計算数理工学論文集 Vol. 20 (2020 年 12 月)，論文 No. 09-201219 JASCOME

高周波散乱行列と境界要素法に基づく多重散乱解析

A MULTIPLE SCATTERING ANALYSIS BASED ON THE HIGH-FREQUENCY SCATTERING MATRIX AND BEM

松島 慶 [1)]，飯盛 浩司 [2)]，高橋 徹 [3)]，松本 敏郎 [4)]

Kei MATSUSHIMA, Hiroshi ISAKARI, Toru TAKAHASHI and Toshiro MATSUMOTO

1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: k_matusima@nuem.nagoya-u.ac.jp)
2) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: isa@nagoya-u.jp)
3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: toru.takahashi@mae.nagoya-u.ac.jp)
4) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp)

This paper presents a numerical method for multiple scattering problems in two dimensions using a scattering matrix and boundary element method (BEM). We give a new formulation for the scattering matrix based on a plane-wave expansion and show that the matrix can be computed using the BEM. The proposed scattering matrix yields an efficient algorithm for the multiple scattering using the diagonalised representation for the translation operator. Some numerical examples show that the proposed method can solve the multiple scattering problem more efficiently than the conventional scattering matrix without losing the accuracy of the BEM unless the underlying wavelength is not large.

Key Words: Scattering matrix, Multiple scattering, Translation operator, Helmholtz equation, Boundary element method

1. 緒言

メタマテリアルやフォトニック・フォノニック結晶に代表される人工材料は通常の物質と異なる波動特性を示すことが知られており，それらを利用した先進的な波動デバイスの実現が期待されている [1–3]．

通常，これらは特殊な形状の材料から構成される単位胞を周期的に配列した構造としてモデル化され，その物理特性は均質化法により決定される巨視的なパラメータあるいは構造中を伝搬する波の分散関係 (バンド構造) によって議論される．しかし，実際の構造は完全な周期配列ではなく有限な数の単位胞から構成されるため，そのモデルの近似に伴う誤差あるいは構造界面の物理現象を解析するためには，多数の散乱体による多重散乱の解析が必要となる．

境界要素法は外部領域中の散乱問題の有力な数値解法の一つであり，境界の離散化のみで波の放射を厳密に扱うことができる利点を有する．著者らの研究グループは境界要素法による散乱解析・固有値解析とトポロジー最適化に基づく構造設計を用いて電磁波クローキング [4,5]，フォトニック結晶のバンドギャップ最大化 [6]，弾性波モード変換 [7,8]，外部領域において高い Q 値を示す共鳴 [9] などの特異な性質を有するデバイスが実現可能であることを示してきた．

2020 年 10 月 20 日受付，2020 年 11 月 13 日受理

境界要素法は解くべき連立方程式の係数行列が密となるために大規模問題への適用が本来不向きであり，それを解決するために高速多重極法 [10,11] や $\mathcal{H}$ マトリクス法 [12] などの高速アルゴリズムを併用することが一般的である．これらのアルゴリズムは任意形状の領域に適用可能であり，したがって多数の散乱体から構成される多重散乱問題の解法としても有効である．しかし，多くのメタマテリアルやフォノニック・フォノニック結晶が有する幾何学的特徴，すなわち全体構造を単位構造 (の合同変換) に分割できる特徴を考慮すると，その単位構造の散乱特性を利用して大規模な多重散乱問題を小規模問題に置き換える手法が望ましい．

近年，Gimbutas and Greengard[13] は 3 次元 Maxwell 方程式に支配される多重散乱問題に対して，単位構造の散乱行列 (S 行列) を境界要素法によって計算し，その後に多体系の散乱を古典的な多重散乱理論を用いて解く，fast multi-particle scattering と呼ばれるハイブリッドな解法を提案している．この手法は後に 2 次元弾性波散乱問題にも有効であることが示されている [14]．この手法の最大の利点は多体系の幾何学的操作 (散乱体の並行移動・回転) がサイズの小さい行列の代数的操作に置き換わり，この演算は境界要素解析を要しない点にある．この特徴は散乱体配置の寸法最適化問題を解く際に特に有用である [15]．

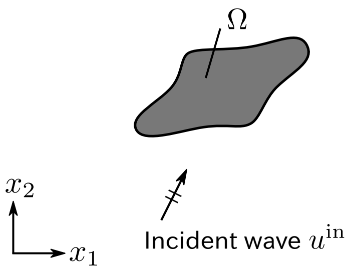


Fig. 1　Scattering by a single scatterer Ω in $\mathbb{R}^2$.

fast multi-particle scattering は解の多重極展開に基づくアルゴリズムであり，したがって高速多重極法と同様にその展開項数の適切な定め方は周波数に依存する．展開項数を M とすると 2 次元問題に関する fast multi-particle scattering に要する計算量は $O(M^2)$ であり，特に高周波域では M を多く取る必要があるために計算コストの増大が問題となる．Gimbutas and Greengard[13] は低周波・高周波版の高速多重極法をレベルに応じて切り替えるアルゴリズムを用いてこれを効率化しているが，これは最下層のレベルの多重極モーメントは円筒波展開に基づくそれを用いることを前提としている．一方で，単位構造 (各散乱体) の大きさに対して考える波が十分に高周波である場合，円筒波展開を経由せず最下層の多重極モーメントも高周波版のそれを用いることで，低周波・高周波の多重極モーメントの変換に要する FFT の計算量 $O(M\log M)$ が不要となり，さらなる効率化が期待できる．しかしながら，このアプローチのためには Gimbutas and Greengard[13] と異なる散乱行列の定義が必要であり，これに伴って散乱体の回転の公式なども新たに導出しなければならない．

本研究は diagonal form を用いた高速多重極法 [16] から着想を得て，Fourier 級数の積分表現を利用した新たな散乱行列 (高周波散乱行列) を定義し，それに基づく 2 次元領域中の多重散乱問題の数値解析法を提案する．まず，散乱場の円筒波展開 (多重極展開) による古典的な散乱行列 (低周波散乱行列) の定義と，その積分表現 (平面波展開) による散乱行列の定義について述べる．これらの散乱行列は境界要素法を用いて容易に計算でき，また散乱体の回転は散乱行列に対する線形代数的操作に対応することを示す．次に，それぞれの散乱体周辺の場の展開中心の変更 (Graf の加法定理) を施すことで，未知の展開係数に関する連立方程式が得られる．ここで，高周波散乱行列を用いた場合，展開中心の変更に対応する演算が対角行列とベクトルの積となり，低周波散乱行列に対するそれと比べて計算量を低減できることを示す．最後に，2 つの散乱行列を用いた多重散乱解析について，その計算精度と計算時間を数値的に検証する．

