

[共同研究成果]

メゾ周期構造体における電磁波散乱の高精度数値計算

岩長 祐伸

物質・材料研究機構 305-0044 つくば市並木 1-1

メゾスコピック（メゾ）スケール周期構造体、とくに2次元的周期構造体における電磁波散乱問題の高精度な数値計算について述べる。この種の問題を周波数領域で扱うときにはフーリエ係数で表したマクスウェル方程式を解くことが常套的手法であり、実行時にフーリエ係数を有限次で切断して数値計算することになる。単純な切断では得られない解の高速な収束を得るためのアルゴリズムを紹介し、開発したコードによる計算実例と SX-9 上での高速化の現状について述べる。

1. はじめに

これまで数年間にわたって人工的な周期構造における光学応答の高精度な数値計算について東北大学サイバーサイエンスセンターと共同研究を展開してきた [1-3]。その内容は1次元周期系に始まり [1]、メタマテリアルのような新分野への応用 [2]、遺伝アルゴリズムとの組合せによる未踏な機能性構造の探索・発見 [3,4] と多岐にわたってきた。フォトニック結晶やメタマテリアルといった金属材料をふくむ人工構造体の物理光学や新しい光機能性材料の開発にはさらに自由度の大きい2次元系構造に研究を広げることは自然な展開である。その過程で開発したコードについて本稿では述べることにする。

具体的なアルゴリズムなどを解説するまえにメゾ構造体を数値計算することの意味について、すこし一般的な観点から触れておきたい。このスケールでの電磁波散乱問題に詳しい方はここから次節に進んでください。

よく言われるようにメゾスケールとは5 ナノメートル（ナノ= 10^{-9} ）程度から数十マイクロメートル（マイクロ= 10^{-6} ）程度の大きさを指す。マクロより小さく、ナノより大きいという意味でメゾ（中間）である。このスケールの電磁波はマクスウェル方程式によって精度よく記述できることは周知である。それより小さいナノスケールでは量子力学的な効果が現れるためにマクスウェル方程式を基礎とするソフトウェアを使って機械的に計算しても結果は実際とは合わなくなってくる。これもまた良く知られた事実である。つまり、メゾ構造体はマクスウェル方程式の適用範囲の下限にあたる。本稿での対象はメゾスケールの単位構造をもつ周期的構造体とする。以下では単にメゾ周期体と呼ぶ。

学部生向けの教科書の電磁気学によく慣れ親しんだ方にはマクスウェル方程式は常に紙と鉛筆で解けるという「確信」があるかもしれない。特殊関数を使えばどんな場合にも解析解が得られると思われるかもしれないが、実際には四角柱ですら解の基底となる特殊関数はなく、何らかの基底による無限次までの展開が必要になる。したがって、対象の形状に制限を加えないという一般的な条件下で、電磁波散乱問題を解くには数値的な解法が必要不可欠である。マクスウェル方程式を数値的に高精度に解くことこそが最も信頼できる、本質的な解法なのである。

近年、マクスウェル方程式を時間領域または空間領域、周波数領域で解く多数の数値計算ソフトウェアが販売されるようになって、数値的な解法へのアクセスが容易になり、原理的な理由からというよりは便法として数値的な方法は日常的に使われるようになってきている。一方で、ワ

一クステーションに代表される PC プラスアルファの計算機による計算では精度、速度の面でいまだに十分ではない。この点については第 3 節で具体的な計算例について触れながら再度述べることにする。

第 2 節ではフーリエ係数のマクスウェル方程式を高速に解くためのアルゴリズムについて解説し、第 3 節では計算の実例と SX-9 での動作の現状について触れる。

2. フーリエ展開の有限次切断と高速収束アルゴリズム

フーリエ変換自体はよく知られた数学的な手法である。この節ではメゾ周期体にマクスウェル方程式を応用する場合を具体例として、その高速収束アルゴリズムに関して説明する。しかしながらこのアルゴリズムは特殊なものではなく、多くの数理モデルにも適用可能なアルゴリズムであり、多方面に応用可能である。そのようなアルゴリズムに興味を抱く本誌の読者もあると考え、この節でやや詳しく説明することにする。

