

Быстрый и эффективный подход и исследование его реализации для проектирования волновых компонент

Ю.Б. Минин^{1,2}, М.В. Федоров¹

¹Сколковский институт науки и технологий, Центр по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных, Москва, Россия, Iurii.Minin@skoltech.ru

²Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Фрязино, Московская область, Россия

Аннотация — Мы предлагаем и исследуем новый подход, оптимизирующий вычисления электрического поля. Предлагаемый подход позволяет достигнуть более приемлемое соотношение времени вычислений к требуемой точности по сравнению с коммерчески доступными или широко используемыми методами. Он основан на методе интегральных уравнений функций Грина, использует методы взвешенной оптимизации и быстрые матрично-векторные произведения на основе Теплиц-подобных матриц для GMRES и применяет GPGPU-ускорители.

Существует много подходов для GMRES при решении разных типов систем линейных уравнений. Однако, до сих пор нет широко применяемого или коммерчески доступного подхода, ускоряющего GMRES для решения систем линейных уравнений на основе Теплиц-подобных матриц и применяющий для своей реализации распараллеливание на CUDA C++. Поэтому мы предлагаем новый подход для GMRES, который учитывает возможность FFT-ускорения матрично-векторных произведений и применяющий GPGPU-ускоритель.

Предлагаемый подход имеет преимущества для топологической оптимизации пассивных фотонных компонент.

Ключевые слова — топологическая оптимизация, FFT, GMRES, GPU.

I. ВВЕДЕНИЕ

В статье представлен новый быстрый и эффективный подход для повышения скорости расчета электрического поля. Подход основан, во-первых, на решении уравнения Гельмгольца в матричном виде на основе интегральных функций Грина [1]; во-вторых, на FFT-ускорении матрично-векторных произведений для решения систем линейных уравнений на основе Теплиц-подобных матриц; на использовании высокопроизводительных вычислений путём распараллеливания реализации на CUDA C++ [2]. Работа была продемонстрирована с использованием узла GPU Tesla V100, CPU которого является Xeon Gold 6140 [3].

Кроме того, статья посвящена исследованию точности численного решения, получаемого предлагаемым подходом, относительно аналитического решения. Численное решение рассматривается для решения двумерной задачи Лоренц–Ми–Дебая, то есть рассеяние электромагнитной плоской волны на цилиндре [4]. В добавок, представленное исследование зависимости относительных точностей от количества узлов на длину волны позволило найти такое количество узлов сетки на длину волны, которое было бы приемлемым для топологической оптимизации.

При проектировании фотонных и гибридных (фотонно-электронных) схем возникает необходимость расчета электрического поля [5].

Электрическое поле может быть рассчитано с помощью систем автоматизированного проектирования или программными пакетами (например, Comsol, Ansys, MEEP, Synopsys) [6, 7] или известными методами, такими как FDTD и FEM [8].

Для проектирования фотонных компонент используют различные методы [6, 7, 8]. Одним из них является топологическая (структурная) оптимизация для обратного проектирования фотонных компонент [9].

Топологическая оптимизация (ТО) — это задача математической оптимизации, которая включает в себя проектирование формы и изменение структуры устройства таким образом, чтобы суперпозиция целевых функций имела тенденцию к снижению [9]. ТО начали использоваться для компонентов фотонных интегральных схем (ФИС) в прошлом веке, например, для мультиплексоров с разделением длин волн [10]. Кроме того, он был предложен для других устройств, таких как фотонные кольца [11]. Были предприняты попытки ускорения для обратного проектирования фотонных кристаллов (точность высока, вычислительное время составляет 1—10 часов) [12] и для фотонных структур с использованием машинного обучения (вычислительное время составляет миллисекунды, но точность значительно ниже) [13]. Однако, не существует коммерчески доступного или широко используемого подхода, сочетающего

