jh250045

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

本研究は次世代人工材料であるメタマテリアルの最適設計を抜本的に高速化・安定化する新手法の確立を目的とする．実デバイス規模の最適設計では膨大な自由度の線型方程式を繰り返し解く必要があり，計算負荷とその反復計算の収束の安定性が大きな障壁となっている．2025 年度は，境界要素法の高速直接解法（FDS）の高階周波数微分計算への実装を進めた．また非高階周波数微分計算版のソルバではあるが，スパコン Miyabi-G 上で 32 ノードを使用して約 4000 万自由度の解析を実行できる MPI/OpenMP ハイブリッド並列ソルバを実装した．ならびに，Padé 近似に基づく複素周波数への拡張や Burton–Miller 型積分方程式の良条件化，離散化手法の高度化により，計算効率と精度を大幅に向上させた．さらに，特異な物理現象である例外点を探索する最適設計手法を構築し，主要国際誌へ掲載される等の成果を得た．今後は高階周波数版 FDS の完全実装に重点的に取り組むとともに，実デバイス規模のメタマテリアル最適設計計算手法の実現に資する開発を引き続き進める．

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

- 東京大学 情報基盤センター
- 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）：研究総括，高速解法開発
- 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・広島大学）：最適化法の安定化，非線型固有値解析
- 友安恵吾（慶應義塾大学）：高階周波数微分計算法
- 小谷晴（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）：高速解法開発
- 出口広哲（東京大学）：非線形固有値解析
- 伊藤博望（東京大学）：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り，光学的・音響学的クローキング（いわゆる透明マント）等の実現が期待されている．これはメタマテリアルが特定周波数帯のみ遮断もしくは通過させるフィルタのような働きをするためであり，この応用により，

指定した場所に波動を集中させることで高感度センサが設計されることも期待されている．基礎理論を提唱した Pendry が 2024 年に京都賞を受賞しており，応用研究が盛り上がりを見せている．

メタマテリアルは巨視的には自然材料が持ち得ない物性を持つが，これは膨大な数の微細構造を適切に並べることにより波のふるまいをコントロールした結果である．しかしこの微細構造は，対象とする物理現象の波長よりもさらに小さく，また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が注目されている．最適設計においては，制約条件のもとで目的関数を最大化するために，（例えば 10 kg を上限重量として剛性を最大化する形状を探索するなど）いわゆる順問題を何度も解くことになる．そのため航空機の翼や自動車など，一般の工業製品を対象とした場合には最適設計においては巨大な自由度の線型方程式を繰り返し解く必要がある．一方でメタマテリアルデバイスは実寸サイズが小さいとしても，対象物理現象の波長に合わせて設計された微細構造を大量に配置するため，むしろ解くべき線型方程式の自由度は工業製品の力学的変形等を扱う場合よりも大きくなり得る．さらには，実際の応用を念頭におくと，メタマテリアルの卓越した物性が，ある特定の周波数に対してだけ発揮されればよいという状況を作り出せるとは限らず，広帯域にわたって発揮できるよう設計されることが望ましい．そのため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が壁となっている現状がある．また最適設計において目的関数を発散させず安定的に収束させる手法や，特異な現象に紐づいている（非線形）固有値がどのようなものであるかは十分には解明されていない．

本研究では，メタマテリアルデバイスの設計に資する計算手法として，次の 3 つの開発を目的とする．

- <u>計画 A: 高速化に資する開発</u>
- <u>計画 B: 最適化手法の高度化に資する開発</u>
- 上記 2 計画を融合し，高性能計算基盤上での最適設計手法として確立

2025 年度は計画 A と B の双方にサブテーマを設定し取り組んだ．サブテーマの詳細と進捗状況については**節 5** で報告する．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・安定化した新手法を確立し，高性能計算基盤上で実装することにある．

3 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究は単一専門領域の追求だけでは成立しない学際領域研究であり，専門性の結集とスパコンの計算資源が不可欠のため，JHPCN の枠組みによる共同研究が有効に機能した．申請代表の松本は数値解析手法の開発に専門性を有し，主に解法の高速アルゴリズムの開発や並列化を担当した．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，主に特異な波動現象と非線形固有値との関係に着目した最適化法の開発を担当し

た．松本・飯盛・松島は全員がスパコン上でのプログラム開発経験を持つため，参加学生へのスパコン利用法の指導も問題なく実行でき，将来の HPC を担う若手の育成にも貢献できた．

計算資源としては TSUBAME4.0 を主とした．一方で非線形複素固有値解析で必要となる，球ベッセル関数などの特殊関数の複素数引数版は GPU 未対応のため，この関連テーマでは Camphor3 を利用した．