2.1 アルゴリズムの基本形

まず座標 r の複素数値関数 f, g, h がつぎのような積の関係にあるとしよう。

$$h(r) = f(r)g(r) \quad (1)$$

関数 $f \sim h$ が周期を a とする関数であるとき、

$$h(r) = \sum_n h_n \exp(2\pi i n r / a) \quad (2)$$

のように展開でき、 $h(r+a) = h(r)$ をみたす。それぞれの関数のフーリエ係数についてつぎの式が成り立つ。

$$h_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_{n-m} g_m \quad (3)$$

このとき和は添字 m を無限に走らせていているかぎり、式 (3) は数学的に正しいが、数値計算をする上では必ず有限次で切断することになる。つまり、

$$h_n^{(M)} = \sum_{m=-M}^{M} f_{n-m} g_m \quad (4)$$

で表されるような量 $h_n^{(M)}$ を扱うことになる。その際に数値計算上の効率を上げるために、いかに小さな M で厳密な値を近似できるかどうかが問題になる。このような問題は数値計算の分野ではよく知られたものであり、比較的扱いやすい場合（たとえば関数 f, g がともに連続である場合）には高速フーリエ変換法がすでに開発されていることは周知であろう。

目下の問題は電磁気学で式 (4) のような表式が現れるときには、物理学的な要請、つまり境界条件があるために、関数 f が不連続関数で積 fg が連続になるような条件が付加される。このときには式 (4) は著しく収束が遅くなることが知られている。つまり、巨大な M を用いないと

$$h_n^{(M)} \approx h_n \quad (5)$$

という良い近似を担保できない。実際に、既存のスーパーコンピュータのリソースでは式 (5) を満たす大きな M に到達することは困難であり、実用上は式 (4) の表式は使えないことになる。そこで高速アルゴリズムの発見 [5] がブレークスルーとなったのである。最初に 1 次元周期系にたいしてアルゴリズムが発見され、つづいて今回用いた 2 次元周期系のアルゴリズム [6] が報告された。1 次元系が理解できれば、2 次元系は自然な拡張であるから、この小節では 1 次元系について

て説明を進める。

式(4)のような単純な有限次の切断にかわって見出されたのは、次式の積であった[5]。

$$\hat{h}_n^{(M)} = \sum_{m=-M}^M \llbracket 1/f \rrbracket_{n,m}^{-1} g_m \quad (6)$$

記号について説明すると、式(4)の成分 f_{n-m} を行列の (n,m) 成分とみなして、 $\llbracket f \rrbracket_{n,m}$ と書くことになると、行列 $\llbracket f \rrbracket$ が定義できる。つねに $f \neq 0$ がみたされるときには、同じ記法を用いて $1/f$ の行列を構成し、その逆行列を用いて新たなフーリエ積の式(6)を作ると、高速な収束を得られる。この新方式を逆積ルールと呼ぶことにする。数学的には、式(4)が各点収束であるのにたいして、式(6)は概一様収束ということになり、実用上の高速化が実現できる。一見トリッキーな式変形であるが、このアルゴリズムによって、周波数領域における光学スペクトルの計算が可能になり、市販の RCWA (Rigorously Coupled Wave Approximation) 法のソフトウェアの根幹技術を与えた点で大きな波及効果を生んだ発見だったといえる。

2.2 逆積ルールを適用した2次元周期系のマクスウェル方程式

この小節では2次元周期系に逆積ルールを適用してえられるマクスウェル方程式を示すことにする。図1のように直交xyz座標系を設定して、xy平面内で周期性をもち、z軸方向に有限厚さをもつメゾ周期体を考える。なお、文献[6]では直交座標系でない、より一般的な場合を扱っており、共形、反共形座標を使ったマクスウェル方程式を導いているが、本稿では基本的な考え方を説明することに重点をおいて、直交座標系の場合について述べる。