2. 単体による散乱

2.1. 境界値問題

Fig. 1 のように 1 つの散乱体 Ω が 2 次元空間 $\mathbb{R}^2$ 内に置かれた領域について，角周波数を ω とする入射波 u^{in} の Ω による定常散乱問題を考える．ここで，時間依存を $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ とする全波動場の複素振幅 u は次の境界値問題に支配されるとする．

$$\nabla^2 u(x) + \frac{\omega^2}{c^2}u(x) = 0 \quad x\in\mathbb{R}^2\setminus\overline{\Omega} \tag{1}$$

$$\nabla^2 u(x) + \frac{\omega^2}{\hat{c}^2}u(x) = 0 \quad x\in\Omega \tag{2}$$

$$u(x) := u|_+(x) = u|_-(x) \quad x\in\partial\Omega \tag{3}$$

$$q(x) := \gamma\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_+(x) = \hat{\gamma}\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_-(x) \quad x\in\partial\Omega \tag{4}$$

$$\text{Radiation condition for } u-u^{\mathrm{in}} \text{ as } \quad |x|\to\infty \tag{5}$$

ここに，c，$\hat{c}$，γ および $\hat{\gamma}$ は正の定数であり，$|_+$ と $|_-$ は Ω に対して外向きの単位法線ベクトル n を用いて

$$u|_\pm(x) = \lim_{h\downarrow 0} u(x\pm hn(x)) \quad x\in\partial\Omega \tag{6}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_\pm(x) = \lim_{h\downarrow 0}\nabla u(x\pm hn(x))\cdot n(x) \quad x\in\partial\Omega \tag{7}$$

で定義されるトレースを表す．本稿では境界値問題 (1)–(5) で表されるトランスミッション問題を扱うが，以下の議論を斉次 Dirichlet，Neumann あるいはインピーダンス問題について拡張することは容易である．

2.2. 解の積分表現と境界積分方程式

境界値問題 (1)–(5) の解 u に関して，以下の積分表現が成り立つことが知られている．

$$\begin{aligned} u(x) = u^{\mathrm{in}}(x) &- \frac{1}{\gamma}\int_{\partial\Omega} G(x,y)q(y)\mathrm{d}\Gamma_y \\ &+ \int_{\partial\Omega}\frac{\partial G}{\partial n_y}(x,y)u(y)\mathrm{d}\Gamma_y \quad x\in\mathbb{R}^2\setminus\overline{\Omega} \end{aligned} \tag{8}$$

ここに，G は $k=\omega/c$ と第 1 種 n 次の Hankel 関数 $H_n^{(1)}$ を用いて $G(x,y)=\frac{\mathrm{i}}{4}H_0^{(1)}(k|x-y|)$ で表される 2 次元 Helmholtz 方程式の基本解である．

さらに，解の積分表現 (8) から得られる次の Burton-Miller 型境界積分方程式は実の $\omega>0$ と虚部が零でない $\beta\in\mathbb{C}$ について境界値問題 (1)–(5) と等価であることが知られている [17]．

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}\mathcal{I}-\mathcal{D}-\beta\mathcal{N} & \frac{1}{\gamma}\left(\mathcal{S}+\beta\left(\frac{1}{2}\mathcal{I}+\mathcal{D}^*\right)\right) \\ \frac{1}{2}\mathcal{I}+\hat{\mathcal{D}} & -\frac{1}{\hat{\gamma}}\hat{\mathcal{S}} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} u \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^{\mathrm{in}}+\beta\frac{\partial u^{\mathrm{in}}}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

ここに，$\mathcal{S}$，$\mathcal{D}$，$\mathcal{D}^*$ および $\mathcal{N}$ は次式で定義される積分作用素である．

$$(\mathcal{S}v)(x) = \int_\Gamma G(x,y)v(y)\mathrm{d}\Gamma_y \tag{10}$$

$$(\mathcal{D}v)(x) = \int_\Gamma \frac{\partial G}{\partial n_y}(x,y)v(y)\mathrm{d}\Gamma_y \tag{11}$$

$$(\mathcal{D}^*v)(x) = \int_\Gamma \frac{\partial G}{\partial n_x}(x,y)v(y)\mathrm{d}\Gamma_y \tag{12}$$

$$(\mathcal{N}v)(x) = \mathrm{p.f.}\int_\Gamma \frac{\partial^2 G}{\partial n_x\partial n_y}(x,y)v(y)\mathrm{d}\Gamma_y \tag{13}$$

ここに，p.f. は発散積分の有限部分を表す．また，$\hat{\mathcal{S}}$ と $\hat{\mathcal{D}}$ はそれぞれ $\mathcal{S}$ と $\mathcal{D}$ の k を $\hat{k}=\omega/\hat{c}$ に置き換えることで定義さ

れる積分作用素である．β は Burton-Miller 法の結合定数であり，本研究は $\beta = -\mathrm{i}/k$ を用いる．

2.3. 散乱行列

2.3.1. 円筒波展開による定義

まず，解の積分表現 (8) を用いて散乱場 $u-u^{\mathrm{in}}$ が円筒波で展開できることを示す．任意の展開中心 $c \in \mathbb{R}^2$ と $|x-c| > |y-c|$ を満たす (x, y) について，Graf の加法定理より

$$
\begin{aligned}
G(x,y) &= \frac{\mathrm{i}}{4} H_0^{(1)}(k|x-y|) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n O_n(x-c) I_{-n}(y-c) \\
&\simeq \frac{\mathrm{i}}{4} \sum_{n=-M}^{M} (-1)^n O_n(x-c) I_{-n}(y-c) \qquad (14)
\end{aligned}
$$

が成り立つ．ここに，整数 M は無限和の打ち切り項数を表し，その定め方は後述する．また，I_n と O_n はそれぞれ n 次の Bessel 関数 J_n と $H_n^{(1)}$ を用いて

$$I_n(x) = J_n(k|x|) \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta(x)} \qquad (15)$$

$$O_n(x) = H_n^{(1)}(k|x|) \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta(x)} \qquad (16)$$

で定義される．ここに，$\theta(x) = \tan^{-1}(x_2/x_1)$ は x の偏角である．G の多重極展開 (14) を解の積分表現 (8) に代入し，次式を得る．

$$u(x) = u^{\mathrm{in}}(x) + \sum_{n=-M}^{M} B_n O_n(x-c) \qquad (17)$$

$$B_n = \frac{(-1)^n \mathrm{i}}{4} \int_{\partial\Omega} \left(-I_{-n} \frac{\partial u}{\partial n}\bigg|_+ + \frac{\partial I_{-n}}{\partial n} u \right) \mathrm{d}\Gamma \qquad (18)$$