4 前年度までに得られた研究成果の概要

本課題は 2024 年度に初回採択された課題の継続課題である．

4.1 2024 年度の成果（jh240031）

周波数応答の高速掃引法に，境界要素法の高速直接解法を応用する際のアルゴリズムの検討を行った．さらに，$O(N)$ 型高速直接解法を弾性波散乱問題に適用するとともに [Matsumoto and Maruyama (2025), Engineering Analysis with Boundary Elements **173**, 106148 等]，アルゴリズムの実行順序を見直し強スケーリング性能を向上させた．

また，高階周波数微分演算時においても高次離散化法が適用できることを示した [松島ら (2024), 計算数理工学論文集 **24**, 107–113]．複雑な形状への対応を念頭に，解の高階周波数微分を反復的に構成する際に有効な境界積分方程式の提案も行った [Tomoyasu et al. (2024), Transaction of JASCOME **24**, 43–53]．

5 今年度の研究成果の詳細

サブテーマごとの概要と成果について述べる．なお本文中で引用する文献番号はウェブ入力した成果一覧に対応する (URL: https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh250045)．

計画 A: 高速化に資する開発

- **A-1：解の高階周波数微分計算への $O(N)$ 型高速直接解法の応用**

  周波数応答の掃引計算に必要な解析回数の削減のため，波動解析における解の高階周波数微分の計算に境界要素法の高速直接解法 (FDS) を応用する．今年度の取り組みにより，2 次元散乱問題での計算が概ねできるようになり，その成果を国内会議 [21] にて発表した．しかしながら，OpenMP 並列化コードにバグがあることがわかっており，まだ完全な解消には至っていない．

  また昨年度継続元課題の最終報告書への審査コメントを受けて，非高階周波数微分版のソルバの MPI/OpenMP ハイブリッド実装も進め，その実装で Miyabi-G の 32 ノードで約 4000 万自由度の境界要素法が実行できることを確認した．この成果は国内会議 2 件 [20, 23] で口頭発表した．引き続く数値実験により，この MPI/OpenMP ハイブリッド実装が並列化効率においてほぼ理想的な弱スケーリング性能を示すことがわかっており，この実験結果の一部は国際会議での招待講演で発表した [10]．さらに，昨年度成果である弾性散乱問題への高速直接解法の応用を拡張し，transmission 問題へも適用可能とした成果が Q1 ジャーナル Engineering with Computers に掲載された [7]．この他にも，高速直接解法によく適合する境界積分方程式を検討した結果が査読付き国際論文誌に掲載された [2, 9]．

- **A-2：周波数応答の高速掃引法の複素周波数への拡張による解析回数低減**

  メタマテリアルデバイスには，波動の

共鳴現象を応用するため Helmholtz レゾネータなど特徴的な形状を利用したものがある．その共鳴周波数は非線形固有値問題を解くことで値を推定できるが，非線形固有値解析では複素数の周波数を用いた波動解析が重要になる．そのため，これまで実軸上のみで考えていた周波数応答の高速掃引法を，複素周波数へ拡張する方法を検討した．今年度には複素平面上における Padé 近似に基づく高階周波数微分計算の基礎的な理論の構築と実装を完了することができ，その成果の一部は国際会議 [15] にて発表した．現在，論文投稿に向け，さらに結果を補強するためにバックボーンとなる非線形固有値解析法の改良版の実装に取り組んでいる．

- **A-3：複雑な問題に対応可能な境界積分方程式に基づく解法開発**

  A-1 で検討する FDS はまだ研究例が少なく，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性が十分には確立されていない．したがって複雑な問題向けに，優れた反復解法を開発することで計画の停滞を防止する．Burton–Miller 型積分方程式は，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．本計画では，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 2024 年度の定式化法をさらに改良し，自由選択としていた定数パラメータの選択法を検討した．具体的には，三領域以上の場合に，連立積分方程式のうち，どの領域に由来する積分方程式を Burton–Miller 型で記述すればよいかの判断法と，互いに接する領域の位置関係に基づいた定数パラメータの推奨値を提案した．この成果は国際会議 3 件 [12, 13, 17] および国内会議 4 件 [24, 28, 30, 32] で発表し，さらに Q1 ジャーナル Engineering Analysis with Boundary Elements に掲載された [4]．計画していた高速多重極法 (FMM) との併用は国内会議 [30] で実施している．

- **A-4：新たな離散化手法の定式化と実装による自由度低減**

  多数の散乱体（微細構造）から構成される系の 3 次元解析は非常に大規模となる．2024 年度に構築した 2 次元解析において指数オーダー収束を達成した数値積分法を，球と同相な形状において適切な座標変換法を用いて 3 次元化し，査読付き論文 [6] および国内会議 [31] にて発表した．また，2 次元における高次 Nyström 法を用いた 2024 年度成果を精度保証付き数値計算に拡張し，この成果は査読付き論文 [5] として出版された．

