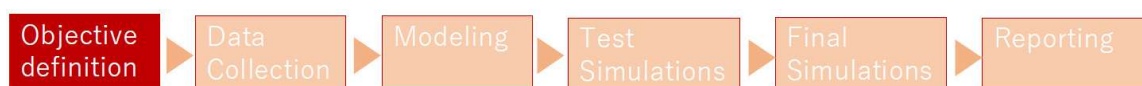


第1章 解析プロジェクトの ODM-TFR フレームワーク

電磁波解析を通して成果を得るためには
プロジェクトの目的理解・目標設定 (Objective definition)
データ収集 (Data collection)
モデル化 (Modeling)
テスト解析 (Test simulations)
本解析 (Final simulations)
解析結果の検証とまとめ (Result reporting)
の流れを意識することが重要である。本書ではこの流れを ODM-TFR
フレームワークとして紹介する。

1.1 プロジェクトの目的理解・目標設定 (Objective definition)



電磁波解析は様々なケースで使用される。例えば現象の基礎的な理解や機器設計を行うための方針策定や最適化設定、プレゼンテーションで使用するための目を引くためのグラフィカルかつ物理に基づいた画像作成、論文執筆のためのパラメータサーベイなど目的はさまざまである。この様々な目的を現象理解、最適化、パラメータサーベイ、グラフィックに大別し、それぞれ重視するポイントをそれぞれまとめる。

1.1.1 現象理解

比較的小さい時間的・ハードウェア的リソースで解析を行う。FDTD法では時系列の電磁界分布を取得できるのでこの機能を活用する。KeyFDTD では解析領域内の特定の面における電界または磁界強度を時系列で表示しアニメーションにまとめる機能がある。これを用いて、解析領域の代表的な 2~3 断面の電磁界強度を時系列で確認すると電磁波の伝搬から定在波の形成までの過程が確認でき現象理解に大いに役立つ。この点は時系列データの出力が特徴である FDTD 法の大きな強みである。

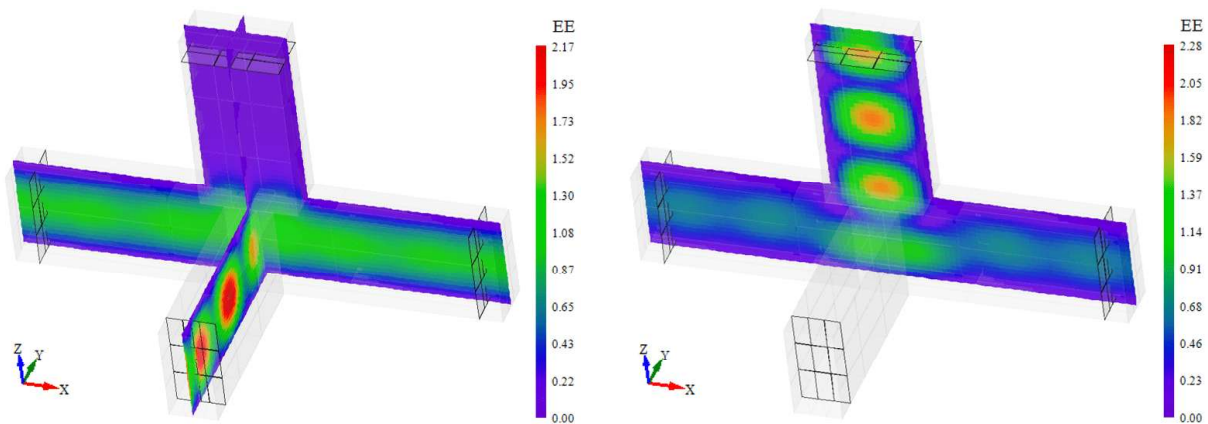


図 1.1 マイクロ波伝送現象で頻繁に用いられる MagicT

1.1.2 最適化

ここでいう最適化は電磁波関連の機器設計で性能や特性が向上する設計値を求めることである。典型的には特定の部品や部位のサイズの最適値を求める。FDTD 法は曲面を再現する精度が低く、曲率の最適化や細かい形状の最適化には向かない場合がある。この場合は FEM や MoM のソフトウェアの使用を検討する。FDTD 法でも直線的な位置関係や寸法の最適化では十分な精度が得られる。解析対象の特徴を見極めることが重要である。最適化項目は多くても 3 パラメータ、通常は 2 パラメー