さらに入射波 u^{in} を I_n で展開し，ある展開係数 $(A_n)_{n=-M}^{M}$ を用いて

$$u^{\mathrm{in}}(x) = \sum_{n=-M}^{M} A_n I_n(x-c) \qquad (19)$$

で表されるとする．このとき，境界値問題の線形性より，$(A_n)_{n=-M}^{M} \mapsto (B_n)_{n=-M}^{M}$ も線形であり，その表現行列を S とすると

$$B_n = \sum_{n'=-M}^{M} S_{nn'} A_{n'} \qquad (20)$$

と書ける．この S は散乱行列と呼ばれ，以降は行列–ベクトル積の表記法を用いて $B = SA$ で表す．

散乱体 Ω が円板かつ c がその中心である場合，S は対角行列でありその成分は円筒関数を用いて書き表すことができるが，一般の形状について解析的にその成分を求めることはできない．本研究では，式 (19) で与えられる入射波 u^{in} について境界積分方程式 (9) を数値的に解き，得られた解を式 (18) に基づいて積分することで行列–ベクトル積 $B = SA$ を評価する．

2.3.2. 平面波展開による定義

前小節では散乱場の円筒波展開に基づき散乱行列を定義したが，本研究では平面波展開に基づく新たな散乱行列の定式化を行う．

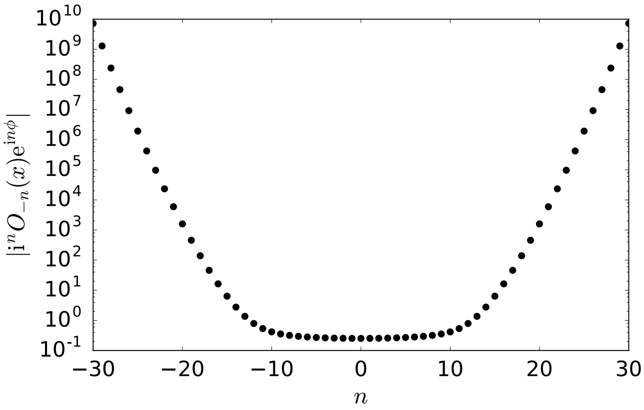


Fig. 2 Absolute value of each summand in (23) with $k = 10$, $x = (1, 0)^T$, and $\phi = 0$.

式 (15) で定義した I_n は次式のように平面波展開できる．

$$
\begin{aligned}
I_n(x) &= \frac{(-\mathrm{i})^n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kp(\phi)\cdot x} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi} \mathrm{d}\phi \\
&= \frac{\mathrm{i}^n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kp(\phi)\cdot x} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi} \mathrm{d}\phi \qquad (21)
\end{aligned}
$$

ここに，$p(\phi) = (\cos\phi, \sin\phi)^T$ である．G の多重極展開 (14) に式 (21) を代入すると次式を得る．

$$
\begin{aligned}
G(x,y) &\simeq \frac{\mathrm{i}}{4} \sum_{n=-M}^{M} (-1)^n O_n(x-c) I_{-n}(y-c) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kp(\phi)\cdot(y-c)} \tilde{O}(x-c, \phi) \mathrm{d}\phi \qquad (22)
\end{aligned}
$$

ここに $\tilde{O}$ は次式で定義される関数である．

$$\tilde{O}(x, \phi) = \sum_{n=-M}^{M} \mathrm{i}^n O_{-n}(x) \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi} \qquad (23)$$

前小節と同様にして式 (22) を解の積分表現 (8) に代入し，次式を得る．

$$u(x) \simeq u^{\mathrm{in}}(x) + \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{B}(\phi) \tilde{O}(x-c, \phi) \mathrm{d}\phi \qquad (24)$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{B}(\phi) = \frac{\mathrm{i}}{8\pi} \int_{\Gamma} \bigg(&-(\tilde{I}(x-c, -\phi) \frac{\partial u}{\partial n}\bigg|_+ (x) \\
&+ \frac{\partial}{\partial n} \tilde{I}(x-c, -\phi) u(x) \bigg) \mathrm{d}\Gamma \qquad (25)
\end{aligned}
$$

同様に，式 (19) で表される入射波 u^{in} は式 (21) を用いると

$$
\begin{aligned}
u^{\mathrm{in}}(x) &= \sum_{n=-M}^{M} A_n I_n(x-c) \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{A}(\phi) \tilde{I}(x-c, \phi) \mathrm{d}\phi \qquad (26)
\end{aligned}
$$

$$\tilde{A}(\phi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-M}^{M} \mathrm{i}^n A_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi} \qquad (27)$$

で書き表すことができる．ここに，$\tilde{I}$ は次式で定義される関数である．

$$\tilde{I}(x, \phi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kp(\phi)\cdot x} \qquad (28)$$

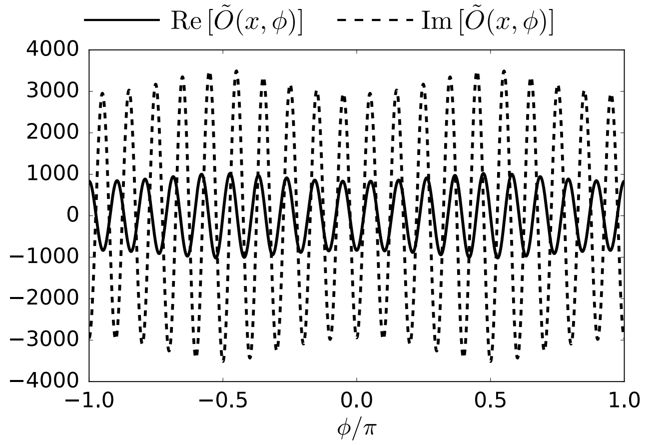


Fig. 3　Real and imaginary parts of $\tilde{O}(x,\phi)$ with $k=10$, $x=(1,0)^T$, and $M=20$.

以上より，関数 $\tilde{A}$, $\tilde{B}:[-\pi,\pi]\to\mathbb{C}$ の間の線形性から

$$\tilde{B}(\phi)=(\tilde{S}\tilde{A})(\phi) \tag{29}$$

となる線形作用素 $\tilde{S}$ を定義できる．数値計算上は $[-\pi,\pi]$ 上の関数 $\tilde{A}$，$\tilde{B}$ を区分線形な基底関数 N_i を用いて $\tilde{A}(\phi)=\sum_{i=1}^{\tilde{M}}\tilde{A}_iN_i(\phi)$，$\tilde{B}(\phi)=\sum_{i=1}^{\tilde{M}}\tilde{B}_iN_i(\phi)$ のように離散化し，$\tilde{S}$ は

$$\tilde{B}_i=\sum_{j=1}^{\tilde{M}}\tilde{S}_{ij}\tilde{A}_j \tag{30}$$

を満たす行列 (高周波散乱行列) として表現する．ここに，自然数 $\tilde{M}$ は $[-\pi,\pi]$ 上の基底関数の数を表す．今，c を中心とする極座標系で u は角度方向に関して $2M+1$ 項の三角関数で展開されているから，式 (24) と (26) に現れる $[-\pi,\pi]$ 上の積分の評価に用いる台形積分の積分点の数 $\tilde{M}$ はその項数 $2M+1$ の定数倍程度で十分であると予想される．