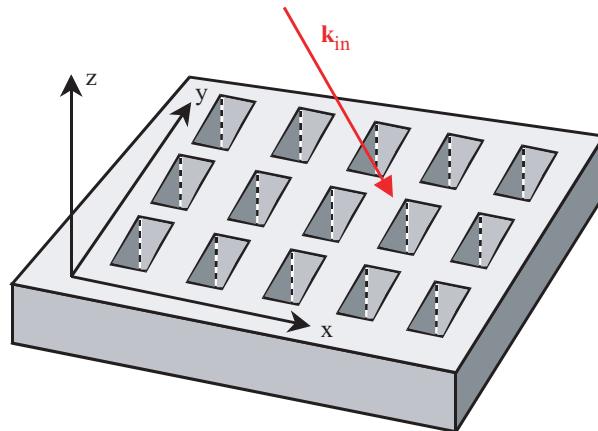


図1 周期構造体とxyz座標。周期構造はxy面内に無限に広がり、z軸方向有限の厚さをもつとする。入射平面波は波数ベクトル \mathbf{k}_{in} で決まる方向に進みながらxy面に照射する配置を考え、このときの光学応答(反射、透過、回折)が電磁波散乱として観測される。

電場 \mathbf{E} 、磁場 \mathbf{H} を使ったマクスウェル方程式はつぎの表式である。

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (8)$$

ただし、真電流の寄与はない場合を考えている。これらに加えてつぎの構成的な関係式を加える。

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

真空中の誘電率を ϵ_0 、透磁率を μ_0 とし、物質による比誘電率を ϵ 、比透磁率を μ とする。いま光の周波数 ($\sim 10^{14}$ Hz) を考察の対象とするから、比透磁率は 1 としてよい [7]。メゾ周期体の周期性は比誘電率によって表現される。つまり、比誘電率に空間依存性 $\epsilon = \epsilon(\mathbf{r})$ があり、

$$\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{d}_i) = \epsilon(\mathbf{r}) \quad (11)$$

をみたす。ここで \mathbf{d}_i は x 軸方向または y 軸方向の単位周期ベクトルを表す($i=1$ または 2)。

さらに、線形応答の範囲では全ての電磁波は重ね合わせで表現できるから、電磁波の時間依存性は單一周波数による振動成分を考えればよい。つまり、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \quad (12)$$

とする。

時間依存性を式 (12) のように仮定し、周期層におけるマクスウェル方程式 (7)、(8) を成分で明示的に書き下すと、つぎの式 (13)–(18) のようになる。

$$\partial_y E_z - \partial_z E_y = i\omega \mu_0 H_x \quad (13)$$

$$\partial_z E_x - \partial_x E_z = i\omega \mu_0 H_y \quad (14)$$

$$\partial_x E_y - \partial_y E_x = i\omega \mu_0 H_z \quad (15)$$

$$\partial_y H_z - \partial_z H_y = -i\omega \epsilon_0 \epsilon(x, y) E_x \quad (16)$$

$$\partial_z H_x - \partial_x H_z = -i\omega \epsilon_0 \epsilon(x, y) E_y \quad (17)$$

$$\partial_x H_y - \partial_y H_x = -i\omega \epsilon_0 \epsilon(x, y) E_z \quad (18)$$

これらの方程式から周期層の電磁波固有状態を求める。周期層内での電磁波は xy 成分に関して周期性があるから、

$$E_x(x, y, z) = \sum_{m,n} E_{xmn}(z) \exp(i\alpha_m x + i\beta_n y) \quad (19)$$

$$\alpha_m = \alpha_0 + 2\pi m / d_1 \quad (20)$$

$$\beta_n = \beta_0 + 2\pi n / d_2 \quad (21)$$

の形に展開できる。ここで α_0 、 β_0 はそれぞれ入射平面波の波数ベクトル \mathbf{k}_{in} の x 、 y 軸への射影成分、 d_1 、 d_2 はそれぞれ x 、 y 軸方向の周期長である。ほかの成分 E_y 、 H_x などもすべて同様に展開できる。また、比誘電率もその周期性から

$$\epsilon(x, y) = \sum_{m,n} \epsilon_{mn} \exp[2\pi i(m/d_1 + n/d_2)] \quad (22)$$

