモデル

水で飽和したハニカムセラミックス中を伝搬するパルス超音波のシミュレーションを行い、並列演算 FDTD 法のパフォーマンスを評価した。そのシミュレーションモデルを図 1 に示す。計算領域を $15 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ とし、送波面および受波面から 2.5 mm の距離の水領域を挟んで $10 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ をハニカムセラミックス領域とした。ハニカムセラミックス領域における計算では 2・1 節で説明した粘弾性 FDTD 法を用いたが、水領域における計算では変数および計算式の数が少ない音響 FDTD 法^{2,3)}を用いた。

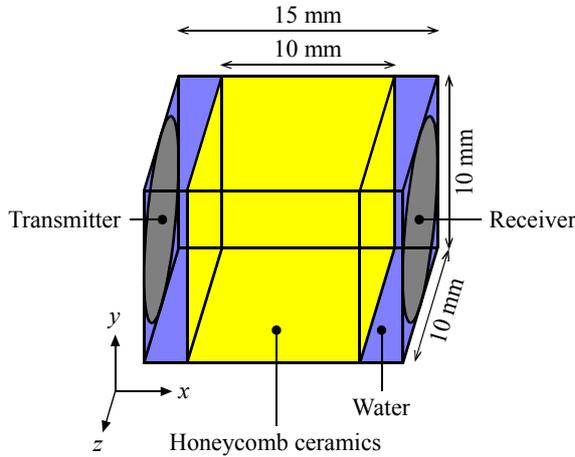


図 1 シミュレーションモデル

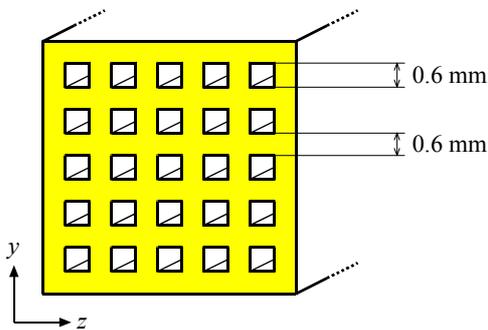


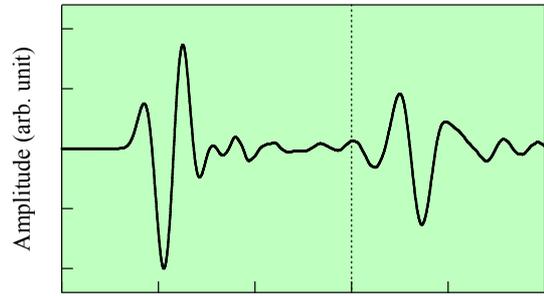
図 2 ハニカムセラミックスモデル

表 1 セラミックスと水の物理パラメータ値

	セラミックス	水
ラメの定数 λ	11.2 GPa	2.2 GPa
ラメの定数 μ	7.5 GPa	0
密度 ρ	1100 kg/m ³	1000 kg/m ³
抵抗係数 $\gamma_{\xi\xi}$	2.5×10^5	2.5×10^3
抵抗係数 $\gamma_{\xi\nu}$	5.0×10^5	0

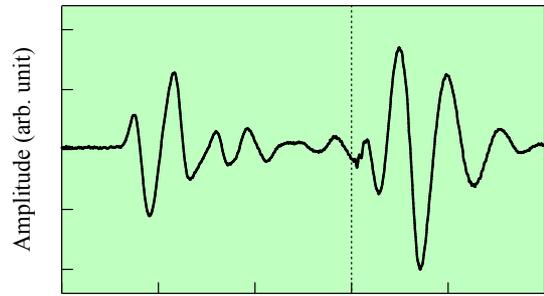
送・受波面は直径 10 mm の円形とした。Hamming 窓をかけた正弦波一波を送波面に垂直な粒子速度に入力し、受波面における音圧の総和を出力とした。超音波の反射を抑制する吸収境界を仮定して、計算領域の周囲に Higdon 二次の吸収境界条件⁹⁾を適用した。空間刻みは 50 μm (空間グリッド数は 300 \times 200 \times 200)、時間刻みは 4 ns とし、20 μs (時間ステップ数 5000) まで計算を行った。