関数 $\tilde{O}$ を定義する式 (23) の右辺の和は $M\to\infty$ で発散級数となることに注意されたい．実際，各項の絶対値をプロットした結果は Fig. 2 のようになり，明らかに n が増大するにしたがって発散する様子が確かめられる．また，Fig. 3 に $M=20$ で打ち切った場合の $\tilde{O}$ を ϕ の関数としてプロットした結果を示す．この図から，$\tilde{O}$ は各点 x で $2\pi/M$ 程度の周期で振動していることが分かり，この結果もまた Fourier 級数が収束しないことを示唆している．この級数の非収束性は式 (22) において和と積分を交換したことに由来することが知られている [18]．

2.3.3. 回転

点 c を中心として回転した散乱体の散乱行列と元の散乱行列の関係を示す．角度 ψ で反時計周りに回転した散乱体周辺の場は座標系の回転を考えることにより

$$\sum_{n=-M}^{M}A_nI_n(x-c)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\psi}+\sum_{n=-M}^{M}(SA)_nO_n(x-c)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\psi} \tag{31}$$

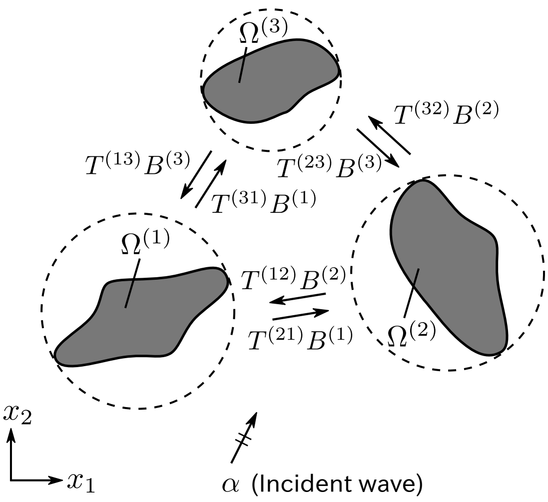


Fig. 4　Schematic illustration of the coefficient vectors $B^{(i)}$ and translation of the expansions.

の形で書き表すことができる．よって，対角行列 $E(\psi)=\mathrm{diag}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\psi})_n$ を用いると，回転後の散乱行列 S' は

$$S'=E(-\psi)SE(\psi) \tag{32}$$

となる．

平面波展開の場合についても同様に，回転後の場は

$$\begin{aligned}&\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{A}(\phi)\tilde{I}(x-c,\phi+\psi)\mathrm{d}\phi+\int_{-\pi}^{\pi}(\tilde{S}\tilde{B})(\phi)\tilde{O}(x-c,\phi+\psi)\mathrm{d}\phi\\&=\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{A}(\phi-\psi)\tilde{I}(x-c,\phi)\mathrm{d}\phi+\int_{-\pi}^{\pi}(\tilde{S}\tilde{B})(\phi-\psi)\tilde{O}(x-c,\phi)\mathrm{d}\phi\end{aligned} \tag{33}$$

で表されるため，式 (29) で定義した散乱行列 $\tilde{S}$ の回転後の行列 $\tilde{S}'$ は

$$\tilde{S}'=\tilde{E}(-\psi)\tilde{S}\tilde{E}(\psi) \tag{34}$$

となる．ここに，$\tilde{E}$ は $(\tilde{E}(\psi)\tilde{A})(\phi)=\tilde{A}(\phi+\psi)$ で定義されるシフト作用素である．

周期関数 A に対するシフト $\tilde{E}(\psi)\tilde{A}$ を $[-\pi,\pi]$ 上の各積分点で計算するとき，元の $\tilde{A}$ の積分点の間で区分線形基底によって補間された値を使うことは計算精度の低下を招くおそれがある．そこで，Fourier 級数展開を用いて

$$\begin{aligned}(\tilde{E}(\psi)\tilde{A})(\phi)&=\tilde{A}(\phi+\psi)\\&=\frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n(\phi+\psi)}\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{A}(\phi')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\phi'}\mathrm{d}\phi'\end{aligned} \tag{35}$$

として，右辺の積分を元の積分点上の $\tilde{A}$ の値を用いて台形積分することで精度の悪化を回避する．

3. 多重散乱問題

3.1. 問題設定

Fig. 4 のように N 個の散乱体 $\Omega^{(i)}\subset\mathbb{R}^2$ $(i=1,\ldots,N)$ が配置された空間における散乱について考える．ここで，各散乱

体の形状およびそれを特徴付けるパラメータ $\hat{c}$, $\hat{\gamma}$ は同一でなくてもよいとする．ただし，$\Omega^{(i)}$ の最小包含円を $D^{(i)}$ として $D^{(i)} \cap D^{(j)} = \emptyset \ (i \neq j)$，すなわち各散乱体が well-separeted であることを仮定する．

3.2. 低周波散乱行列法

散乱体 $\Omega^{(i)}$ の式 (20) で定義される散乱行列を $S^{(i)}$ として，これを用いた多重散乱問題の解法を示す．最小包含円 $D^{(i)}$ の中心を $c^{(i)} \in \mathbb{R}^2$ として，散乱問題の解を

$$u(x) = u^{\mathrm{in}}(x) + \sum_{i=1}^{N} \sum_{n=-M}^{M} B_n^{(i)} O_n(x - c^{(i)}) \quad x \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\cup_{i=1}^{N} D^{(i)}} \tag{36}$$

で表現する．ここで，中心 $c^{(j)}$ 周りの円筒波展開 $B_n^{(j)} O_n(x - c^{(j)})$ を別の展開中心 $c^{(i)}$ の周りで展開し直すことを考える．これは高速多重極法における M2L 公式と等価であり，$|x - c^{(i)}| < |c^{(i)} - c^{(j)}|$ であるとき，すなわち $c^{(i)}$ の十分近傍で Graf の加法定理により次式を得る．

$$\begin{aligned} B_n^{(j)} O_n(x - c^{(j)}) &= \left(\sum_{n'=-M}^{M} T_{nn'}^{(ij)} B_{n'}^{(j)} \right) I_n(x - c^{(i)}) \\ &= \left(T^{(ij)} B^{(j)} \right)_n I_n(x - c^{(i)}) \end{aligned} \tag{37}$$

ここに，行列 $T^{(ij)}$ は次式で定義され，translation 行列と呼ばれる．

$$T_{nn'}^{(ij)} = O_{n'-n}(c^{(i)} - c^{(j)}) \tag{38}$$

これら展開係数 $B^{(i)}$ とその展開中心の移動の様子は Fig. 4 に描かれる．式 (37) を式 (36) に代入し，$x \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\cup_{i=1}^{N} D^{(i)}}$ かつ $|x - c^{(i)}| < |c^{(i)} - c^{(j)}|$ を満たす x に関して次式を得る．

$$\begin{aligned} u(x) = u^{\mathrm{in}}(x) &+ \sum_{n=-M}^{M} B_n^{(i)} O_n(x - c^{(i)}) \\ &+ \sum_{j \neq i} \sum_{n=-M}^{M} \left(T^{(ij)} B^{(j)} \right)_n I_n(x - c^{(i)}) \end{aligned} \tag{39}$$