と展開できる。

つぎに周期層の固有方程式をえるために E_z 成分を消去する。式 (18) を

$$E_z = -\frac{1}{i\varepsilon_0\varepsilon(x,y)}(\partial_x H_y - \partial_y H_x) \quad (23)$$

のように変形する。なお、比誘電率 ε はつねに 0 でない。式 (14) から E_z 成分を消去して整理すると、つぎの式 (24) をえる。

$$\partial_z E_x = i\omega\mu_0 H_y - \frac{1}{i\omega\varepsilon_0} \partial_x \left[\frac{1}{\varepsilon(x,y)} (\partial_x H_y - \partial_y H_x) \right] \quad (24)$$

各成分 E_x, H_y などに式 (19) のような展開式を代入して元のマクスウェル方程式をフーリエ係数方程式に書き換えるのであるが、この際に第 2.1 節で述べた逆積ルールを使う必要が出てくる。

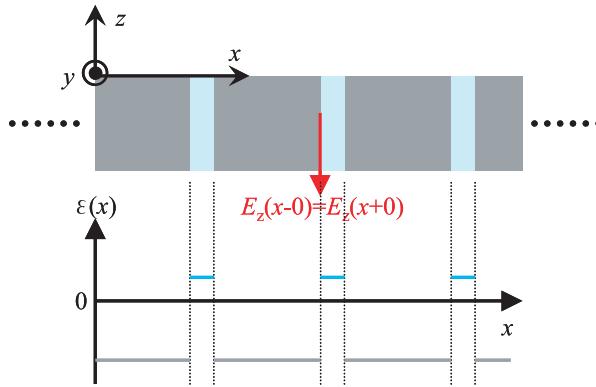


図 2 (上) メゾ周期体の xz 断面図。灰色部が金属、水色部が誘電体を模している。(下) 典型的な比誘電率の空間分布。

ここで周期層でのマクスウェル境界条件を考えると、図 2 上に模式的に示しているように E_z 成分については境界条件によって周期層の任意の点で連続である。一方、比誘電率は周期層内で周期的な空間分布があり、図 2 下に例示しているように境界で不連続な分布をしている。典型的な例として、金属（灰色部）と誘電体（水色部）からなる周期層を考えると、金属部では比誘電率（の実部）は負で誘電体の比誘電率は正の値をとる。つまり、 $\varepsilon(x,y)$ は周期的な不連続関数である。

以上のこと注意すると、式 (23) はちょうど式 (1) と類似の形をしており、左辺は連続関数、しかし右辺の $1/\varepsilon$ は不連続な周期関数となっている。したがって、式 (24) の右辺第 2 項の中括弧 [] 内の積には逆積ルールを適用してフーリエ係数を抽出しなければならない。

以上からつぎのフーリエ係数の方程式が得られる。

$$\frac{\omega\varepsilon_0}{i} \partial_z E_{xmn} = k_0^2 H_{ymn} - \alpha_m \sum_{j,l} [\varepsilon]_{mn,jl}^{-1} (\alpha_j H_{yjl} - \beta_l H_{xjl}) \quad (25)$$

