jh240031

波動散乱場の周波数応答の高速掃引法の開発とメタマテリアルデバイス設計への応用

松本安弘（東京科学大学 情報基盤センター）

概要

本研究は，超高性能メタマテリアルデバイス開発に資する他の追随を許さない設計最適化手法を実現するべく，数理・数値解析の両面からアプローチする。すなわち，新規に開発する波動散乱問題の解の高階周波数微分の高速求解法とスパコンによる周波数応答の掃引にかかる計算時間の低減のみならず，最適化ステップの進行に伴う設計対象形状の振動や過度な変形を防ぐ安定化手法も開発する．本研究の最終的なゴールは，実デバイス規模のメタマテリアル設計最適化計算を抜本的に高速化・安定化する新手法を確立することにある．2024 年度は周波数応答の高速掃引法で重要となる高階周波数微分演算における高次離散化法の開発成果等を得た．また $O(N)$ 型高速直接解法のアルゴリズムの実行順序の見直しにより強スケーリング性能を向上させることができた．本研究は 2025 年度の JHPCN 課題としても継続採択されており，2025 年度は数理面のアプローチに重点を置き，高速化に資する開発と最適化手法の高度化に資する開発の両面を引き続き推進する．

1　共同研究に関する情報

1.1　共同研究を実施した拠点名

- 東京科学大学 情報基盤センター
- 京都大学 学術情報メディアセンター

1.2　課題分野

- 大規模計算科学課題分野

1.3　参加研究者の役割分担

- 松本安弘（代表・東京科学大学）: 研究総括，高速解法，並列化
- 飯盛浩司（副代表・慶應義塾大学）: 高階周波数微分計算法
- 松島慶（副代表・東京大学）: 設計最適化法・高次離散化
- 吉規晃弘（慶應義塾大学）: 高階周波数微分計算法
- 内田幸太郎（慶應義塾大学）: 高速解法
- 友安恵吾（慶應義塾大学）: 高階周波数微分計算法
- 伊藤博望（東京大学）: GPU 実装・高次離散化

2　研究の目的と意義

メタマテリアルは負の屈折率を持つかのような振る舞いをするなどの興味深い特性を持つ人工材料の総称である．その重要な応用として光学的・音響学的クローキング等の実現が期待されており，これを考案した Pendry が 2024 年に京都賞を受賞したことは記憶に新しい．メタマテリアルの持つ自然材料が持ち得ない物性は，対象の波長よりも小さな微細構造により実

現可能となるが，それぞれの微細構造は同一ではなく異なる形状パラメータを持ち得る．したがって従来型の物理的直感に基づく設計には限界があり，最適化理論を援用する最適設計 (逆設計) が注目されている．しかしながら，一般の工業製品を対象とする場合でさえ最適設計においては巨大な自由度の線型方程式を解く必要がある．実際，2017 年に Nature に掲載された Sigmund らの研究グループによる飛行機の翼の最適化では 4.3 億自由度を，2021 年の坪倉らの研究グループによる自動車のボディ全体の最適化では 257 億自由度を要している．以上より，メタマテリアルの最適設計には膨大な計算資源が必要となることは明らかである．

さらには，実際の工学応用を念頭におくと，メタマテリアルの卓越した物性は特定の周波数のみではなく広帯域にわたって発揮されることが望ましく，想定される動作周波数帯域における高解像な掃引解が必要となる他，その散乱・共鳴特性を理解するためにはしばしば非線形固有値解析が必要となる．これらは多くの実・複素周波数に対する数値計算を繰り返すことに帰着される．このように，実デバイス規模のメタマテリアル最適設計は，実現が期待される非直感的な物理現象とその工学応用，自由度の巨大さ，必要な解析回数の多さにより極めてチャレンジングな研究領域となっている．