入射波 u^{in} を $c^{(i)}$ 周りで

$$u^{\mathrm{in}}(x) = \sum_{n=-M}^{M} \alpha_n^{(i)} I_n(x - c^{(i)}) \tag{40}$$

のように展開して式 (39) に代入すると，散乱行列の定義 (20) により各 $i = 1, \ldots, N$ について展開係数 $\alpha^{(i)}$ と $B^{(i)}$ に関して

$$S^{(i)} \left(\alpha^{(i)} + T^{(ij)} B^{(j)} \right) = B^{(i)} \tag{41}$$

を得る．$\alpha^{(i)}$ は入射波の展開係数であるため既知であり，未知の展開係数 $B^{(i)}$ に関して式 (41) を整理すると次の連立一次方程式を得る．

$$(\mathrm{I} - \mathrm{ST})\,\mathrm{B} = \mathrm{S}\alpha \tag{42}$$

ここに各行列およびベクトルは単位行列 I を用いて次式で定義される．

$$\mathrm{I} = \begin{bmatrix} I & & & \\ & I & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{bmatrix}, \ \mathrm{S} = \begin{bmatrix} S^{(1)} & & & \\ & S^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & S^{(N)} \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{T} = \begin{bmatrix} O & T^{(12)} & \cdots & T^{(1N)} \\ T^{(21)} & O & \cdots & T^{(2N)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T^{(N1)} & T^{(N2)} & \cdots & O \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{B} = \begin{pmatrix} B^{(1)} \\ B^{(2)} \\ \vdots \\ B^{(N)} \end{pmatrix}, \ \alpha = \begin{pmatrix} \alpha^{(1)} \\ \alpha^{(2)} \\ \vdots \\ \alpha^{(N)} \end{pmatrix} \tag{43}$$

連立一次方程式 (42) を解いて求まった $B^{(i)}$ を式 (36) に代入することで，$\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\cup_{i=1}^{N} D^{(i)}}$ における散乱場が計算できる．各散乱体の近傍 $D^{(i)}$ における多重散乱問題の解は，展開係数

$$A^{(i)} = \left(S^{(i)} \right)^{-1} B^{(i)} = \alpha^{(i)} + \sum_{j \neq i} T^{(ij)} B^{(j)} \tag{44}$$

に対応する入射場 (40) を散乱体 $\Omega^{(i)}$ に与えたときの散乱問題の解であり，これは境界要素法を用いて容易に計算できる．

式 (38) で計算される translation 行列 $T^{(ij)}$ は密行列であり，したがって反復法を用いて方程式 (42) を解く場合，ブロック行列 T とベクトルの積の計算が計算時間の大きな割合を占めることが予想される．実際，展開項数 M を Rokhlin の式 [19]

$$M = kd + n_{\mathrm{tol}} \log(kd + \pi) \tag{45}$$

によって定める場合，この行列–ベクトル積に要する計算量は $O(N^2 M^2) = O(N^2 k^2 d^2)$ となり，特に高周波域で計算コストの大きさが問題となる恐れがある．ここに，n_{tol} は要求する精度に応じて定める定数，d は各最小包含円 $D^{(i)}$ の直径である．本研究では，2.3.2 節で導入した平面波展開に基づく散乱行列を用いることでこの計算量が低減可能であることを示す．

3.3. 高周波散乱行列法

前小節と同様の手順によって，2.3.2 節で導入した平面波展開および散乱行列に基づく多重散乱問題の解法を述べる．

まず，散乱問題の解を

$$u(x) = u^{\mathrm{in}}(x) + \sum_{i=1}^{N} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{B}^{(i)}(\phi) \tilde{O}(x - c^{(i)}, \phi) \mathrm{d}\phi \qquad x \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\cup_{i=1}^{N} D^{(i)}} \tag{46}$$

と置き，展開中心の変更を行う．$|x - c^{(i)}| < |c^{(i)} - c^{(j)}|$ であ

Table 1 Time complexity for the naive BEM with LU factorisation ("BEM" in the table), computation of the matrix S or $\tilde{S}$ ("S-matrix"), and GMRES for solving the linear system (42) or (49) ("GMRES"), where N_{eval} is the number of iterations in the GMRES.

	Low-frequency S-matrix	High-freq.
BEM	$O(N_{\mathrm{element}}^3)$	$O(N_{\mathrm{element}}^3)$
S-matrix	$O(MN_{\mathrm{element}}^2)$	$O(\tilde{M}N_{\mathrm{element}}^2)$
GMRES	$O(N_{\mathrm{eval}}N^2M^2)$	$O(N_{\mathrm{eval}}N^2\tilde{M})$

るとき，Graf の加法定理を用いると

$$\begin{aligned}&\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{B}^{(j)}(\phi)\tilde{O}(x-c^{(j)},\phi)\mathrm{d}\phi\\&=\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{B}^{(j)}(\phi)\tilde{O}(c^{(i)}-c^{(j)},\phi)\tilde{I}(x-c^{(i)},\phi)\mathrm{d}\phi\\&=\int_{-\pi}^{\pi}\left(\tilde{T}^{(ij)}(\phi)\tilde{B}^{(j)}(\phi)\right)\tilde{I}(x-c^{(i)},\phi)\mathrm{d}\phi\end{aligned}\tag{47}$$

が得られる．ここに，$\tilde{T}^{(ij)}=\tilde{O}(c^{(i)}-c^{(j)})$ である．さらに入射波 u^{in} を

$$u^{\mathrm{in}}(x)=\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{\alpha}(\phi)\tilde{I}(x-c^{(i)},\phi)\mathrm{d}\phi\tag{48}$$

で書き表すと，次の方程式が得られる．

$$\left(\mathrm{I}-\tilde{\mathrm{S}}\tilde{\mathrm{T}}\right)\tilde{\mathrm{B}}=\tilde{\mathrm{S}}\tilde{\alpha}\tag{49}$$

ここに，それぞれ $\tilde{\mathrm{S}}$，$\tilde{\mathrm{T}}$，$\tilde{\mathrm{B}}$，$\tilde{\alpha}$ は式 (43) で定義される S，T，B，α の各ブロックをチルダ付きのシンボルで置き換えることにより定義される作用素と関数である．

方程式 (49) を離散化して得られる連立一次方程式の $\tilde{T}^{(ij)}$ に対応する行列は対角行列であり，よってブロック行列 $\tilde{\mathrm{T}}$ とベクトルの積の計算量は $O(N^2\tilde{M})$ となる．