ここで k_0 は真空中の光の波数を表し、 $k_0 = \omega/c_0$ である (c_0 は真空中の光の速度)。また、添字

が 2 次元的になったので、行列 $[\cdot]$ の定義をすこし拡張して、

$$[\varepsilon]_{mn,jl} = \varepsilon_{m-j,n-l} \quad (26)$$

と定める。式 (26) の右辺は式 (22) で定義される係数である。同様の考え方にして、適宜逆積ルールを適用していくと、ほかの成分に関する方程式が導かれる。

$$\frac{\omega \epsilon_0}{i} \partial_z E_{ymn} = -k_0^2 H_{xmn} - \beta_n \sum_{j,l} [\![\epsilon]\!]_{mn,jl}^{-1} (\alpha_j H_{yjl} - \beta_l H_{xjl}) \quad (27)$$

$$\frac{\omega \mu_0}{i} \partial_z H_{xmn} = \alpha_m (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}) - k_0^2 \sum_{j,l} [\![\epsilon]\!]_{mn,jl} E_{ymn} \quad (28)$$

$$\frac{\omega \mu_0}{i} \partial_z H_{ymn} = \beta_n (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}) + k_0^2 \sum_{j,l} [\![\epsilon]\!]_{mn,jl} E_{xjl} \quad (29)$$

式 (28)、(29) のなかに新たな記号が出てきたが、以下のように定義される。まず、

$$\epsilon(x, y) = \sum_{a,b} [\![\epsilon]\!]_{ab}(y) \exp[2\pi i(a-b)x/d_1] \quad (30)$$

$$\epsilon(x, y) = \sum_{a,b} [\![\epsilon]\!]_{ab}(x) \exp[2\pi i(a-b)y/d_2] \quad (31)$$

によって係数行列 $[\![\epsilon]\!]_{ab}$, $[\![\epsilon]\!]_{ab}$ を定義し、さらに

$$[\![\epsilon]\!]_{mn,jl} = \left[\left([\![1/\epsilon]\!]^{-1} \right)_{nl} \right]_{mj} \quad (32)$$

$$[\![\epsilon]\!]_{mn,jl} = \left[\left([\![1/\epsilon]\!]^{-1} \right)_{mj} \right]_{nl} \quad (33)$$

によって式 (28)、(29) にある行列を構成する。括弧内が逆行列になっているのは逆積ルールを適用した結果である。フーリエ係数の単純な有限次切断ではこのような逆行列をとる操作が一切入ってこないが、その代わり数値的な収束は实际上望めないことになる。

式 (25)、(27)–(29) が逆積ルールを適用した 2 次元周期系におけるフーリエ係数表示のマクスウェル方程式である。ここまでメゾ周期体の周期性は比誘電率の空間分布によって表現してきたが、その値についてはまったく制限をかけずにマクスウェル方程式を書き換えてきた。したがって、この方程式は任意の材料からなるメゾ周期体における電磁波状態を記述できるものであることを改めて記しておく。

2.3 固有値方程式と散乱行列

前節でえられた周期層の電磁波状態の固有値方程式 [式 (25)、(27)–(29)] はつぎのように行列形式にまとめて書くことができる。

$$\partial_z \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \\ \langle H_1 \rangle \\ \langle H_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & F \\ G & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \\ \langle H_1 \rangle \\ \langle H_2 \rangle \end{pmatrix} \quad (34)$$

ベクトル $\langle E_i \rangle$ などはフーリエ成分 E_{1mn} を適切に並べ替えて構成する。いまベクトル $\langle E_i \rangle$ が N 成分だとすると、式 (34) 右辺の行列サイズは $4N \times 4N$ になる。行列 F , G のサイズはともに $2N \times 2N$ である。ベクトル成分の z 依存性が $\exp(i\gamma z)$ に比例するとおくことができ、式 (34) の左辺で

$$\partial_z \rightarrow i\gamma$$

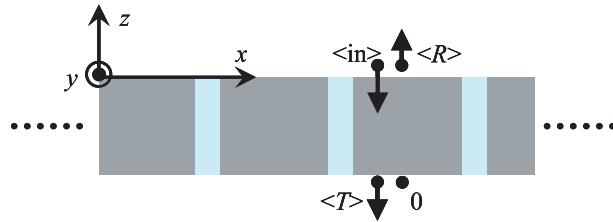
と置き換えることで固有値 γ を求める問題に帰着される。

その固有値問題をそのまま数値的に解くことも一法であるが、別法もある。つまり、式(34)から磁場成分を消去することができる。これによって、固有値方程式の次元が $2N \times 2N$ に下がる。その意味でつぎの式(35)は縮約した固有値方程式ということができる。