преимущества обоих методов. Поэтому мы предлагаем новый подход, который может иметь время от одной до итерации порядка 1 минуты для точности измерения порядка 1%. Кроме того, он будет предназначен для оптимизации фотонных компонентов ФИС. Новизна этого подхода заключается в применении метода интегральных уравнений на основе функций Грина (GFIEМ) (решатель уравнений Гельмгольца) для расчетов распределения электрического поля. GFIEМ представлен линейной системой с основной матрицей, подобной Теплицу [1]. Эта линейная система может быть решена численно с помощью реализации алгоритма обобщенных минимальных невязок (GMRES) [14], который был нами в предлагаемой статье GPGPU-ускорен на языке программирования CUDA C++ [15] и завернут в программный пакет Python [16]. Другие ускоренные версии GMRES также были представлены ранее [17]. Однако они не учитывают возможность FFT-ускорения умножения матриц на векторы для решения линейных систем на основе Тёплиц-подобных матриц [18]. Таким образом, эта дополнительная функция реализована в предлагаемом подходе и его программном пакете.

Сложность вызвана необходимостью поиска приемлемого соотношения времени вычислений к достигнутой точности. Вычисления целевых функций и прогнозирование их изменений являются наиболее затратными по времени частями ТО. Кроме того, предлагаемая реализация основана на решении уравнения Гельмгольца в виде линейной системы на основе матрицы, подобной Тёплицевой. Решение линейных систем может быть достигнуто за минимальное количество вычислительного времени с использованием GMRES [19]. Кроме того, наиболее вычислительно дорогостоящей его частью являются матрично-векторные продукты, которые можно ускорить с помощью FFT, поскольку основная матрица метода GFIEМ подобна матрице Тёплица [18].

Одним из стандартных компонентов ФИС является тейпер. Тейперы необходимы, например, для захвата света снаружи в волновод с помощью решеток. Рассмотрим пример оптимизации тейпера для повышения ее производительности при получении света заданной длины волны. Исходной структурой для оптимизации является линейный тейпер. Задача оптимизации производительности заключается в добавлении или вычитании вокселей на конической поверхности таким образом, чтобы интенсивность связи увеличивалась. Мы используем единую сетку для дискретизации структуры. Мы управляем контрастом с высоким показателем преломления и декартовыми координатами. Мы моделируем наличие или отсутствие вещества компонента ФИС в среде [14].

II. УРАВНЕНИЕ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

Мы решаем двумерное уравнение Гельмгольца для волнового компонента, распределение материала (диэлектрическая проницаемость ϵ) в среде (ϵ), которая связывает общее и начальное поля $u(r)$, $w(r) \in \mathbb{C}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u(r) + k_0^2 u(r) = 0, r \in \mathbb{R}^2 \setminus \Omega; \\ u(r) = 0, r \in \partial\Omega; \\ \text{граничное условие Дирихле;} \\ \lim_{|r| \rightarrow \infty} (ik_0(u-w)(r) - \partial_{|r|}(u-w)(r)) = 0; \\ \text{условие излучения Зоммерфельда;} \end{array} \right.$$

где Δ - оператор Лапласа, r - пространственный вектор, а k_0 - волновое число [1]. Решение уравнения Гельмгольца может быть представлено для равномерной сетки квадратного двумерного пространства Ω через двухуровневую матрицу Теплица $H^{(2)} \in \mathbb{C}^{n^2 \times n^2}$ [1, 14, 20] в матрице системы линейных уравнений A :

$$Ax = Ix - k_0^2(\epsilon - \tilde{\epsilon})m * x,$$

где $x \in \mathbb{C}^{n^2}$ находится распределения электрического поля для равномерной сетки $r \in \mathbb{R}^{n \times n}$ из Ω , I - это единичная матрица, оператора «*» - это оператор Кронекера и $m \in \{0,1\}^{n^2}$ - двоичная маска распределения материала фотонного компонента в домене проектирования. Это подробно описано в предыдущей работе [14], где мы использовали FFT для умножения теплицевой матрицы $H^{(2)}$ на вектор. Кроме того, количество вычислений было сокращено за счет использования двухуровневого суррогата матрицы Теплица $G \in \mathbb{C}^{(2n-1) \times (2n-1)}$. Количество узлов Ω равно n^2 .

III. РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы рассматриваем распространяющийся в среде с фотонным компонентом, световой луч (в виде плоских волн), заведенный снаружи (снизу, параллельно оси Oz) в тейпер. Мы проводим оптимизацию тейпера с использованием гауссова луча (рис. 1) с длиной волны $\lambda=1.5$ мкм. Каждая строка представляет собой ту или иную итерацию топологической оптимизации. Сверху вниз - 5-я, 342-я, 1353-я и 3073-я итерации топологической оптимизации. Целевая функция для тейпера - это сумма интенсивностей (в условных единицах) на выходе из тейпера и на входе в тейпер, то есть, другими словами, мы хотим завести как можно больше светового пучка плоских волн извне в тейпер, так чтобы при этом не было высветов. Значения целевой функции для таких итераций следующие: 0.06591092 (начало оптимизации), 0.10612043 (локальный максимум), 0.0634559 (второй локальный максимум), 0.05237718 (второй локальный минимум).

Первый столбец представляет распределение масок (черные пиксели - распределение среды, белые пиксели - распределение материалов компонентов). Мы выбрали воздух в качестве среды воздуха и SiO₂ в качестве материала компонента. Oz - это ось симметрии. Oх - поперечная ось. Входная, выходная ширина и длина начальной формы тейпера составляют 12.5 мм, 0.5 мм, 32 мм. Второй столбец представляет распределения интенсивности с фиксированной цветовой гаммой справа. Третий столбец представляет распределение градиента для ТО на основе градиента

(численный метод наискорейшего спуска) [14]. Последний столбец представляет собой интенсивность на входе в тейпер (синяя кривая) и на его выходе (зеленая кривая). Целевая функция – это сумма интенсивностей на выходе и входе. Наилучшая целевая

функция достигается при маске, соответствующей 342-ой итерации ТО (вторая трока) (расчет после ожидания в течение 20716 секунд), в то время как все 8192 итерации выполняются в течение 375646 секунд (примерно 60,8 секунды на итерацию).