本研究は，超高性能メタマテリアルデバイス開発に資する他の追随を許さない設計最適化手法を実現するべく，数理・数値解析の両面からアプローチする。すなわち，新規に開発する波動散乱問題の解の高階周波数微分の高速求解法とスパコンによる周波数応答の掃引にかかる計算時間の低減のみならず，設計最適化手法そのものの安定性向上手法も開発する．具体的には，設計最適化における目的汎関数の勾配を関数解析の見地から「正しく」評価することにより，最適化ステップの進行に伴う設計対象形状の振動や過度な変形を防ぐ手法を構築する．本研究の最終的なゴールは，実デバイス規模のメタマテリアル設計最適化計算を抜本的に高速化・安定化する新手法を確立することにある．

3　当拠点公募型研究として実施した意義

実デバイス規模のメタマテリアル設計最適化は，単一専門領域の追求だけでは決して成立しない学際研究テーマであり，専門性の結集とスパコンの計算資源が本研究の遂行に不可欠であり，JHPCN の枠組みによる共同研究として実施する意義があった．申請代表の松本は高速解法アルゴリズム開発に専門性を有し，主に高速直接解法の開発を担当した．また松本は東京科学大学 情報基盤センターが運用するスーパーコンピューター TSUBAME4.0 の運用に携っており，並列計算や GPU 活用の知見も活用できた．申請副代表の飯盛は波動解析に専門性を有し，主に解の高階周波数微分を応用した解析回数の低減手法に関わる開発を担当した．申請副代表の松島は設計最適化の数理に専門性を有し，主に設計最適化の安定性向上手法の開発を担当した．松本・飯盛・松島による共同研究体制は 2023 年 7 月から週 1 回実施している 3 者による研究ミーティングから派生したものであり，スピード感をもった連携による成果創出を実現できた．

4　前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当なし．

5　今年度の研究成果の詳細

2023 年度は次の 3 つのテーマに取り組んだ．

- A. 解の高階周波数微分計算への高速解法の応用
- B. 設計最適化の安定化手法
- C. ハードウェア活用による大規模高速化

本報告書で用いる文献引用の番号は，JHPCN ウェブサイトの本課題のページ (https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh240031) の業績一覧に対応する．テーマ A の成果は 4 本の査読あり学術論文 [1, 2, 3, 4] として出版され，[6, 7, 8, 9, 10, 11] が国際会議発表として口頭発表され，また [14, 15, 16, 20, 21, 22, 23] が国内会議発表として口頭発表された．特に，[8] は国際会議における招待講演であった．また [25] は国内学会における招待論文であり，同タイトルで招待講演も実施した．テーマ B の成果は国際会議発表 [5] として口頭発表され，[12, 13, 17, 19] が国内会議発表として口頭発表された．テーマ C の成果は国内会議発表 [18] として口頭発表された．

テーマ A における査読あり論文を中心に，得られた成果の要点を説明する．テーマ B および C については，今年度は査読あり論文は出版されていないが，国際論文誌へ投稿中の成果および，投稿準備を進めている成果がある．

5.1 A. 解の高階周波数微分計算への高速直接解法の応用

必要な解析回数の削減のためには，波動解析における解の高階周波数微分を応用することが有効と考えられる．これは，いくつかの周波数における解を周波数方向の微分解も含めて求めておけば，周辺の周波数帯の解は補間により構成できるのではないか，という発想に基づく．本手法では解の高階周波数微分の計算速度が全体性能に直結するため，その計算法の検討は慎重に行う必要がある．N 体問題のみならず偏微分方程式の高速解法としても重用される FMM (高速多重極法) を用いることが自然にも思われるが，解の高階周波数微分の計算アルゴリズムを検討すると，同一の係数行列をもつが右辺が異なる線型方程式を微分の 階数 $+ 1$ 回だけ解くことになると気がつく．FMM は GMRES などの反復解法を併用するため，同一の係数行列をもつ特性を活かせず，そのまま微分の「階数 $+ 1$」倍程度の計算時間を要する欠点がある．そこで FMM のアルゴリズムを応用した $O(N)$ 型高速直接解法の活用を検討した．高速直接解法は圧縮と求解の 2 プロセスから構成され，計算時間を大部分を占める圧縮はほとんど右辺に依存せず実行できる．一度線型方程式の係数行列に対して圧縮を実行しておけば，古典的な LU 分解のように，複数の右辺に対するそれぞれの解を圧倒的な低コストで求められる．