$$(FG + \gamma^2) \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (35)$$

式(34)と式(35)は数学的には等価であるが、数値計算の実行時では CPU 時間の短縮が重要な課題であるから、両者の比較は 3.2 節で行う。

ひとたび周期層の固有状態（固有値 γ と固有ベクトル）が分かると、あとは入射層、周期層、基板層の固有状態を散乱行列アルゴリズムで結び、入力（入射光の入射角度、偏光の情報）から出力（反射光、透過光、回折光の強度、位相）をえることができる。散乱行列は帰納的に構成できるから、周期層は何層積層していてもよく、これによって自動的に 3 次元的な構造も計算対象に含まれていることを指摘しておきたい。



$$\begin{pmatrix} \langle T \rangle \\ \langle R \rangle \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \langle in \rangle \\ 0 \end{pmatrix}$$

図3 散乱行列 S による入力と出力の関係。透過成分のベクトル $\langle T \rangle$ には透過方向の回折光の情報もすべて含まれている。反射成分のベクトル $\langle R \rangle$ についても同様である。

散乱行列の構成法などについての詳細についてはすでに文献 [1] で紹介したとおりであり、ここでは繰り返さないことにする。

3. 数値計算の実例

3.1 光学スペクトルの計算例

ここでは開発したコードによる 2 次元メゾ周期体の光学スペクトルの一例を示す。金属材料、とくに銀からなる周期体の単位胞を図4の上段に示している。黒線で示す単位胞は銀（灰色部）と空気（白色部）からなっており、 x 、 y 方向に周期的に並ぶことでメゾ周期体を構成する。単位胞は一辺 600 nm の正方形とする。図4(a) は回折格子状の構造体であり、図4(b) は縦線と矩形が並んだ 2 次元パターンからなるメゾ周期体である。より現実的な設定にするために、メゾ周期体の z 軸方向の厚みは 60 nm として石英基板の上にあるとする。銀の比誘電率は文献値 [8] を使用し、空気、石英の比誘電率をそれぞれ 1.00、2.13 とした。

入射平面波はメゾ周期体に空気側から基板に向かって垂直に入射する場合を考え、入射偏光は

x 偏光とする ($\mathbf{E}_{in} \parallel x$)。このときの反射 (R 、赤線)、透過 (T 、青線) スペクトルを図 4 の下段に示している。図 4(a) は典型的な回折格子であり、1 次元周期系である。その反射のディップは表面プラズモン共鳴に対応している。金属のメゾ周期体はプラズモン起源の共鳴状態をもつことからプラズモニック結晶と呼ばれる。

一方、図 4(b) の 2 次元的なプラズモニック結晶は単位胞中央に縦 400 nm、横 160 nm の矩形の穴が開いているために光学的な特性が大きく変化する。とくに 1.5 eV より低エネルギー側での透過率が大きく、対応して反射率が小さい。これは図 4(a) の 1 次元系では見られない性質である。実際反射率は 100% 近い。図 4(b)において単位胞内で金属が占める面積比の減少分よりもはるかに反射率が低下していることは注目に値する。入射光の波長は 1000 nm 程度であるが、400 nm × 160 nm の矩形や幅 80 nm のスリットを効率的にすり抜けていくという直感的な描像を描くことができる。図 4(a) のようなスリットのみではこのようなことは起こらず、また単位胞内に矩形孔のみがある場合も起こらない。微細構造の組み合わせによって図 4(b) の低エネルギー側の高い透過率が可能になっている。図 4 での光学スペクトルの計算精度は 1% 未満と見積もることができ、高い精度での数値計算が実行できている。プラズモニック共鳴のより詳細な理解を得るためにには入射角度、偏光を変えて光学スペクトルを精査することおよび電磁場分布を検証することなどが必要であるが、やや専門的になりすぎるので計算実行時間の比較に移ることにする。

