РАДИОТЕХНИКА И ЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 68, № 10, с. 989–991

НАНОЭЛЕКТРОНИКА

УДК 537.876;535.3

БЫСТРЫЙ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ К ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ МИКРОУСТРОЙСТВ[1]

© 2023 г. Ю. Б. Минин*

Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
пл. Введенского, 1, Фрязино Московской обл., 141190 Российская Федерация

**E-mail: Iurii.Minin@skoltech.ru*

Поступила в редакцию 17.05.2023 г.
После доработки 17.05.2023 г.
Принята к публикации 25.05.2023 г.

Предложен новый численный подход для быстрого и эффективного расчета электрических волн, проходящих через волновые микроустройства, с помощью уравнения Гельмгольца. Исследованы эффективность, быстродействие и точность этого подхода.

DOI: 10.31857/S003384942310011X, **EDN:** DOSFMO

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для улучшения физических характеристик волн на выходах волновых устройств с характерным размером ~1 мкм посредством изменения формы самих устройств необходимо уметь прогнозировать указанные характеристики с применением вычислительной симуляции, т.е. необходимо рассчитывать электрические поля и проводить топологическую оптимизацию волновых устройств [1, 2].

Решение таких задач особенно важно при проектировании интегральных схем (ИС) и их компонентов, потому что измерение физических характеристик каждого отдельного компонента ИС на практике может быть весьма затруднительным и иногда даже невозможным (например, в случае фотонных ИС) [3]. Кроме того, задача улучшения физических характеристик без использования вычислительных методов сталкивается с необходимостью каждый раз заново изготавливать ИС, что сопряжено с дополнительными материальными затратами и экологическим ущербом. Вдобавок, малое изменение дизайна каждого компонента ИС может сильно влиять на физические характеристики на выходе компонентов ИС и самих ИС [4, 5].

Такие вычислительные симуляции производятся, например, с помощью Comsol [6], Synopsys (https://www.synopsys.com), MEEP [7] и прочими инструментами. Однако отмеченные коммерчески доступные программы требуют значительных вычислительных ресурсов для обеспечения приемлемой точности расчета электрических полей. До сих пор нет коммерчески доступного ресурсоэффективного подхода для достижения требуемых точностей вычислений [8].

В данной работе использовано уравнение Гельмгольца [9], которое решено в том числе и для компонентов ИС, характеризующихся распределением диэлектрической проницаемости ε, отличной от проницаемости подложки (среды) $\tilde{\varepsilon}$. Уравнение Гельмгольца соединяет полное и начальное поля $u(r),\ w(r) \in C$:

$$\begin{cases} u(r) + k_0^2 u(r) = 0, \quad r \in \mathbb{R}^2 \backslash \Omega; \\ (r) = 0, \quad r \in \partial\Omega \ \text{граничное условие Дирихле;} \\ \lim\limits_{|r|\to\infty} \left(ik_0 (u-w)(r) - \partial_{|r|} (u-w)(r) \right) |r| = 0 : \\ \qquad\qquad \text{условие излучения Зоммерфельда;} \end{cases}$$

где Δ – оператор Лапласа, r – пространственный вектор, k_0 – волновое число.

Уравнение Гельмгольца решаем в виде объемного интегрального уравнения на основе функций Грина [9]. Далее, после дискретизации полученного уравнения получаем систему линейных уравнений (СЛУ), матрица $H^{(2)}$ которой является тёплицевой:

$$Ax \equiv x - k_0^2 (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}) H^{(2)} m * x = F,$$

где $x \in \mathbb{C}^{n^2}$ – это распределение электрического поля для равномерной сетки $\tilde{r} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ квадратного двумерного пространства Ω, “*" – оператор произведения Кронекера, $m \in \{0,1\}^{n^2}$ – бинарная маска

---

[1] Работа удостоена премии на 19-м конкурсе молодых ученых имени Ивана Анисимкина.

Таблица 1. Результаты численных решений по сравнению с аналитическим решением для разных размеров матриц

Характерный размер матрицы	Количество узлов сетки на длину волны	Достигнутая относительная ошибка	Время вычислений на CUDA, с	Время вычислений на MKL, с	Достигнутое ускорение, %
256	42.7	0.238	0.021	0.41	20
512	85.3	0.117	0.035	1.8	51
1024	170.7	0.061	0.11	8	73
2048	341.3	0.034	0.41	23	56
4096	682.7	0.021	2.4	184	77
8192	1365.3	0.016	7.4	812	110

распределения материала фотонного компонента в областях проектирования, $H^{(2)} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – двухуровневая матрица Тёплица [10, 11], $F \in \mathbb{C}^{n^2}$ – распределение электрического поля в среде при отсутствии компонента ИС.

Благодаря тому, что $H^{(2)}$ – матрица Тёплица, сложность матрично-векторных умножений можно снизить с $O(n^2)$ до $O(n \lg n)$ [9] при помощи быстрого преобразования Фурье и поэлементного умножения "$\odot$":

$$H^{(2)} * x = \mathrm{IFFT}(\mathrm{FFT}(\odot)\mathrm{FFT}(x)),$$

где $G \in \mathbb{C}^{(2n-1)\times(2n-1)}$ – это специальный суррогат тёплицевой матрицы [12, 13].