同一係数行列を持つ「微分階数 +1」個の線型方程式の求解高速化に向け，飯盛の fortran90 コードと松本の C++ コードのインターフェース調整および，高階周波数微分版の低ランク近似表現の検討まで完了した．概ねコード実装ができつつあり，今後評価を進める予定である．

上記検討と並行し，種々の高速化のアイデアの具現化を進めたことにより，4 本の査読付き論文成果を得たためその内容を報告する．

5.1.1 積分方程式の高次離散化手法の周波数微分演算への適用

指数オーダーで数値計算精度が収束する高次の離散化手法は極めて効果的な高速化手法と捉えられる．積分方程式の高次離散化手法である Kress の選点法は指数オーダーの収束速度をもつことが知られているが，その構成方法は特異性のある特殊関数の級数展開に関連している．そのため級数展開表示に周波数微分演算を適用できるかは自明ではなく，文献 [3] にて検討を

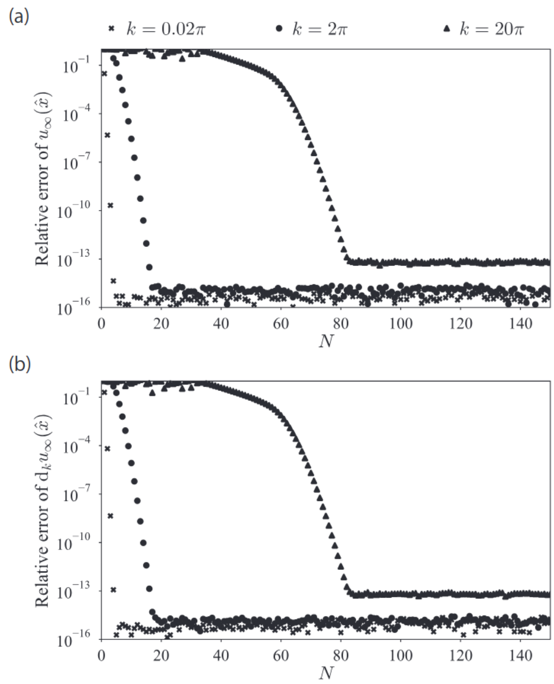

図 1　指数オーダーの収束速度を持つ Kress の選点法を円盤型の散乱体による (a) 遠方場振幅の計算と (b) その周波数微分演算に適用．文献 [3] より引用．横軸の N は 1 つの散乱体に使用する選点の数を表す．2 次元の波動散乱問題をたかだか数十点の選点で 10^{-13} 程度の精度を達成．

行った．図 1 に示す通り，Helmholtz 方程式に支配される 2 次元の波動散乱問題の遠方における振幅の周波数微分をわずか数十点程度の選点を用いて 10^{-13} 程度の精度での計算することに成功した．今後，3 次元問題への適用法を検討する予定である．

5.1.2　弾性散乱問題における $O(N)$ 高速直接解法の開発

波動散乱は光学や音響学だけでなく，例えば機械材料周辺の振動を記述する動弾性学の中にも現れる．そのためメタマテリアルの適用可能性は極めて広範囲にわたる．これまでスカラー波動問題 (Helmholtz 方程式) を対象として高速直接解法を開発してきたが，これをベクトル