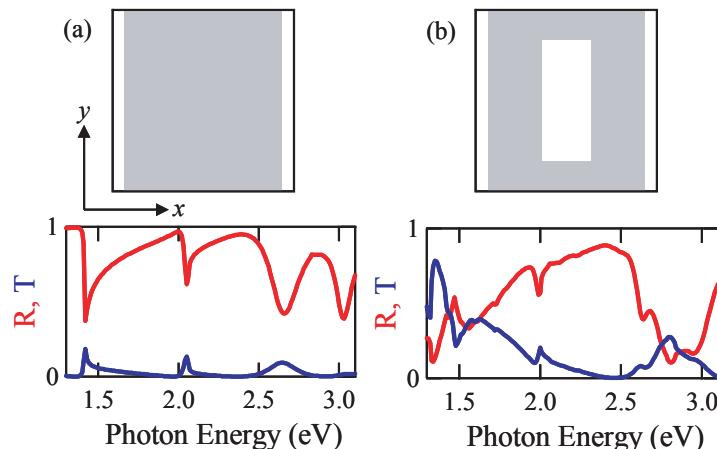


図 4 (a) 回折格子状単位胞とその反射 (R 、赤線)、透過 (T 、青線) スペクトル。(b) 2 次元周期構造をもつ単位胞とその反射、透過スペクトル。黒線の単位胞は一辺 600 nm の正方形である。灰色部分が銀、白色部が空気を表している。

3.2 計算実行時間の比較

この節では計算実行時間を多面的に比較する。最初に固有値方程式を式 (34) のままで解く場合と式 (35) のように縮約して解く場合を比較する。その後に SX-9 とワークステーション (WS) でのコードの運用における経験について述べ、読者の参考に資したい。

まず、固有値方程式を縮約する効果について述べる。単純に考えると、式 (34) の行列サイズは $4N \times 4N$ で、式 (35) では $2N \times 2N$ であるから、後者が高速になることは明らかに感じられる。しかしながら、式 (34) の行列は対角成分がすべて 0 であることから固有値を求める過程が大幅に簡単になる。たとえば行列式を計算することを考えてみれば必要な掛け算の回数が一

般の行列に比べて激減する。したがって、筆者は後者が速いとはいえ、その差はあまり大きくなはないのではないかと当初予想していた。図 4(b) に示した単位胞をもつプラズモニック結晶の光学スペクトル計算（データ点 181 点）を例に比較した結果を表 1 にまとめた。コードは自動並列化のみのオプションでコンパイルして、SX-9 の p16 上で実行した。

結果をみると、縮約版の高速化が目立つ。フーリエ係数の切断次数にあたる N が比較的小さい範囲では縮約版はおよそ 1/4 の時間で計算できる。しかし N が大きくなってくると、縮約版の計算時間は 1/6 より小さくなっている。時間差が広がっていく印象が強い。また、並列化率が縮約版のほうが大きい。これは式 (34) の固有値、固有ベクトルを求める際に並列化が著しく阻害されていると考えられる。対角ブロックの成分がすべて 0 であるような特殊な行列を扱うことが ASL 関数がやや不得手なのかもしれない。計算時間などには大きな差が出たが、使用メモリに関しては両者に大差はない。計算精度を追求するときにはもう少し大きい N での計算実行も必要であるから、縮約版の使用は必須といえる。

| N | 元のまま: 式 (34) | | | 縮約版: 式 (35) | | |
|------|----------------|---------|----------------|--------------|------|------------|
| | CPU time (s) * | 並列化率 ** | 使用メモリ (GB) *** | CPU time (s) | 並列化率 | 使用メモリ (GB) |
| 225 | 2121 | 2.56 | 0.96 | 599 | 6.24 | 1.024 |
| 441 | 11589 | 1.62 | 1.984 | 2529 | 4.06 | 1.920 |
| 729 | 45108 | 1.44 | 4.288 | 7804 | 3.74 | 4.096 |
| 1089 | 138174 | 1.41 | 8.704 | 21415 | 3.91 | 8.384 |