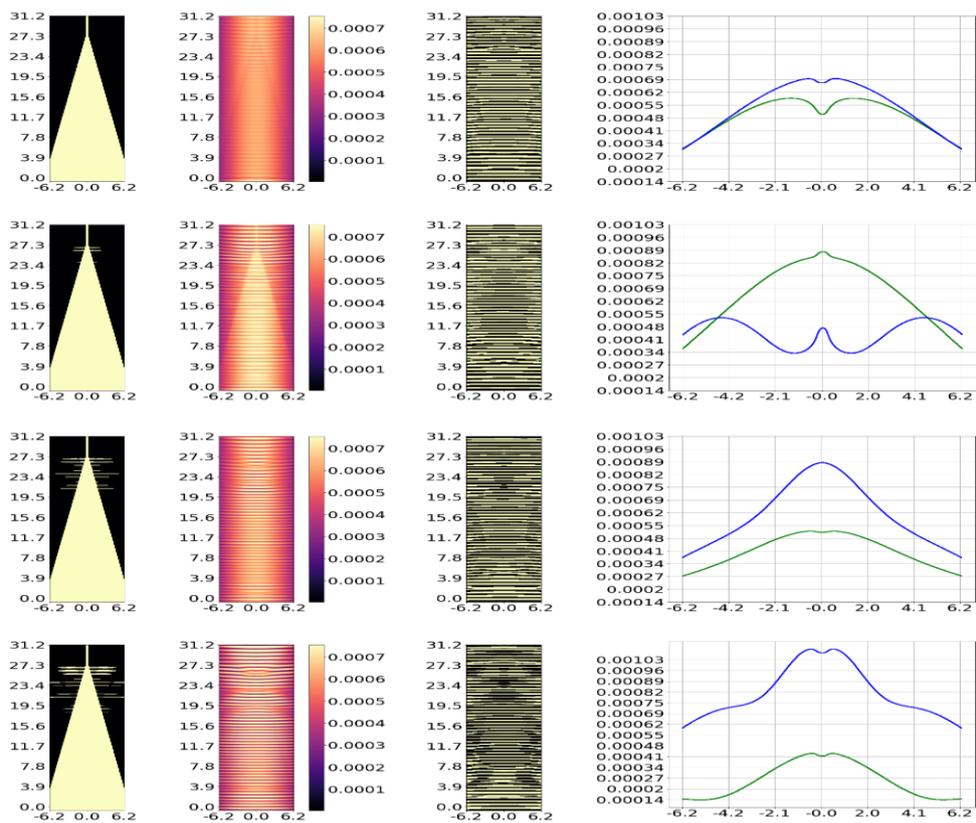


Рис. 1. Результаты топологической оптимизации тейпера

До 342 итерации целевая функция возрастает. В 342 итерации целевая функция принимает наибольший наблюдаемый максимум, представленный на рисунке. После 342 итераций наблюдается тенденция к снижению значений целевой функции.

Точность предлагаемого программного обеспечения определяется количеством узлов на длину волны (разрешение по длине волны) и, как правило, не зависит от соотношения числа длин волн на домен (когда разрешение по длине волны является постоянным). Мы представляем результат для разрешения 4096×4096 , точность вычисления распределения электрического поля составляет 8,9% (123 узла на длину волны).

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная ТО показала результативность и увеличила заведение плоской волны внутрь тейпера на 60% по интенсивности. Однако, поскольку предложенная ТО настроена таким образом, что эта ТО пытается добавить материал фотонного компонента в среду, даже если нет улучшений в ТО (насыщенность), потому что мы попытались получить один из следующих локальных максимумов, который больше первого. Однако предлагаемая ТО реализована с

использованием только добавления компонентного материала. Более того, мы ставили счёт ТО всего примерно на 5 дней. Это основа для будущих исследований, к которым мы можем приступить, используя двунаправленные итерации и итерирование ТО на протяжении примерно месяца.

Предлагаемая ТО обладает возможностями настройки показателя преломления на любой требуемый, чтобы можно было запустить ТО для любого реального распределения вещества фотонных компонентов. Мы открываем новые возможности для одновременного использования одной программы для нескольких целей, таких как вычисление распределения электрического поля и быстрые вычисления для решения систем линейных систем на основе матриц Тёплица. Для последующего исследования мы можем использовать либо суперпозицию любых целевых функций, либо волноводные моды. Кроме того, мы можем использовать машинное обучение и взвешенную целевую функцию для прогнозирования изменений масок, чтобы интенсивность вывода компонентов ФИС приближалась к ожидаемому распределению интенсивности. Предлагаемый программный пакет может стать расширением или дополнением для

широко используемых пакетов, таких как Comsol, Ansys, МЕЕР, Synopsys.