3.4. 計算量

3.2 節と 3.3 節で述べた散乱行列を用いた解法の計算量について述べる．

簡単のために，すべての散乱体が同一であり，それぞれの境界が要素数 N_{element} で一定要素に分割されていると仮定する．散乱体の数 N が十分大きいときに多重散乱解析における未知の展開係数ベクトル B または $\tilde{\mathrm{B}}$ を計算するまでの各プロセスに要する計算量をまとめたものを Table 1 に示す．高速アルゴリズム [10–12] を適用しない素朴な境界要素法のみを用いて同じ多重散乱問題を解く場合の計算量は直接法で $O(N^3N_{\mathrm{element}}^3)$，反復法で $O(N^2N_{\mathrm{element}}^2)$ であり，よって N と N_{element} が十分大きいとき散乱行列法はこの多重散乱問題を効率的に解くと言える．さらに，2.3.2 節で述べたように $\tilde{M}=O(M)$ であるとすると，提案法である高周波散乱行列法の GMRES 法に要する計算量は低周波のそれと比べて小さい．よって，寸法最適化 [15] のように散乱体を回転・平行移動しながら散乱解析を繰り返し行うような場合 (1 回のみの境界要素解析・散乱行列の計算と複数回の連立方程式 (42)，(49) の求解が必要な場合) に提案法は特に効率的であると言える．

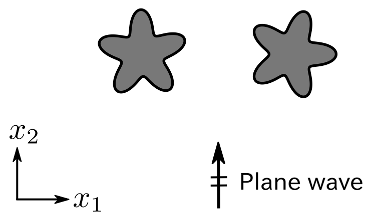


Fig. 5 Two star-shaped scatterers illuminated by a plane wave.

4. 数値例

4.1. 精度の検証

Table 2 Relative ℓ_2 error of u on the boundaries in the case of $L=1$. The solutions are computed by the low- and high-frequency S-matrices.

	Low-frequency S-matrix			High-freq.
ω	$M=10$	$M=60$	Rokhlin	
10	4.7×10^{-5}	4.7×10^{-5}	4.7×10^{-5}	4.7×10^{-5}
20	2.3×10^{-3}	1.7×10^{-4}	1.7×10^{-4}	1.7×10^{-4}
30	6.3×10^{-2}	2.3×10^{-4}	2.3×10^{-4}	2.3×10^{-4}
40	4.2×10^{-1}	3.3×10^{-4}	3.3×10^{-4}	3.3×10^{-4}
50	6.1×10^{-1}	4.2×10^{-4}	4.2×10^{-4}	4.2×10^{-4}

Table 3 Relative ℓ_2 error of u on the boundaries in the case of $L=10$. The solutions are computed by the low- and high-frequency S-matrices.

	Low-frequency S-matrix			High-freq.
ω	$M=10$	$M=60$	Rokhlin	
10	9.9×10^{-6}	9.9×10^{-6}	9.9×10^{-6}	9.9×10^{-6}
20	2.3×10^{-3}	2.4×10^{-5}	2.4×10^{-5}	2.4×10^{-5}
30	6.5×10^{-2}	4.7×10^{-5}	4.7×10^{-5}	4.7×10^{-5}
40	4.1×10^{-1}	1.2×10^{-4}	1.2×10^{-4}	1.2×10^{-4}
50	5.8×10^{-1}	8.3×10^{-5}	8.3×10^{-5}	8.3×10^{-5}

まず，Fig. 5 のように 2 つの同一形状の散乱体に平面波に入射する際の計算精度について検討する．各散乱体の形状

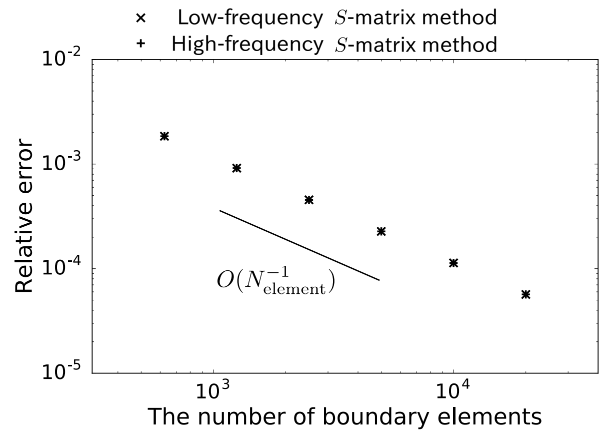


Fig. 6 Relative ℓ_2 error of u on the boundaries obtained by the low- and high-frequency S-matrices in the case of $\omega = 30$ when the number of boundary elements N_{elements} varies.

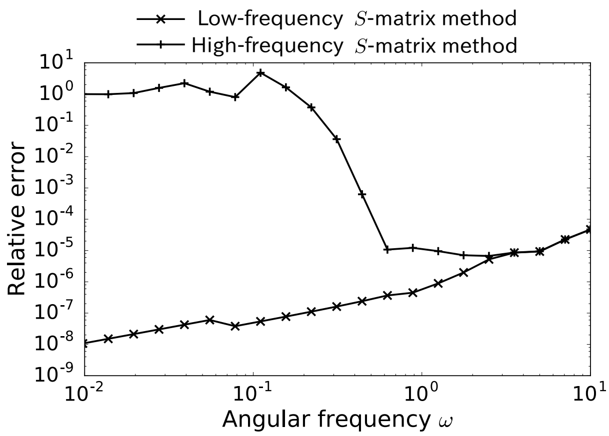


Fig. 7 Relative ℓ_2 error of u on the boundaries obtained by the low- and high-frequency S-matrices in the low-frequency range.

は，その境界上の任意の点 $(x_1, x_2)^T$ が $\theta \in [0, 2\pi]$ を用いて

$$x_1 = c_1 + R_2 \cos(\cos^{-1}(R_1/R_2)\sin(5(\theta - \psi)/2))\cos(\theta - \psi) \tag{50}$$

$$x_2 = c_2 + R_2 \cos(\cos^{-1}(R_1/R_2)\sin(5(\theta - \psi)/2))\sin(\theta - \psi) \tag{51}$$

で与えられるものとして定義する．ここに，R_1 と R_2 はそれぞれ星型形状の内接円と外接円の半径を表し，本数値例では $R_1 = 0.15$，$R_2 = 0.3$ とする．また，合同な 2 つの散乱体の中心の距離を L として，左右それぞれの中心座標 c は $(-L/2, 0)^T$，$(L/2, 0)$，回転角 ψ は 20，0 deg とする．入射波の進行方向は $(0, 1)^T$ 方向として．それぞれ外部領域と内部領域における材料定数は $c = 1$，$\gamma = 1$ と $\tilde{c} = 0.5$，$\tilde{\gamma} = 0.25$ とする．