タ以下にすることが一般的である。多数パラメータを扱う場合、近年では AI を活用する例もあるが、本書の趣旨には含まれないので割愛する。

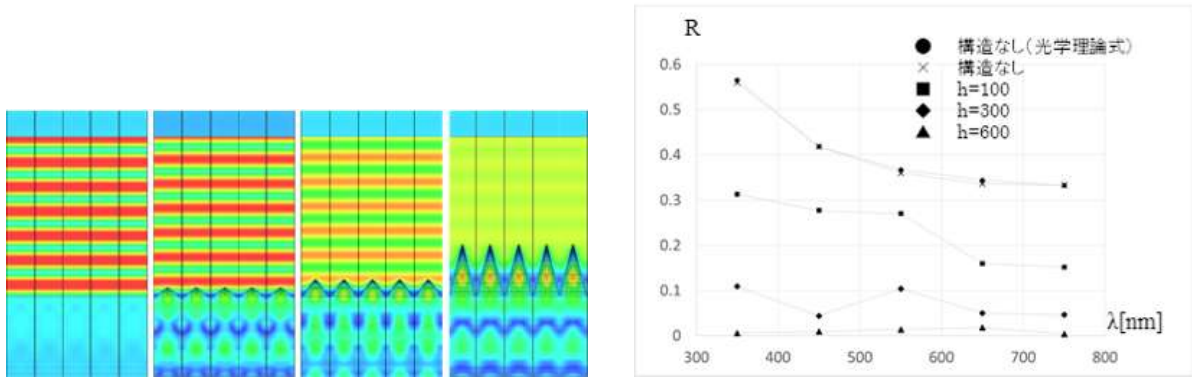


図 1.2 Si 単結晶上の MothEye 構造が光透過率に及ぼす影響の評価

1.1.3 グラフィック

宣伝や興味を引くためのアイキャッチ画像、プレゼンテーションでの印象的なアニメーションなどをシミュレーションを基に作成することは専門の研究者からは邪道扱いされる。著者は元々流体解析 (Computational Fluid Dynamics) が専門であるが、流体解析結果画像を宣伝にした際に「これは CFD ではなく CFG (Computational Fluid Graphics) だ」と揶揄された経験もある。一方で研究内容を端的にまた魅力的に伝えることの出来るグラフィックの作成は価値があり、このようなシミュレーションも積極的に行われることも増えてきた。これを目的とする場合が最も解析リソースが必要になるケースが多い。緻密なモデル化のために CAD データを準備することが多く、またその形状に見合ったメッシュが必要となる。緻密なモデル化が必要という意味では FEM が用いられることも多いが、FDTD でも同様のプロジェクトを実施することは一般的である。解析結果が得られた後もどのような図化処理を行うかで、印象が全く異なるため描画方法 (コンター、ベクトル、流線など) を様々組み合わせる、それぞれの色味を調整するなど非常に

多くの工数がかかる。この分野は AI による自動生成に一部代替される傾向にあるが、本質的な技術力をアピールする意味でこの種の解析プロジェクトも引き続き行われていくであろう。

