

[報 告] 計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供利用報告

実験Dにおけるスパコンを使ったシミュレーション演習

佐藤 昭

東北大学 電気通信研究所

東北大学工学部では、4年生を対象に「実験D」という授業を行なっている。これは、研究室に新たに配属された学生に、その研究室が行なっている研究の基礎理論を教え、また研究手法（理論解析・シミュレーション・実験手法等）を習得してもらうことを目的としている。我々の研究室では、化合物半導体ヘテロ接合およびグラフェン中の二次元電子ガスのプラズモン共鳴を利用したテラヘルツ波デバイスの研究を、実験と理論の両面から行なっている。本年度からイバーサイエンスセンターの「計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供」の制度を利用させていただき、我々が研究で行なっているシミュレーション手法を学生に学習してもらった。

我々の研究テーマの一つとして、数百 nm の長さ・間隔を持った周期格子金属ゲート構造にちょうど差周波数がテラヘルツ帯になるような可視光・赤外領域の2波長の電磁波を照射し、透過成分によってゲート直下の二次元プラズモンを励起させる、というものがある。格子ゲートの長さ・間隔・厚さ、あるいはゲート金属の種類によっては金属中の表面プラズモンによる異常透過が起こり、それによって二次元プラズモン励起効率を高めることが期待できる。この系の解析に、我々は FDTD 法を用いている。今回初めてサイバーサイエンスセンターのスパコンを使用するにあたり、フリーの FDTD シミュレータである Meep を並列コンピュータ Express5800 上にインストールし、並列実行を行なった。学生にはインストール作業も手伝ってもらうことで、スパコンの使い方に慣れてもらった。なお、スパコン利用の際には、Windows 環境においては Tera Term、Linux 環境においては ssh コマンドを用いてスパコンにリモートログインを行なった。（失敗談として、互換性のなさが原因で Meep を SX-9 上に移植することが出来なかった。そこで、後述するように、この研究テーマとは違うテーマで使っている自作のシミュレータを SX-9 に移植し、学生に使ってもらった。）

学生には、複数組の構造パラメータに対し、シミュレータを実行し、出力を画像に変換するという一連の作業を繰り返してもらった。典型的な電磁波透過の様子を図1に示す。理論的に頭で分かっていることであっても、実際に現象を可視化された形で見ることにより、より深く理解ができたのではないかと思う。

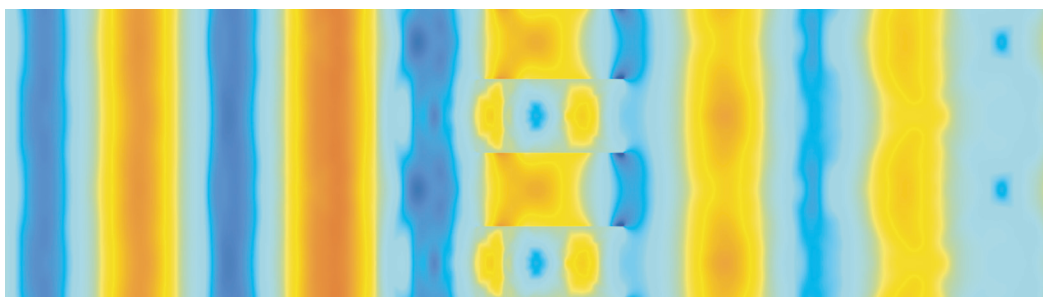


図1. 周期格子金属ゲート構造における、電磁波の透過の様子。左から入射、中央が格子ゲート。

また、SX-9にも触れてもらうため、グラフェン内での電子間散乱を解析するシミュレータを移植し、Express5800とSX-9での実行速度の比較をしてもらった。この問題は電子間散乱の散乱積分（三重積分）を数値的に求める部分がボトルネックであり、本来は超並列コンピュータ向きの計算であるが、CPU数の関係もあり、使用制限の範囲内ではSX-9でベクトル化させた方が速かった（計算効率としては、7GFLOPS/CPUと性能をフルに発揮できていない状況であった）。

謝辞

最後に、貴重な資源を使わせていただき、また学生に有益な経験を与えていただいた東北大学サイバーサイエンスセンターの皆様に感謝いたします。