各散乱体境界を $N_{\mathrm{element}} = 5{,}000$ 個の区分一定要素で分割し，素朴な境界要素法 (2 つの境界上の未知量に関しての境界積分方程式を解く方法)，3.2 節で述べた低周波散乱行列法および 3.3 節で述べた高周波散乱行列法の 3 つの方法で散乱問題を解き，その計算精度を比較する．ここで，散乱行列法において連立方程式 (42) を解く際の GMRES 法の許容誤差は 10^{-8} とする．それぞれ $L = 1$ と $L = 10$ の場合について，素朴な境界要素法の解を参照解として，低周波散乱行列法と高周波散乱行列法により得られた境界上の解 u の相対 ℓ_2 誤差を計算した結果を Table 2 と Table 3 に示す．低周波散乱行列法については，展開項数 M を $M = 10$ と $M = 60$ で固定した場合および $n_{\mathrm{tol}} = 6$ として Rokhlin の式 (45) を用いた場合についての結果を示している．また高周波散乱行列における区分線形近似の分割数 $\tilde{M}$ は $\tilde{M} = 2M + 1$ を用いた．なお，$\omega = 10, 20, 30, 40, 50$ それぞれについて，Rohklin の式 (45) により定まる M は 20, 29, 37, 44, 52 である．Table 2，3 のどちらの結果からも，低周波散乱行列法において $M = 60$ を用いた場合の誤差は $M = 10$ の場合と比較して小さく，また Rokhlin の式 (45) に基づいて M を決定した場合は $M = 60$ の場合と同程度の精度が得られている．したがって，Rokhlin の式 (45) はこの周波数帯および与えたパラメータ $n_{\mathrm{tol}} = 6$ に関して十分な展開項数を与えていると考えられる．よって，以下のすべての数値例では展開項数 M は $n_{\mathrm{tol}} = 6$ の場合の Rokhlin の式 (45) で定める．また，高周波散乱行列法を用いた場合についてもこれらと同じ精度が得られており，したがって，これら 2 つの散乱行列法の誤差は境界要素法の誤差に由来していると予想される．

実際，$L = 1$ の場合について境界要素の数 N_{element} を変更し，各 N_{element} について同じ分割数 (同じ境界要素メッシュ) で素朴な解法によって得られた解を参照解として同様の誤差評価を行ったところ，Fig. 6 が得られた．この結果から，散乱行列法によって得られる解の誤差は $O(N_{\mathrm{element}}^{-1})$ 程度であることが分かる．したがって，適切な展開項数 M と十分大きな境界要素数 N_{element} を定めることで散乱行列法は境界要素法のみを用いた場合とほぼ等しい解を得ることが期待できる．

4.2. 低周波破綻

diagonal form を用いた高速多重極法は低周波域で精度が急激に悪化する現象，いわゆる低周波破綻が生じることが知られている．本研究が提案する高周波散乱行列法も同様の低周波破綻が発生することが予想されるため，本小節では低周波域における散乱行列法の誤差の振る舞いを数値的に調べる．

Fig. 7 に低周波・高周波散乱行列法それぞれについて前小節と同じ誤差評価を行った結果を示す．この結果から，低周波散乱行列法と比較して高周波散乱行列は低周波域で誤差が急激に増大していることが確認できる．これは高速多重極法を用いた場合の低周波破綻と同様の現象であると予想され，よって高周波散乱行列は十分に高周波な問題にのみ適用可能であると言える．

4.3. 計算時間

前章節では散乱体が 2 つの場合を扱ったが，提案法は多数

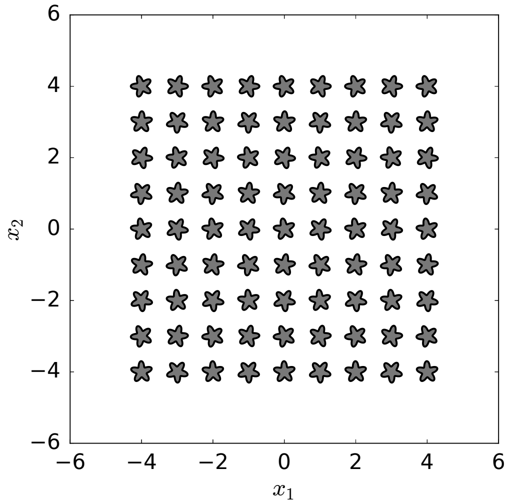


Fig. 8　Multiple star-shaped scatterers.

の散乱体が並べられたフォトニック構造の解析に特に有用であると考えられる．また，バンドギャップなどの代表的な特性は高周波域で現れ．かつその単位構造の形状に大きく依存する [6] ことを考慮すると，高周波域で複雑形状が多数並べられた構造による散乱解析は応用上重要であると考えられる．そこで，本小節ではこのような場合について提案法の計算時間について調べる．Fig. 8 のように 81 個の散乱体を格子状に配置した構造における散乱問題を低周波・高周波散乱行列法で解き，その際の連立方程式 (42)，(49) の GMRES 法による求解に要した時間を計る．実際の応用では構造の幾何学的特徴と周波数は観察したい物理現象に応じて適切に定める必要があるが，ここでは一例として前章節で扱った散乱体を $L = 1$ で並べた場合のみについて考える．また，その他の条件もすべて 4.1 節で行った数値例で用いたものと同じとする．計算は Intel Xeon CPU E5-2697A (16 コア) が搭載されたワークステーション上で実行した．

様々な周波数について連立方程式 (42)，(49) の求解に要した GMRES 法の反復回数と計算時間をそれぞれ Fig. 9 と Fig. 10 に示す．この結果から，GMRES 法の反復回数はどちらの散乱行列を用いてもまったく同じであることが分かり，よって連立方程式 (42)，(49) の条件数はほぼ等しいことが予想される．また，計算時間については，特に高周波の場合，すなわち展開項数が大きいときに高周波散乱行列法は低周波のそれと比較して計算時間を大幅に短縮していることが分かる．これは行列 $\tilde{\mathrm{T}}$ が T と比較して疎であるために，Table 1 に示したように GMRES 法の各反復で行う行列–ベクトル積の計算コストが大きく削減されたためであると考えられる．

また，$\omega = 10$ の場合について，それぞれの散乱行列法で散乱体周辺の解を計算した結果を Fig. 11 に示す．この結果から，2 つの方法でほぼ同じ解が得られていることが推測される．実際に，高周波散乱行列法によって得られた境界上の u の低周波散乱行列のそれに対する相対 ℓ_2 誤差は 2.0×10^{-7} であり，定量的にも 2 つの方法が計算する解は差異が小さいと言える．

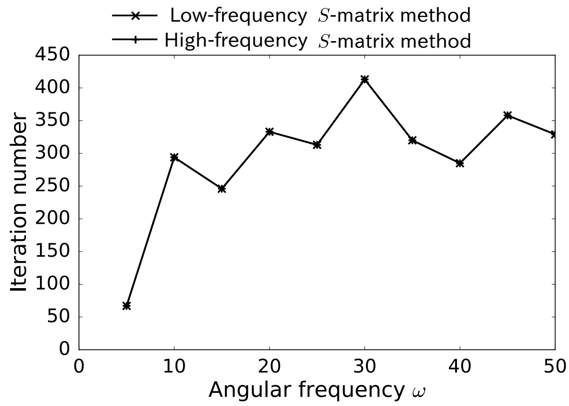


Fig. 9　The number of iterations in the GMRES for solving (42) and (49).