それぞれの定義は次のとおり。
*ログファイルの Real Time (s)。

User Time/Real Time。 *ログファイルの値。

表 1 固有値方程式を縮約しない場合とした場合での計算時間などの比較。
CPU time は図 4 のスペクトルを一つ計算するのに要した時間。

同じコードを 4 並列まで可能な WS でも実行してみた。行列の固有値問題を解くために ASL 関数の代わりに LAPACK を使用した。経験的に言って、並列数などを同じ条件下で WS で実行すると約 30 倍時間がかかる。WS の CPU 単体の処理速度は SX-9 上の CPU とクロック数では大差ない。後者はベクトル型演算ができる利点があるにせよ、決定的な理由ではないだろう。また WS はメモリ 64 GB を搭載しており不足することはない。それにもかかわらずこの違いが起こる原因として、WS 上のコンパイラがコードの大部分を並列化できないこと（SX-9 では自動並列化でほとんど並列化される）、固有値問題を解くのが遅いことが挙げられる。現実的な時間内に結果を得て、研究を進めるという立場からすると、WS を使うことは選択肢にないと言ってよい。大型計算機においては、ハードウェアはもちろんのこと、コンパイラなどのソフトウェアの重要性を改めて認識した次第である。今後も SX-9 の後継開発がハード、ソフトの両面で進んでいくことを期待したい。

4. まとめ

電磁気学の基礎方程式であるマクスウェル方程式を周期系に適用する際に生じるフーリエ係数の有限次切断問題について述べ、数値的に高速な収束性を示すアルゴリズムをかなり詳細に説明してきた。やや詳細に踏み込みすぎている感もなくはないが、物理現象を取り扱う基礎方程式（熱

伝導方程式、流体方程式、シュレーディンガー方程式など)には境界での接続条件をみたすようになり立つものが多く、同じようなアルゴリズムで効率的に数値計算できる物理現象も少くないと考えられる。その意味で、逆積ルールによるフーリエ係数の取り扱いはかなり普遍的な手法として、これから様々な場面で利用されていくであろう。

ひとたび各周期層の固有電磁波状態を精度よく求めることができれば、散乱行列法によって系全体の光学応答を求めることができる。また、積層構造にも対応できることから、3次元的な周期構造体も自動的に計算対象になった。

開発したコードを具体的なプラズモニック結晶に応用して、光学スペクトルを計算し、単位胞によって大きく異なる光学特性を例示した。その例をつうじて現実的な計算時間で結果を得ることを確認した。さらに計算実行時間について比較して、縮約した固有値方程式が SX-9 上での運用に適していることも明らかにしてきた。

謝辞

本研究を通じて開発したコードは東北大学サイバーサイエンスセンターの大泉氏をはじめとするセンター職員の方々のご支援によって改良されたものである。ここに謝意を表したい。

参考文献

- [1] 岩長, 「散乱行列法を用いたフォトニック結晶の光学応答解析」 SENAC **39**(3), 25–32 (2006).
- [2] 岩長, 「メタマテリアルにおける有効光学定数の決定法と応用」 SENAC **40**(3), 5–14 (2007).
- [3] 岩長, 「遺伝アルゴリズムを用いた光機能性人工構造体の探索」 SENAC **41**(3), 43–51 (2008).
- [4] M. Iwanaga, “Optically deep asymmetric one-dimensional plasmonic crystal slabs: Genetic algorithm approach,” J. Opt. Soc. Am. B **26**(5), 1111–1118 (2009).
- [5] L. Li, “Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures,” J. Opt. Soc. Am. A **13**(9), 1870–1876 (1997).
- [6] L. Li, “New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings,” J. Opt. Soc. Am. A **14**(10), 2758–2767 (1997).
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd ed. (Pergamon, New York, 1984) p. 268.
- [8] P. B. Johnson and R. W. Christy, “Optical Constants of the Noble Metals,” Phys. Rev. B **6**(12), 4370–4379 (1972).