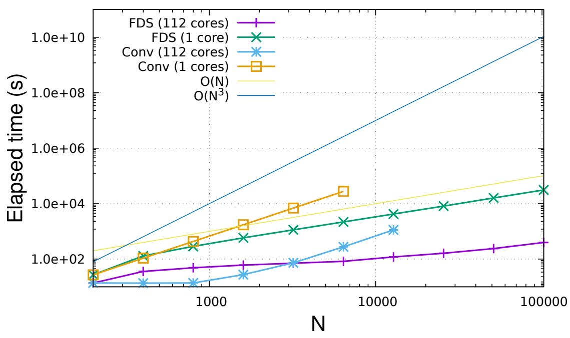

図 2　問題規模に対する計算時間．文献 [1] より引用．N は離散化後の節点数．2 次元の動弾性問題を $O(N)$ の時間で解くことができている．また，優れた強スケーリング並列性能が確認できる．

波動により記述される動弾性学に基づく散乱問題へ拡張できれば，研究成果の波及効果をより増大させることができる．

これまでにも弾性波動散乱問題において高速直接解法は提案されていたが，未知数の数 N に対し計算時間が $O(N)$ となる高速直接解法は我々の調査では見つけることができなかった．そこで，スカラー波動問題で高速解法を開発してきた知見を展開し，ベクトル場の低ランク近似表現方法を文献 [2] にて検討した．その低ランク近似表現を用いて $O(N)$ 型の高速直接解法を 2 次元の動弾性問題に拡張した [1]．図 2 の通り，開発した動弾性問題向け高速直接解法は $O(N)$ の時間複雑性と良好な強スケーリング性能を示した．

5.1.3　3 次元スカラー波動問題における高速解法の開発

5.1 の通り，高階周波数微分の効率算法には高速直接解法が有効と考えられるが，高速直接解法は Krylov 部分空間法のような伝統ある反復解法と比較して研究例が少なく，現状では異なる材料から成る複数層介在物による散乱等の複雑な問題への適用方法は十分に議論されて

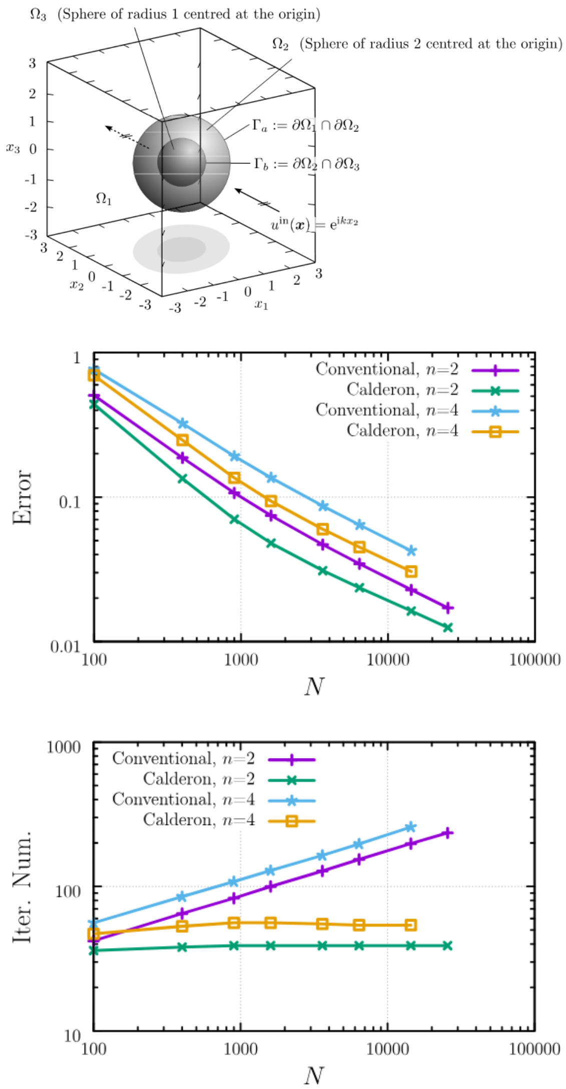

図 3　(上) 数値実験に用いた 2 層構造を有する 3 次元散乱体の配置．(中) 解析解に対する相対誤差．(下) 散乱体の離散化数を増加させたときの GMRES の反復回数の変化．Conventional は従来の定式化であり，Calderon が提案する改良型の定式化．文献 [4] より引用．

