

UNIVERSIDAD DE INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

CARRERA DE CIENCIA DE LA COMPUTACIÓN



**Evaluación de Algoritmos de Optimización de Primer
Orden para la Optimización Topológica Robusta de
Dispositivos Nanofotónicos**

TESIS

Para optar el título profesional de Licenciado en Ciencia de la
Computación

AUTOR:

José Leonidas García Gonzales

ASESOR

Jorge Luis Gonzalez Reaño

Lima - Perú

28 de noviembre de 2022

Agradecimientos:

En primer lugar agradecer a mi familia por todo el apoyo brindado. Este trabajo no se hubiera podido completar sin su infinita paciencia, constante soporte y deliciosas comidas.

Mi más profundo agradecimiento al Dr. Jorge Gonzalez por todo el esfuerzo brindado en la realización de este trabajo. Asimismo, gracias a la Dr. Ruth Rubio y al Ing. Roy Prosopio por el constante apoyo con su conocimiento en esta área de investigación.

Finalmente, agradecer también a UTEC por el acceso al cluster Khipu y diferentes recursos computacionales que facilitaron la experimentación desarrollada.

Índice general

	Pág.
RESUMEN	1
ABSTRACT	2
CAPÍTULO 1 Motivación y Contexto	3
1.1 Introducción	3
1.2 Descripción del Problema	7
1.3 Justificación	9
1.4 Objetivos	9
CAPÍTULO 2 Marco Teórico	11
2.1 Dispositivos Fotónicos	11
2.1.1 <i>Bend</i>	12
2.1.2 <i>Wavelength Demultiplexer</i> (WDM)	13
2.2 Parametrización	15
2.3 Simulación	17
2.4 Transformaciones	20
2.4.1 Filtro por Densidad	20
2.4.2 Proyección	21
2.4.3 Aplicación de las Transformaciones	23
2.5 Algoritmos de Optimización	25
2.5.1 <i>Genetic Algorithms</i> (GA)	27

2.5.2 <i>Particle Swarm Optimization</i> (PSO)	29
2.5.3 <i>Covariance Matrix Adapatation Evolution Strategy</i> (CMA-ES)	31
2.5.4 <i>Gradient Descent</i> (GD)	34
2.5.5 <i>Method of Moving asymptotes</i> (MMA)	35
2.5.6 <i>Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries</i> (L-BFGS-B)	37
2.5.7 G-CMA-ES	39
2.5.8 G-PSO	39
2.5.9 G-GA	40
CAPÍTULO 3 Trabajos Relacionados	41
3.1 Inconveniente 1: La Parametrización	42
3.2 Inconveniente 2: La Optimización	44
CAPÍTULO 4 Metodología	46
4.1 Preparación de Simulación	48
4.1.1 <i>Bend</i>	48
4.1.2 WDM	49
4.2 Preparación de Optimización	50
4.3 Optimización Continua	54
4.4 Optimización Discreta	54
4.5 Optimización de Fabricación	55
4.6 Preparación para Fabricación	56
4.7 Alcances y Limitaciones	56
CAPÍTULO 5 Experimentaciones y Resultados	58
5.1 Resultados de Optimización del <i>Bend</i>	60
5.2 Diseño del <i>Bend</i> Mejor Optimizado	64
5.3 Resultados de Optimización del WDM	67
5.4 Diseño del WDM Mejor Optimizado	71

5.5	Discusión de Resultados del <i>Bend</i>	73
5.6	Discusión de Resultados del WDM	75
CAPÍTULO 6 Conclusiones y Trabajos Futuros		78
6.1	Conclusiones	78
6.2	Trabajos Futuros	79

Índice de tablas

4.1	Parámetros usados en el diseño del <i>bend</i> a optimizar.	49
4.2	Parámetros usados en el diseño del WDM a optimizar.	51
4.3	Parámetros usados por los algoritmos de optimización.	53
5.1	Tiempos promedio de simulación en cada etapa de optimización para el <i>bend</i> y WDM con los tres sistemas de cómputo usados.	59
5.2	Relación de orden de los algoritmos en la optimización del <i>bend</i> según los criterios de (i) desempeño, (ii) convergencia y (iii) M_{nd}	74
5.3	Relación de orden de los algoritmos en la optimización del WDM según los criterios de (i) desempeño, (ii) convergencia y (iii) M_{nd}	77