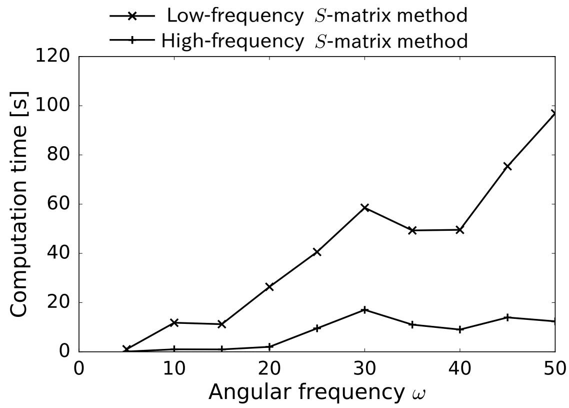


Fig. 10　Computation time required in the GMRES for solving (42) and (49).

5．結言

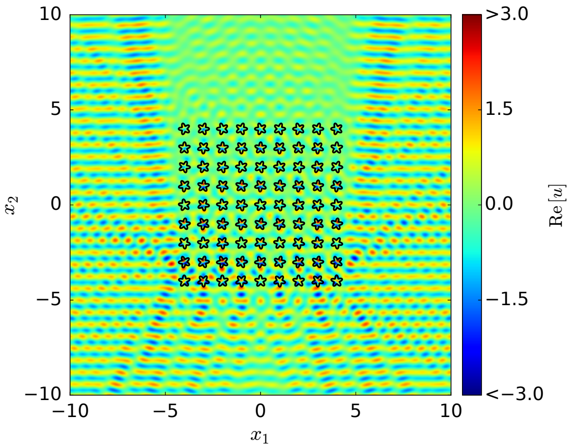
本研究は平面波展開に基づく新たな散乱行列を定義し，これを境界要素法によって計算するアルゴリズムを用いて多重散乱問題を効率的に解く数値計算法を提案した．連立方程式の求解に反復法を用いる場合，提案法は円筒波展開に基づく従来法と比較してその計算量を低減することが可能であることを示した．また，系の回転をこれら散乱行列に関する線形代数的操作に置き換える方法について述べた．数値例では計算精度を調べることで適切な展開項数の定め方について議論し，また提案法は実際に計算時間を削減できることを確認した．

謝辞

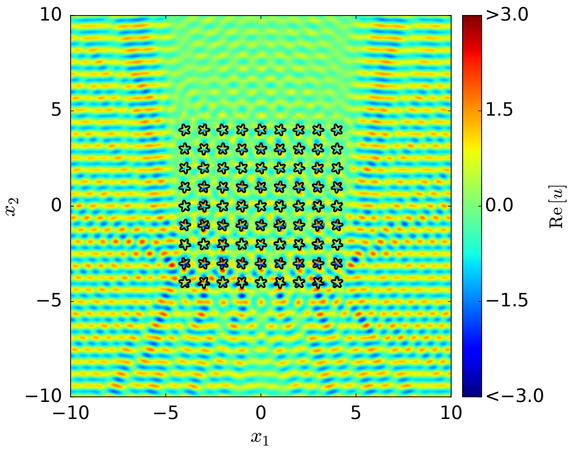
本研究は JSPS 科研費 JP19J21766，JP19H00740，および JP17K14146 の助成を受けたものです．

参考文献

(1) Caloz, C. and Itoh, T. *Electromagnetic metamaterials: transmission line theory and microwave applications.* John Wiley & Sons, 2005.



(a) Low-frequency S-matrix



(b) High-frequency S-matrix

Fig. 11 Solutions of the multiple scattering problem obtained by the low- and high-frequency S-matrix methods for $\omega = 10$.

(2) Yablonovitch, E. Photonic band-gap structures. *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol. 10, No. 2, pp. 283–295, 1993.

(3) Zhou, X., Liu, X., and Hu, G. Elastic metamaterials with local resonances: an overview. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, Vol. 2, No. 4, p. 41001, 2012.

(4) Nakamoto, K., Isakari, H., Takahashi, T., and Matsumoto, T. A level-set-based topology optimisation of carpet cloaking devices with the boundary element method. *Mechanical Engineering Journal*, Vol. 4, No. 1, pp. 16–268, 2017.

(5) 山本遼, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. 散乱断面積最小化によるクローキングデバイスのトポロジー最適設計. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 67–72, 2019.

(6) 釜堀瑞生, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. SS 法と境界要素法を用いた周期構造のトポロジー最適化. 計算数理工学論文集, Vol. 16, pp. 85–90, 2016.

(7) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. 2 次元弾性波周期散乱解析のための境界要素法とそのトポロジー最適化への応用. 計算数理工学論文集, Vol. 18, pp. 35–40, 2018.

(8) Matsushima, K., Isakari, H., Takahashi, T., and Matsumoto, T. A topology optimisation of composite elastic metamaterial slabs based on the manipulation of far-field behaviours. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Advance online publication, doi:10.1007/s00158-020-02689-y, 2020.

(9) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. 境界要素法と櫻井・杉浦法を用いた開放型共振器のトポロジー最適化. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 49–54, 2019.

(10) Rokhlin, V. Rapid solution of integral equations of classical potential theory. *Journal of Computational Physics*, Vol. 60, No. 2, pp. 187–207, 1985.

(11) Greengard, L. and Rokhlin, V. A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 73, No. 2, pp. 325–348, 1987.

(12) Bebendorf, M. *Hierarchical matrices*. Springer Berlin: Heidelberg, 2008.

(13) Gimbutas, Z. and Greengard, L. Fast multi-particle scattering: A hybrid solver for the Maxwell equations in microstructured materials. *Journal of Computational Physics*, Vol. 232, No. 1, pp. 22–32, 2013.

(14) Lai, J. and Li, P. A framework for simulation of multiple elastic scattering in two dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 41, No. 5, pp. A3276–A3299, 2019.

(15) Blankrot, B. and Heitzinger, C. Efficient computational design and optimization of dielectric metamaterial structures. *IEEE Journal on Multiscale and Multiphysics Computational Techniques*, Vol. 4, pp. 234–244, 2019.

(16) Rokhlin, V. Rapid solution of integral equations of scattering theory in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 86, No. 2, pp. 414–439, 1990.

(17) Burton, A.J. and Miller, G.F. The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 323, pp. 201–210. The Royal Society, 1971.

(18) Nishimura, N. Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 55, No. 4, pp. 299–324, 2002.

(19) Coifman, R., Rokhlin, V., and Wandzura, S. The fast multipole method for the wave equation: a pedestrian prescription. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, Vol. 35, No. 3, pp. 7–12, 1993.