いない．したがってこのような複雑な問題向けに，優れた反復解法の手法開発もまた必要である．Burton-Miller 型境界積分方程式は，定式化由来の「偽」の固有値分布から高精度解析が期待できる一方，悪条件となるため反復解法の収束が遅いことが知られている．文献 [4] ではこの積分方程式を作用素の並び替え等の簡単な操作だけで良条件化する定式化法が 3 次元問題においても有効に機能するかを検討した．図 3 に示す通り，2 層の球型介在物に対し，従来型の定式化 (Conventional) では離散化後の要素サイズに依存して GMRES の反復回数が増加してしまっているが，提案する定式化 (Calderon) を用いた場合，GMRES の反復回数を一定に保つことができた．今後，高速多重極法を用いた高速化を行い，性能検証を行う予定である．

5.2　B. 設計最適化の安定化手法

メタマテリアルデバイス設計の手法として形状・トポロジー最適化の利用を検討している．特に勾配法に基づく最適化を念頭に，メタマテリアルの特性の摂動に関する理論的・数値的考察を行った．具体的には音響メタ構造の共鳴がある作用素の摂動に対して不安定となる現象を発見し，国際会議 [5] および国内会議 [17] にて発表した．また，結び目のエネルギーに着目することで境界形状の自己交差に制約を課す最適化アルゴリズムの検討を行い，得られた成果を国内会議にて発表した [24]．

5.3　C. ハードウェア活用による大規模高速化

5.3.1　(C1) 分散並列化による大規模問題対応準備

1 スレッド動作していた境界要素法の高速直接解法コードを OpenMP で並列化した．並列化の際に，スレッド同期回数が減るようアルゴリズムの修正法を提案した．中間報告時点で Camphor3 にて約 60% の強スケーリング効率であったところ (発表 [21])，弾性散乱問題へ手法を拡張した文献 [1] では図 2 の通り，Camphor3 にて約 70% の強スケーリング効率を得た．

高度な分散並列実装はまだ開発中であるが，今年度の実装改善により，TSUBAME4.0 の 1

ノード上でも 1000 万自由度を超える境界要素法を解くことができるようになった．計算領域の境界を扱う境界要素法では，領域から境界の 1 次元分の次元低減が可能であるため，自由度の増加に伴う要素代表長さの微細化オーダーにおいて領域型の計算手法よりも優れていることを指摘しておく．

5.3.2　(C2) コードの GPU 化による高速化

Helmholtz 方程式で記述される散乱問題向けの境界要素法コードを GPU 化した．本成果により 2024 年度の計画部分を達成した．本成果は国内会議にて発表された [18].

6　今年度の進捗状況と今後の展望

テーマ A の成果は 4 本の査読あり学術論文 [1, 2, 3, 4] として出版され，[6, 7, 8, 9, 10, 11] が国際会議発表として口頭発表され，また [14, 15, 16, 20, 21, 22, 23] が国内会議発表として口頭発表された．特に，[8] は国際会議における招待講演であった．また [25] は国内学会における招待論文であり，同タイトルで招待講演も実施した．テーマ B の成果は国際会議発表 [5] として口頭発表され，[12, 13, 17, 19] が国内会議発表として口頭発表された．テーマ C の成果は国内会議発表 [18] として口頭発表された．上記の通り多数の研究成果を発表できており，順調に進捗している．

本研究は 2025 年度の JHPCN 課題としても継続採択されており，2025 年度は数理面のアプローチに重点を置き，高速化に資する開発と最適化手法の高度化に資する開発の両面から進める予定である．