Índice de figuras

1.1	Diseños tradicionales y obtenidos a partir de diseño inverso de un <i>bend</i> y un WDM. En todas las figuras la luz ingresa por la guía de onda izquierda y se propaga hacia la derecha.	4
1.2	<i>Bend</i> con una región de diseño discretizada en 18×18 píxeles. Cada píxel negro representa la presencia de <i>Si</i> y cada píxel blanco de <i>SiO₂</i>	8
2.1	Representación de $ E ^2$ de un <i>bend</i> de $1\mu m$ de radio obtenido usando 3D FDFD bajo una resolución de $30nm$ en una longitud de onda $\lambda = 1550nm$	13
2.2	Representación de $ E ^2$ de un WDM obtenido usando 3D FDFD bajo una resolución de $30nm$	14
2.3	Parametrización basada en píxeles para un <i>bend</i> definiendo \mathbf{P} como una matriz de 18×18	16
2.4	Configuración de simulación para una guía de onda en 3D.	18
2.5	Transformación de proyección con $\eta = 0.5$ y distintos valores de β	22
2.6	Aplicación del filtro de densidad y proyección a una parametrización \mathbf{P}	23
2.7	Contornos de nivel de la función $g(x, y)$	26
2.8	Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando GA.	28
2.9	Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando PSO.	30
2.10	Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando CMA-ES.	34
2.11	Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando GD.	35
3.1	Diseño de un <i>splitter</i> basado en (Prosopio-Galarza <i>et al.</i>, 2019) utilizando $z = 5$ segmentos.	41

4.1	Metodología del trabajo de investigación	47
4.2	Parámetros del diseño del <i>bend</i> a optimizar.	48
4.3	Parámetros del diseño del WDM a optimizar.	50
4.4	Comparación del desempeño de GA, PSO y CMA-ES para optimizar el <i>bend</i> propuesto.	52
5.1	Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización continua del <i>bend</i>	61
5.2	Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización discreta del <i>bend</i>	62
5.3	Gráfico de valores de F_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización de fabricación del <i>bend</i>	63
5.5	Ánalysis del <i>bend</i> mejor optimizado en un rango de longitudes de onda (1500nm – 1600nm)	64
5.4	Posprocesamiento del diseño del <i>bend</i> mejor optimizado.	65
5.6	Posprocesamiento del diseño del <i>bend</i> mejor optimizado tras eliminar regiones no conexas usando $r_f = 100nm$	66
5.7	Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización continua del WDM	68
5.8	Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización discreta del WDM	69
5.9	Gráfico de valores de F_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización de fabricación del WDM	70
5.10	Posprocesamiento del diseño del WDM mejor optimizado.	71
5.11	Ánalysis del WDM mejor optimizado en un rango de longitudes de onda (1250nm – 1550nm)	72

RESUMEN

La fotónica en silicio es un área en desarrollo emergente y constante en las últimas décadas. Los dispositivos fotónicos muestran potencial de aplicación para mejorar los sistemas de cómputo, telecomunicaciones y otras áreas. Sin embargo, aún es un reto integrar una gran cantidad de dispositivos fotónicos fundamentales en un chip con área reducida y baja pérdida. En el presente trabajo se diseñaron dos dispositivos fundamentales: (i) *bend* y (ii) *2-channel wavelength-demultiplexer* (WDM). Los diseños se realizaron en un área de $2\mu m \times 2\mu m$ siguiendo una estrategia basada en optimización topológica robusta.