ПОДДЕРЖКА

Работа была выполнена в рамках государственного задания по теме «Космос» ФИРЭ им. В. А. Котельникова РАН.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Søndergaard T. M. Green's Function Integral Equation Methods in Nano-optics. — CRC Press, 2019.
- [2] Guide D. Cuda с best practices guide // NVIDIA, July. — 2013.
- [3] "Zhores" — Petaflops supercomputer for data-driven modeling, machine learning and artificial intelligence installed in Skolkovo Institute of Science and Technology / Igor Zacharov, Rinat Arslanov, Maksim Gunin et al. — 2019. — October. — Vol. 9. — P. 512. — 1. online; accessed: <https://www.degruyter.com/view/j/eng.2019.9.issue-1/eng-2019-0059/eng-2019-0059.xml>.
- [4] Frezza F., Mangini F., Tedeschi N. Introduction to electromagnetic scattering: tutorial // JOSA A. — 2018. — Vol. 35, no. 1. — P. 163–173.
- [5] Molding the flow of light / John D Joannopoulos, Steven G Johnson, Joshua N Winn, Robert D Meade // Princeton Univ. Press, Princeton, NJ [ua]. — 2008.1
- [6] Multiphysics C., Guide C. M. U. Comsol // Inc., Burlington, MA, www.comsol.com. — 2005.
- [7] Synopsys. Rsoft lasermod user guide v2018. 03 // Inc., Optical Solutions Group, Ossining, NY. — 2018.
- [8] Numerical methods in photonics / Andrei V Lavrinenko, Jesper Lægsgaard, Niels Gregersen et al. — CRC Press, 2018.
- [9] Bendsoe M. P., Sigmund O. Topology optimization: theory, methods, and applications. — Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] Bannister J., Fratta L., Gerla M. Optimal topologies for the wavelength-division optical network // Proc. EFOC/LAN'90 / Munich, Germany. — 1990. — P. 53–57.
- [11] Banerjee S., Mukherjee B. The photonic ring: Algorithms for optimized node arrangements // Fiber & Integrated Optics. — 1993. — Vol. 12, no. 2. — P. 133–171.
- [12] Smajic J., Hafner C., Erni D. Optimization of photonic crystal structures // JOSA A. — 2004. — Vol. 21, no. 11. — P. 2223–2232.
- [13] Asano T., Noda S. Iterative optimization of photonic crystal nanocavity designs by using deep neural networks // Nanophotonics. — 2019. — Vol. 8, no. 12. — P. 2243–2256.
- [14] Evolutionary structural optimization algorithm based on fft-jvie solver for inverse design of wave devices / Iurii B Minin, Egor E Nuzhin, Alexey I Boyko et al. // 2018 Engineering and Telecommunication (EnT-MIPT) / IEEE. — 2018. — P. 146–150.
- [15] Minin I. B. pycuGMRES. — <https://github.com/archilless/pycuGMRES>. — 2020. — Jan. — Access mode: <https://pypi.org/project/pycuGMRES/>.
- [16] Minin I. B. cuGMRES. — <https://github.com/archilless/cuGMRES>. — 2020. — Jan.
- [17] Couturier R. Designing scientific applications on GPUs. — CRC Press, 2013.
- [18] Chu E., George A. Inside the FFT black box: serial and parallel fast Fourier transform algorithms. — CRC Press, 1999.
- [19] Saad Y., Schultz M. H. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on scientific and statistical computing. — 1986. — Vol. 7, no. 3. — P. 856–869.
- [20] Lucia M., Maggio F., Rodriguez G. Numerical solution of the helmholtz equation in an infinite strip by wiener-hopf factorization // Numerical Methods for Partial Differential Equations. — 2010. — Vol. 26, no. 6. — P. 1247–1274.

Fast and Efficient Approach and Its implementation Study for the Design of Wave Components

Iu.B. Minin^{1,2}, M.V. Fedorov¹

¹Skolkovo Institute of Science and Technology, Skoltech Center for Computational Data-Intensive Science and Engineering, Moscow, Russia, Iurii.Minin@skoltech.ru

²Fryazino Branch of Kotel'nikov Institute of Radio-Engineering and Electronics of RAS, Fryazino, Moscow Region, Russia

Abstract — We propose and investigate a new approach that optimizes the calculation of the electric field. The proposed approach makes it possible to achieve a more acceptable ratio of calculation time to the required accuracy compared to commercially available or widely used methods. It is based on the method of integral equations of Green's functions, uses weighted optimization methods and fast matrix-vector products based on Toeplitz-like matrices for GMRES, and applies GPGPU accelerators.

There are many approaches for GMRES in solving different types of systems of linear equations. However, there is still no

widely used or commercially available approach that accelerates GMRES for solving systems of linear equations based on Greenhouse-like matrices and uses parallelization in CUDA C++ for its implementation. Therefore, we propose a new approach for GMRES, which takes into account the possibility of FFT acceleration of matrix-vector products and uses a GPGPU accelerator.