ハニカムセラミックスモデルの構造図を図 2 に示す。この構造は、以前の研究^{7,9)}において海綿骨ファントム (模倣試料) として使用したハニカムセラミックスの構造と同じである。ただし、実際のハニカムセラミックスの表面や間隙にわずかな凹凸が存在していた (滑



Time (2 $\mu\text{s}/\text{div.}$)

(a) 計算波形



Time (2 $\mu\text{s}/\text{div.}$)

(b) 実験波形 (文献 8, 9)

図 3 水で飽和したハニカムセラミックス中を伝搬する超音波パルス波形

らかではなくざらざらしていた) が、モデルではそれを無視した。また、実際と同様に、間隙中は水で飽和されているものとした。表 1 に、シミュレーションで用いたセラミックスおよび水の物理パラメータの値をまとめた。

4. シミュレーション結果

4.1 計算波形の観測

水で飽和したハニカムセラミックス中の超音波伝搬波形を図 3 に示す。図 3(a) は FDTD 法を用いて計算された波形である。なお、この波形は PC の台数 (1 ~ 4 台) に依存しなかった。図 3(b) は以前の実験^{8,9)}によって得られた波形である。ただし、実験では意図しない反射波が観測されないように、送・受波器間距離を 75 mm (シミュレーションでは 15 mm) とした。この伝搬距離の違いを調整するために、水中のみを超音波が伝搬した場合の時間 (図 3 に点線で示した) を基準として、図 3 の波形は表示されている。

計算波形、実験波形ともに、水中よりも早い時間で伝搬した波 (高速波) と水中とほぼ同じ時間で伝搬した波 (低速波) の二波が観測できる。さらに、両波形

表2 PCの台数に対する計算時間およびメモリ量の変化

PCの台数	計算時間	メモリ量
1台	153 min	760 Mbyte
2台	55 min	410 Mbyte
3台	41 min	285 Mbyte
4台	33 min	220 Mbyte
1台(2プロセス)	108 min	820 Mbyte

において高速波に小さな波が続いていること、低速波の立ち上がりの振幅が小さいことが分かる。これらは、間隙のエッジ部分で生じた回折波による影響である(詳細は文献9の中で検討されている)。このように、高速波、低速波の二波が見られること、回折波の影響が見られることなど、計算波形と実験波形は類似している。したがって、シミュレーションは適切に実行されたと言える。

計算波形と実験波形を比較すると、高速波と低速波の振幅の大小関係が逆になっている。弾性FDTD法を用いた以前の研究⁹⁾では、この原因は媒質における粘性損失を考慮していないことであると考えた。しかし、損失を考慮しても同様の結果となったことから、媒質(セラミックス)における損失が原因ではなく、ハニカムセラミックスの構造に原因があると推察できる。すなわち、実際のハニカムセラミックスに存在するわずかな凹凸による散乱のために実験波形の高速波振幅は小さくなったと考えられる。

4・2 計算時間およびメモリの測定

3章で示した条件下で、単一のPCを用いて計算した場合と2~4台のPCを用いて並列演算した場合の計算に必要な時間および1台当たりのメモリ量を測定した。計算プロセスの数はPCの台数と同じ、すなわち1台のPCに対して1プロセスを割り当てた(後述するように、1台のPCに2プロセス以上を割り当てることも可能)。計算時間、メモリ量を測定した結果を表2に示す。表2より、PCの台数を増やすと計算時間、メモリ量ともに減少しており、並列演算の効果が現れていることが分かる。

アムダールの法則より、通常は分割することができない共通の計算領域が存在するため、 n 台の計算機を用いた並列計算機の計算時間は1台の計算時間の $1/n$ より長くなる。表2を詳細に見てみると、2, 3, 4台のPCを用いた場合のそれぞれの計算時間が1台の場合の $1/2$, $1/3$, $1/4$ より短くなっている(アムダールの法則に反する)。この原因について検討するために、2つ