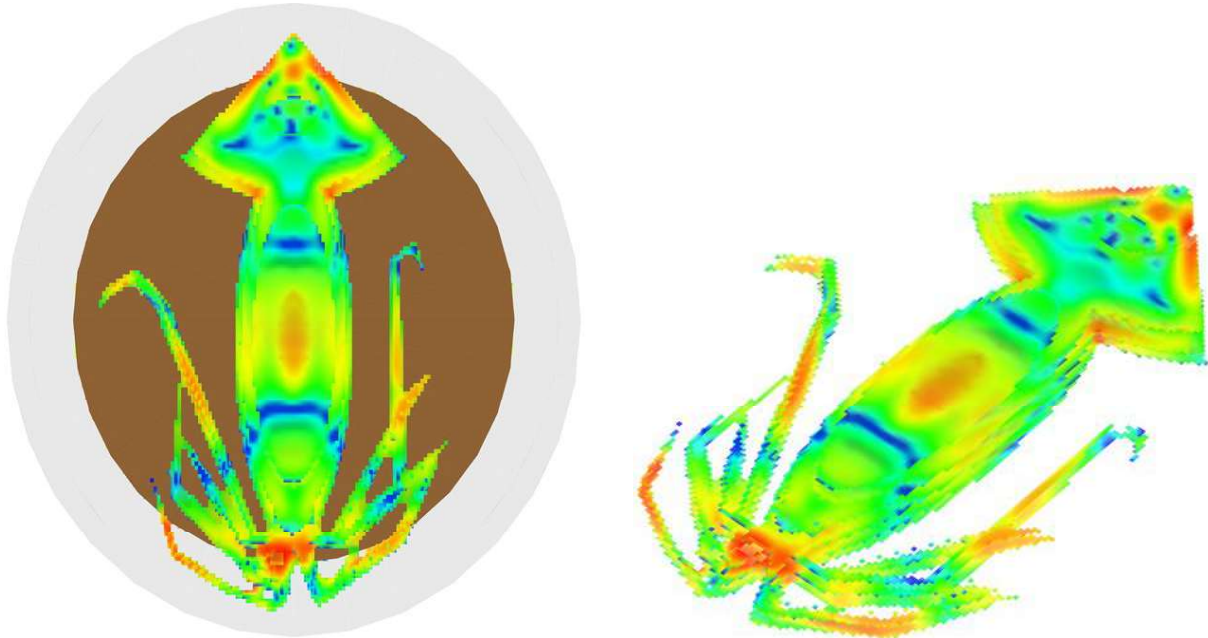


図 1.3 電子レンジ中のイカの加熱量分布

1.1.4 パラメータサーベイ

FDTD 法が最も強みを発揮するパラメータサーベイは周波数または波長に対する分布を求める解析である。ガウシアンパルスを入射し時系列データを離散フーリエ変換で周波数領域に変換できることは 章で説明したとおりである。多くの場合これに前節で述べた形状や位置関係に関するパラメータを加えて検討する。重要な点は極力格子依存性が無いように同じ格子ですべてのパラメータモデルを扱えるよう工夫する。一方でパラメータサーベイは多くのパラメータを扱うことが多いため一つ一つの計算をメッシュを極力減らして、小規模化することを心がける必要がある。

1.2 データ取得 Data collection



解析プロジェクトの具体的な作業の最初は解析対象のデータ収集である。データにはサイズや形状はもちろん含まれるが解析対象の物質の誘電物性の取得は電磁波解析では特に重要である。多くの誘電物性は論文やインターネットを検索することで調査が可能だが、マイクロ波～テラヘルツ波領域のイオン溶液や赤外～可視～紫外領域の金属および金属酸化物など誘電率の実部が負になるような物質はモデル化が必要である。また解析プロジェクトで使用できるリソースを明らかにしておくことも重要である。計算リソース（CPU やメモリ容量）を明らかにしておくことは基本だが、解析プロジェクトに使える人的リソースの把握も重要である。特に所学者にとっては解析プロジェクトは片手間で進めることはできず短時間でも専従が基本である。もし時間リソースが1日なら1日で成果を出すように解析プロジェクトを設計するのが成果を挙げるポイントである。

1.3 モデル化 Modeling



誘電率の実部が負になる物質では構成方程式??が成り立たず conventional-FDTD 法では扱えない。この場合は電界と電束密度の関係を時系列で考慮する RC-FDTD 法の使用が必要でかつ分散モデルパラメータを決定する。次に形状データを作成しそれぞれの物体に対して物

性を割り当てることで数値計算用の空間モデルを作成する。このデータを基に最終的に解析するモデルを小規模メッシュでモデル化したテスト解析用モデルを作成する。この小規模化は解析領域の一部取り出しや最低限度のメッシュ密度の設定、周期構造を仮定することによる解析領域の縮小などの手法を用いる。また高誘電率の物質を扱う場合は波長短縮分に相当させてメッシュを小さくする必要があるがこれは解析メッシュの増加の原因となる。このためテスト解析では誘電率を低く設定したり、その部分の解析結果が全体の目的ではない場合は空間との平均物性を使用することでメッシュ幅を確保してその数が極端に多くならないような工夫をする。

1.4 テスト解析 Test simulations



テスト解析では本番解析を小規模化したモデルを作成しテスト解析を行う。簡単な現象理解を目的とする場合はこの「テスト解析」で十分目的を果たす場合もある。もしテスト解析で発散したり明らかに非物理的な解が得られた場合はそれらの問題をまず解消する必要がある。非物理的な解が得られる原因はほとんど設定の誤りによるものである。確認すべき点は、解析領域および物体への物性割り当て、励振周波数およびその単位、長さ単位、境界条件、励振源の電界と磁界の向きなど多岐にわたる。

発散は「誤り」でなくても発生する可能性がある。以下の表にまとめたとおり、大きすぎるタイムステップ、波長に対して粗すぎるメッシュ、境界条件近くの励振源、1メッシュ厚みしかない物体物性の割り当て、極端なパラメータが設定された分散モデルなどは発散の原因となるため重要な確認事項である。