The proposed approach has advantages for the topological optimization of passive photonic components.

Keywords — topology optimization, FFT, GMRES, GPU.

REFERENCES

- [1] Søndergaard T. M. *Green's Function Integral Equation Methods in Nano-optics*. — CRC Press, 2019.
- [2] Guide D. *Cuda c best practices guide* // NVIDIA, July. — 2013.
- [3] "Zhores" – Petaflops supercomputer for data-driven modeling, machine learning and artificial intelligence installed in Skolkovo Institute of Science and Technology / Igor Zacharov, Rinat Arslanov, Maksim Gunin et al. — 2019. — October. — Vol. 9. — P. 512. — 1. online; accessed: <https://www.degruyter.com/view/j/eng.2019.9.issue-1/eng-2019-0059/eng-2019-0059.xml>.
- [4] Frezza F., Mangini F., Tedeschi N. *Introduction to electromagnetic scattering: tutorial* // JOSA A. — 2018. — Vol. 35, no. 1. — P. 163–173.
- [5] *Molding the flow of light* / John D Joannopoulos, Steven G Johnson, Joshua N Winn, Robert D Meade // Princeton Univ. Press, Princeton, NJ [ua]. — 2008.1
- [6] Multiphysics C., Guide C. M. U. Comsol // Inc., Burlington, MA, www.comsol.com. — 2005.
- [7] Synopsys. *Rsoft lasermod user guide v2018.03* // Inc., Optical Solutions Group, Ossining, NY. — 2018.
- [8] *Numerical methods in photonics* / Andrei V Lavrinenko, Jesper Lægsgaard, Niels Gregersen et al. — CRC Press, 2018.
- [9] Bendsoe M. P., Sigmund O. *Topology optimization: theory, methods, and applications*. — Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] Bannister J., Fratta L., Gerla M. *Optimal topologies for the wavelength-division optical network* // Proc. EFOC/LAN'90 / Munich, Germany. — 1990. — P. 53–57.
- [11] Banerjee S., Mukherjee B. *The photonic ring: Algorithms for optimized node arrangements* // Fiber & Integrated Optics. — 1993. — Vol. 12, no. 2. — P. 133–171.
- [12] Smajic J., Hafner C., Erni D. *Optimization of photonic crystal structures* // JOSA A. — 2004. — Vol. 21, no. 11. — P. 2223–2232.
- [13] Asano T., Noda S. *Iterative optimization of photonic crystal nanocavity designs by using deep neural networks* // Nanophotonics. — 2019. — Vol. 8, no. 12. — P. 2243–2256.
- [14] *Evolutionary structural optimization algorithm based on fft-jvie solver for inverse design of wave devices* / Iurii B Minin, Egor E Nuzhin, Alexey I Boyko et al. // 2018 Engineering and Telecommunication (EnT-MIPT) / IEEE. — 2018. — P. 146–150.
- [15] Minin I. B. *pycuGMRES*. — <https://github.com/archilless/pycuGMRES>. — 2020. — Jan. — Access mode: <https://pypi.org/project/pycuGMRES/>.
- [16] Minin I. B. *cuGMRES*. — <https://github.com/archilless/cuGMRES>. — 2020. — Jan.
- [17] Couturier R. *Designing scientific applications on GPUs*. — CRC Press, 2013.
- [18] Chu E., George A. *Inside the FFT black box: serial and parallel fast Fourier transform algorithms*. — CRC Press, 1999.
- [19] Saad Y., Schultz M. H. *Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems* // SIAM Journal on scientific and statistical computing. — 1986. — Vol. 7, no. 3. — P. 856–869.
- [20] Lucia M., Maggio F., Rodriguez G. *Numerical solution of the helmholtz equation in an infinite strip by wiener-hopf factorization* // Numerical Methods for Partial Differential Equations. — 2010. — Vol. 26, no. 6. — P. 1247–1274.