  一方で上記の手法は適用可能な形状に制限がある．別のアプローチとして，多様な形状に対応可能な実用性を維持しつつ，既存手法より簡易かつ高性能な離散化手法を検討した．具体的には，物体を局所的に高次多項式により幾何表現し，その高次多項式上での特異積分の計算法を構築し，自由度の高い境界要素法を実現した．本成果は査読付き論文 [3] および国内会議 2 件 [26, 30] で発表した．

計画 B: 最適化手法の高度化に資する開発

- **B-1：最適設計アルゴリズムの安定化手法の開発**

  最適設計における反復計算収束の安定性は，(境界積分方程式の解に依存する) 目的汎関数の勾配の計算法に大きく依存す

る．この計算に Hilbert 正則化と呼ばれる手続きを用いることで最適化対象形状の振動等が抑制できることを申請副代表の松島らが確認している．しかし A-4 で検討する離散化手法のもとでも Hilbert 正則化による安定化が機能するかは自明ではないため検討が必要であると計画段階では考えていた．しかし実際には，比較的ストレートフォワードに適用が可能であると判明し，別のサブテーマに成果として記述した査読付き論文成果や会議発表の中で用いた最適化手法において，特段の改良なしに活用できている．また，散乱問題以外の複雑な問題においてもこの正則化手法が有効か検証した結果を国際会議 [14] にて発表した．

- **B-2：非線形複素固有値解析に基づく超高性能デバイスの構想検討**

  系のエネルギー散逸に起因して物体表面に波が局在する現象として非エルミート表皮効果が知られており，高感度センサ等の応用が期待されている．このような特異な現象は系の固有周波数に関係するため，非線形複素固有値解析をバックボーンとした最適化手法を開発し，従来存在しなかった高性能デバイス構想を検討するにあたり，必要となる計算法の高度化を図った．

  本計画で注目する特別な固有周波数として，例外点と呼ばれるものがある．これは重複固有値のうち，固有ベクトルも一致するものと定義され，非エルミート表皮効果など特別な共鳴現象と関係があることが知られており，物理学のコミュニティでも研究が活発化している．今年度は，散乱問題の共鳴を正則積分作用素値関数の固有値として特徴づけることにより，作用素の摂動の理論解析と非線形固有値問題の数値解法とを結びつけ，例外点を探索する最適設計手法を構築した．この成果は数理物理学の主要誌の 1 つである Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences に掲載された [1]．また，査読付き論文 [8]，国際会議発表 [11, 16, 18, 19] や国内会議発表 [25, 27, 29, 33, 35] 等，の多くの成果を得た．

- **その他成果**

  境界要素法は有限要素法等の他の計算力学手法に比較して，広義積分や Cauchy の主値もしくは発散積分の有限部分の意味で計算しなければいけない積分項（特異積分項）が存在するため取り扱いに癖があり，利用者が少ない現状がある．境界要素法の特徴を解説し利用者を増加させることを目的に，代表者の松本が幹事を務める土木学会応用力学委員会の計算力学×α小委員会において，第 2 回「境界要素法」講習会（2025 年 5 月）を実施した．講習会では，有限要素法向けドメイン固有言語である FreeFEM に実装されている境界要素法のモジュール（BEM module）の紹介を担当し，2 次元および 3 次元の基本的な境界値問題を境界要素法により手軽に解くためのスクリプトを GPLv3 ライセンスで作成し公開した [37]．特に，transmission 問題や Burton–Miller 法を用いた境界積分方程式の記述法は公式ドキュメントにも記載がないため，解の存在と一意性が保証された定式化による境界要素法を手軽に利用できる環境構築に寄与するところが少なくないと考えられる．本公開スクリプトは査読付き論文誌 Mechanical Engineering Journal に掲載された論文 [9] において新たに開発したコードの妥当性検証にも使用した．

6 進捗状況の自己評価と今後の展望

前節に示した通り，3 本の査読付き論文が主要国際誌に掲載され，合計で 9 本の査読付き論文 (内 6 本が国際誌)，11 件の国際会議発表 (招待講演 1 件を含む)，17 件の国内会議発表 (招待講演 1 件を含む)，1 件のライブラリ公開の成果を創出できているため，高い成果を達成できていると自己評価する．進捗状況についても，A-2, A-3, A-4, B-1, B-2 はすべて計画の 100% 以上に進捗した．唯一 A-1 のみ，多数の成果が出ているものの，高階周波数版の FDS の完成計画がバグにより遅延している．

本課題は 2026 年度も継続課題 jh260048 として採択されており，引き続き計画 A・B を進めていく．特に，遅延する A-1 の高階周波数版の FDS 実装および性能評価を重点的に実施する予定である．また，2025 年度成果のうち，会議発表のみのものについては，論文投稿に向け解法のブラッシュアップや数値実験データの取得も進めていく所存である．