表 1.1 発散の原因と対処法

原因	対処法
タイムステップ	タイムステップまたは CFL 数を小さくする
粗いメッシュ	短縮した波長 λ に対してメッシュ幅が $\lambda/10$ 以下になるようにメッシュ数を増やす。または解析領域を小さくする。
解析領域境界近くの励振源	(特に吸収境界条件を用いている場合) 励振源と解析領域境界の間には 5 メッシュ程度配置されるように位置関係を調節する
厚み 1 メッシュの物体・空隙	メッシュを増やして 2 メッシュ含まれるように変更するか、再現することをあきらめる。解析の目的によって方針が正反対になるので注意が必要
分散パラメータの問題	RC-FDTD 法で Lorentz モデルまたは Drude モデルを扱う場合は共鳴周波数 ω_0 は減衰定数 γ より大きい必要があります。

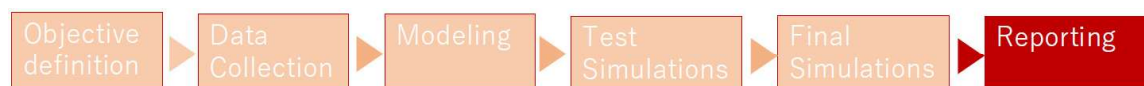
テスト解析の結果が得られたら、解析結果の分析方法に関しても妥当性を検証する。例えば反射・透過・吸収を解析する場合には 章で述べたように様々な手法が存在するが、どの手法を用いれば目的に最も適うデータが取得できるかこの段階で検証する。テスト解析用のモデルが原因で所要のデータ取得が出来ない場合はモデルを再検討し再度テスト解析を行う。中途半端な状態で本解析に進むことは、時間的・人的リソースに大きな影響を与える手戻りの原因となるので慎むべきである。このようにして良好な結果が得られた場合は、本解析用のモデル検討に進む。テスト解析の実行時間や解析結果を基に本解析の解析パラメータである解析領域の大きさはメッシュの細かさを決定する。このため、テスト解析は本解析での良好な結果を得るために重要なプロセスであり、最適化やパラメータサーベイを目的とするプロジェクトでは省略すべきではない。

1.5 本解析 Final simulations



解析モデルはリソースに応じて規模を調整する必要がある。テスト解析を経て、本解析用のモデルを決定したら本解析を行う。一般にテスト解析よりも形状を細かく再現し、メッシュが細かい本解析の方が計算が不安定になる傾向が強い。これは非常に狭い空隙などが1メッシュで表現されることで差分近似が十分に行えなくなることが多くなるのが大きな原因である。また解析ステップ数も多いので、発散傾向になる場合は極力早い段階で対処することが重要である。パラメータサーベイの場合は解析数も多く、解析時間もかかるため途中結果の確認を怠りがちになるが、得られた界がすべて発散解だったとなると手戻りコストは非常に大きい。(勿論、心理的ダメージも大きい。)これを避けるために大規模解析やパラメータサーベイでは途中結果の確認は非常に重要である。またパラメータサーベイで解析結果を確認する過程で物理描像と合わせて解析結果の傾向が妥当なものになっているか検証する。もし明らかに物理描像に見合わない結果が得られている場合は、物性値および形状割り当て、周波数、境界条件、励振波形が意図したものになっているかを確認する。特に発散する場合は解析としても成立していないので設定の妥当性を検証するまでもなく解析実行を中止し、設定変更して問題を回避する方法を検討する。確認し誤りを見つけ訂正して再度解析を実行するが、発散ではない場合で誤りがどうしても見つからない場合は物理描像を再検討する。この再検討や再設定は解析に習熟していない場合は困難が伴う場合も多く、慣熟したユーザーや専門の技術者に相談できる体制を用意しておくことが望ましい。

1.6 解析結果の検証とまとめ Result reporting



解析結果が得られたら慎重な検証が必要である。もし明らかに物理描像に見合わない結果が得られている場合は、物性値および形状割り当て、周波数、境界条件、励振波形が意図したものになっているかを確認する。一方で想定とは異なる結果が得られている場合は物理描像を熟慮する。想定と異なる解析結果はしばしば設定の間違いなどが原因だが、想定外の結果が正しい設定によって得られている場合は新たな知見の可能性もある。しばしば想定通りの解析結果が歓迎されるが、想定外の部分に解析を行った意味がある知見が含まれるのである。初学者の論文等では厳密解や実験とよく一致したとして良好な結果と評価する向きがあるがこれは避けたい。厳密解や実験とは異なる点が見つかる、あるいは厳密解や実験の結果に至るメカニズムを解明するなど解析を有益な知見を得るために用いるのが望ましい。