Realizamos la evaluación y comparativa de cinco algoritmos de optimización de primer orden: (i) *Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries* (L-BFGS-B), (ii) *Method of Moving asymptotes* (MMA), (iii) *Covariance Matrix Adaption Evolution Strategy* (G-CMA-ES), (iv) *Gradient Particle Swarm Optimization* (G-PSO) y (v) *Gradient Genetic Algorithm* (G-GA). Los últimos tres algoritmos son variaciones propuestas a sus versiones más populares (CMA-ES, PSO y GA) donde se incluye el cálculo de la gradiente para guiar su proceso de optimización.

En nuestros resultados los diseños mejor optimizados presentan: (i) transmitancias mayores al 90 % y robustez ante errores de fabricación de dilatación y erosión, (ii) porcentaje de gris menor al 2 % y (iii) desempeño consistente y con cambios suaves en un rango de longitudes de onda (1500-1600 nm *bend* y 1250-1600 nm WDM) incluso si se eliminan sus regiones no conexas.

Estos resultados son prometedores para (i) la integración de dispositivos WDM en un área menor al reportado en el estado del arte ($<2.8\mu m \times 2.8\mu m$) y (ii) el diseño de *bends* con menores pérdidas que el diseño intuitivo-tradicional de $1\mu m$ de radio.

Palabras clave:

Algoritmos de Optimización, Diseño Inverso, Fotónica Integrada, Métodos Numéricos, Optimización Topológica Robusta.

ABSTRACT

Evaluation of First-Order Optimization Algorithms in Robust Topology Optimization of Nanophotonic Devices

Silicon photonics is an emerging area with constant growth in the last decades. Photonic devices show potential applications to improve computing systems, telecommunications and other areas. Nevertheless, it is still a challenge to integrate a great number of fundamental photonic devices in a chip with small area and low loss. In this work we designed two fundamental photonic devices: (i) bend and (ii) 2-channel wavelength-demultiplexer (WDM). The designs were done on a $2\mu m \times 2\mu m$ area following a robust topology optimization based strategy.

We did the evaluation and comparison of five first-order optimization algorithms: (i) *Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries* (L-BFGS-B), (ii) *Method of Moving asymptotes* (MMA), (iii) *Covariance Matrix Adapatation Evolution Strategy* (G-CMA-ES), (iv) *Gradient Particle Swarm Optimization* (G-PSO) and (v) *Gradient Genetic Algorithm* (G-GA). The last three algorithms are variations of their more standard versions (CMA-ES, PSO and GA) where the computation of the gradient is included to guide the optimization process.

In our results the best optimized designs show: (i) transmission greater than 90 % and robustness to over/under-etching, (ii) show a gray percentage of less than 2 % and (iii) their performance is broadband consistent with smooth changes (1500-1600 nm *bend* and 1250-1600 nm WDM) even after deleting non-convex regions.

These results are promising for (i) the integration of WDM devices in an lower area than state of the art ($<2.8\mu m \times 2.8\mu m$) and (ii) the design of bends with lower loss than intuitive-traditional designs of $1\mu m$ radius.

Keywords:

Optimization Algorithms; Inverse Design; Integrated Photonic; Numeric Methods; Robust Topology Optimization.

Capítulo 1

Motivación y Contexto

1.1 Introducción

La fotónica es la ciencia que estudia la generación, detección y manipulación de la luz. Los principales beneficios que ofrece son ([Shen et al., 2019](#)): (i) elevado ancho de banda en comunicaciones, (ii) bajo consumo energético, (iii) interconexiones ópticas independientes de la distancia. Actualmente, existen diversas aplicaciones que aprovechan estos beneficios, por ejemplo: (i) interconexiones ópticas en centrales de datos ([Shen et al., 2019](#)), (ii) redes neuronales ópticas ([Shen et al., 2017](#)) e (iii) internet de las cosas ([Li et al., 2021](#)).

A partir del proyecto Top500, un problema encontrado en los sistemas de computación de alto desempeño (HPC, por sus siglas en Inglés) es el ratio entre el ancho de banda entre nodos y el poder de procesamiento por nodo (*byte/FLOP*). Este valor ha decrecido en un factor de seis en los últimos años. Es decir, la capacidad para interconectar nodos está limitando el desempeño de sistemas HPC en programas que hacen uso intensivo de transferencias de datos. Ante este problema, los avances en la fotónica en silicio (SiP) integrada se presenta como una de las principales alternativas de solución porque permiten implementar interconexiones a distancias del orden de metros, manteniendo un elevado ancho de banda y bajo consumo energético ([Anderson et al., 2018](#), [Shen et al., 2019](#)).