Кроме того, для решения СЛУ применяем обобщенный метод минимальной невязки (GMRES), который требует меньше итераций, чем, например, стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGSTAB), хотя может требовать гораздо больше памяти, особенно если GMRES применяется без рестартов, потому что в этом случае приходится хранить в памяти ПК базис Крылова размером $k \times n \times n$, где k – количество итераций GMRES, а n – характерный размер матрицы СЛУ [14].

Все отмеченное выше, включая сложность операций, количество итераций и размер используемой памяти ПК определяет эффективность численного подхода по поиску решения уравнения Гельмгольца в виде распределения электрического поля при фиксированной точности его вычислений.

Цель данной работы – создать быстрый и эффективный подход для расчета электрических полей и исследовать показатели его быстродействия и производительности.

2. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Рассмотрим новую реализацию GMRES на CUDA C++ и MKL C++. При написании кода нам удалось обойтись без операций "memcopy" и их аналогов и таким образом увеличить быстродействие. Оценку быстродействия проводили на примере расчета электрического поля для рассеяния Ми на цилиндре в двумерной задаче. В этом примере электрическое поле с плоскими волновыми фронтами приходит из бесконечности и падает на боковую поверхность цилиндра так, что волновые фронты перпендикулярны оси цилиндра.

Вычисления для поставленной задачи Ми были проведены для следующих размеров сетки ($n \times n$) (табл. 1): 256 × 256, 512 × 512, 1024 × 1024, ..., 8192 × × 8192. Для каждой сетки проводили 100 повторов решения задачи Ми, затем вычисляли ошибку численного решения по сравнению с аналитическим, среднее время вычисления для распараллеленного кода (на CUDA) и на последовательном алгоритме (на MKL). В итоге, поделив время последовательной версии на время параллельной, мы определили, насколько ускорился код после распараллеливания. Расчеты на CUDA были произведены с использованием графического процессора Nvidia Tesla V100, а расчеты на MKL – с использованием центрального процессора Xeon Gold 6140.

Как показали результаты, во всех рассматриваемых случаях GMRES сходится и достигает максимальной точности на 24-й итерации по сравнению с аналитическим решением для рассеяния Ми на цилиндре.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе определено (табл. 1), что с увеличением размера сетки улучшается точность расчетов электрического поля, однако вычислительное время увеличивается экспоненциально с характерным размером сетки. Тем не менее ускорение программы, полученное за счет распараллеливания, имеет тренд на увеличение при увеличении размера сетки, что объясняется вовлечением бóльшего количества графических ядер при увеличении количества одновременных вычислений матричных элементов. Предложенный новый подход поможет быстрее и дешевле проектировать новые волновые микроустройства и проводить измерение физических характеристик и топологическую оптимизацию таких микроустройств.

БЛАГОДАРНОСТИ

Выражаем благодарность Сколковскому институту науки и технологий за предоставленный удаленный доступ к суперкомпьютеру “Жорес” [15] для расчетов времени вычислений на CUDA.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена за счет бюджетного финансирования в рамках государственного задания ФИРЭ им. В.А. Котельникова РАН № 0030-2019-0008 (“Космос”).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bendsoe M.P., Sigmund O.* Topology Optimization: Theory, Methods and Applications. Berlin: Springer Sci. & Business Media, 2003.
2. *Bannister J., Fratta L., Gerla M.* // Proc. EFOC/LAN'90. Munich, 27–29 Jul. 1990. Boston: IGI Europe, 1990. P. 53.
3. *Jensen J.S., Sigmund O.* // Laser & Photonics Rev. 2011. V. 5. № 2. P. 308.
4. *Andonegui I., Calvo I., Garcia-Adeva A.J.* // Appl. Phys. A. 2014. V. 115. P. 433.
5. *Minin I.B., Nuzhin E.E., Boyko A.I. et al.* // 2018 Engineering and Telecommun. (EnT-MIPT). Moscow. 15–16 Nov. N.Y.: IEEE, 2018. P. 146.
6. *Dickinson E.J.F., Ekström H., Fontes E.* // Electrochemistry Commun. 2014. V. 40. P. 71.
7. *Oskooi A.F., Roundy D., Ibanescu M. et al.* // Computer Phys. Commun. 2010. V. 181. № 3. P. 687.
8. *Minin I., Matveev S.* // Poster Optica Adv. Phot. Congress 2022. Optica Publ. Group, 2022. P. JTu6B. 6.
9. *Søndergaard T.M.* Green’s Function Integral Equation Methods in Nano-Optics. Boca Raton: CRC Press, 2019.
10. *Olshevsky V., Oseledets I., Tyrtyshnikov E.* // Linear Algebra Appl. 2006. V. 412. № 1. P. 1.
11. *Minin I., Matveev S.* // Poster Laser Congress 2021. Optica Publ. Group, 2021. P. JTu1A.45.
12. *Chu E., George A.* Inside the FFT Black Box: Serial and Parallel Fast Fourier Transform Algorithms. Boca Raton: CRC Press, 1999.
13. *Minin I.B., Matveev S.A., Fedorov M.V. et al.* // Comp. Math. Modeling. 2021. V. 32. № 4. P. 438.
14. *Марчук Г.И., Кузнецов Ю.А.* // Докл. АН СССР. 1968. Т. 181. № 6. С. 1331.
15. *Zacharov I., Arslanov R., Gunin M. et al.* // Open Engin. 2019. V. 9. № 1. P. 512.