の計算プロセスを1台のPCに割り当てた場合の計算時間の測定も行った。この測定結果も表2に示した。1つの計算プロセスの場合と比較して、計算時間が短くなっていることが分かる。したがって、1プロセスで動作するプログラムは複数プロセスで動作するプログラムよりも計算効率が悪いと言える。並列演算のための空間分割を行う前に、計算方法の違い(粘弾性FDTD法と音響FDTD法)のためハニカムセラミックス領域と水領域の分割を行っており、この分割が計算効率に影響を与えたと思われる。なお、メモリ量の測定結果にはアムダールの法則との矛盾は見られなかった。

4・3 並列演算のパフォーマンス

表2の測定結果よりPCの台数を無限大とした場合の計算時間とメモリ量(1台当たり)を概算すると、約10 min、約30 Mbyteとなった。これらは共通領域の計算およびメッセージ交換に必要とされ、これらを軽減することによって並列演算のパフォーマンス向上を図ることができる。

PCの台数が増えると、PC間のメッセージ交換に要する時間が問題となることがある⁴⁾。しかし、本研究で作成した並列演算FDTDプログラムにおいてこの問題は生じない。本プログラムでは、一方向(x 方向)においてのみ並列演算のための空間分割を行っており、分割した領域を順にR1, R2, R3, R4, ...とすると、R1とR2, R2とR3, R3とR4, ...の間でメッセージ交換を行わなければならない。まずR1とR2, R3とR4, ...の間のメッセージ交換を同時に行い、その後でR2とR3, ...の間のメッセージ交換を同時に行うようにしたので、PCの台数が増えてもメッセージ交換に要する時間は変わらない(ただし、2台の場合の時間は3台以上の場合の半分となる)。

共通領域の計算およびメッセージ交換を全てのPCで同時に実行すれば、PCを増やしてもこれらに要する時間はほとんど問題にならない。しかし、メモリ量は問題となる。並列演算に伴って増加する1台のPCにおけるメモリ量は、共通の変数と隣接する領域で共有する境界の変数に使用されるメモリ量である。PCが増えると、1台当たりのメモリの増量は変わらないが、並列計算機全体のメモリの増量はPCの台数に比例して大きくなる。

5. まとめ

本研究では、MPIを利用した並列演算FDTDプログラムの作成を行い、計算に必要な時間およびメモリ

量の低減を試みた。4 台の PC をネットワーク接続して並列計算機を構築し、水で飽和したハニカムセラミックス中を伝搬する超音波パルス波形のシミュレーションを行った。シミュレーションは適切に実行され、並列演算が計算時間およびメモリ量の低減に有効であることが示された。

謝辞

本研究の一部は、明石工業高等専門学校平成 18 年度教育研究支援経費によって行われた。付記して謝意を表す。

参考文献

- 1) 例えば、N. Endoh, T. Tsuchiya and Y. Saito: “Development of ultrasonic propagation analysis method for estimation of inner state of bone phantom”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, pp. 4598-4599 (2005).
- 2) 細川篤: “FDTD 法による海綿骨中の超音波伝搬波形の数値シミュレーション”、明石高専研究紀要、第 47 号、43-48 頁 (2004).
- 3) 細川篤: “FDTD 法による海綿骨中の超音波伝搬波形の数値解析”、超音波テクノ、第 17 巻、51-55 頁 (2005).
- 4) 青山幸也: 「並列プログラミング入門 MPI 版」、理化学研究所情報基盤センター (2005).
- 5) J. Virieux: “P-SV wave propagation in heterogeneous media: Velocity-stress finite difference method”, *Geophysics*, **51**, pp. 889-901 (1986).
- 6) R. L. Higdon: “Absorbing boundary conditions for difference approximations to the multi-dimensional wave equation”, *Math. Comp.*, **47**, 437-459 (1986).
- 7) 岩佐陽介、細川篤、大谷隆彦: “多孔性セラミックス中の超音波伝搬”、日本音響学会講演論文集、1019-1020 頁 (2001. 3).
- 8) 細川篤: “海綿骨ファントム中の超音波伝搬波形の観測”、超音波エレクトロニクス講演論文集、第 26 巻、5-6 頁 (2005).
- 9) A. Hosokawa: “Ultrasonic pulse waves propagating through cancellous bone phantoms with aligned pore spaces”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **45**, pp. 4697-4699 (2006).