El diseño e integración de dispositivos SiP, en términos de cantidad de dispositivos por chip, se encuentra aún en una etapa inicial ([Glick et al., 2018](#), [Lukas Chrostowski, 2010](#)). Sin embargo, ya existen procesos de fabricación estándar en *foundries* para fabricar

chips SiP a un precio accesible, compatibles con procesos CMOS a través de *process design kits* (PDKs) (Bogaerts y Chrostowski, 2018).

La alta densidad en la fabricación de dispositivos SiP integrados es un desafío porque requiere mantener bajas pérdidas de energía en el chip a nivel de sistema fotónico. Esto motiva la optimización de dispositivos fundamentales en sistemas fotónicos (Vuckovic, 2019), tales como *multi-channel wavelength-demultiplexer*, *grating couplers*, etc. Para esto existen dos estrategias principales: (i) diseño tradicional (Huang y Ouyang, 2018, Hughes y Fan, 2016, Song y Xie, 2008) y (ii) diseño inverso (Gregory *et al.*, 2015, Malheiros-Silveira y Delalibera, 2020, Su *et al.*, 2020).

La Figura 1.1 presenta una comparación de dos metodologías de diseño: tradicional e inverso. Se observa que en el diseño tradicional (izquierda) se define el dispositivo con geometrías simples que permiten obtener funciones analíticas de sus propiedades físicas (Hughes y Fan, 2016, Song y Xie, 2008). Esto se realiza para poder optimizar la función obtenida a partir de los parámetros que la definen. Dicha optimización se suele ejecutar haciendo un barrido de los parámetros, con algoritmos genéticos o usando *particle swarm optimization*. Para obtener buenos resultados con esta metodología es requerido basarse en la habilidad y confiar en la intuición por parte del diseñador (Su *et al.*, 2020).

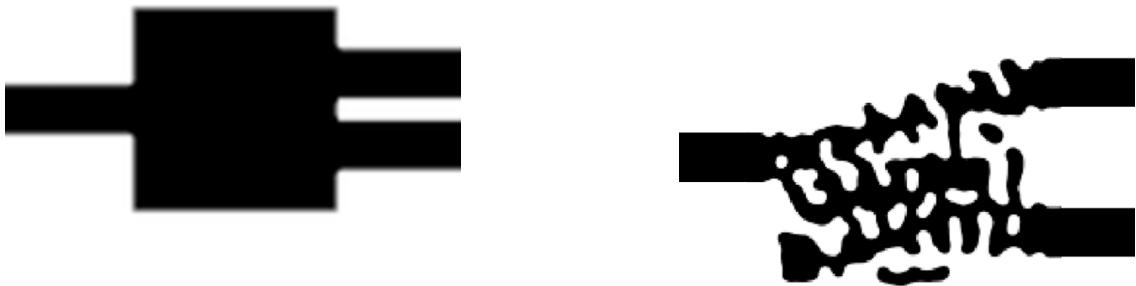
Existen tres grandes inconvenientes con el diseño tradicional. Primero, solamente se explora una pequeña fracción de todos los posibles diseños. Segundo, por lo general no es conocido el límite de rendimiento del dispositivo (Molesky *et al.*, 2018). Tercero, al trabajar en la escala de nanómetros, existen casos como el *bend-90°* y *wavelength-demultiplexer* que presentan un bajo rendimiento con diseños tradicionales (Su *et al.*, 2020).

Por otro lado, en el diseño inverso, mostrado en la Figura 1.1 (derecha), las geometrías resultantes no están limitadas a diseños intuitivos o regulares. Esta metodología consiste en primero definir las propiedades deseadas en nuestro dispositivo (e.g., transmittancia >90 %, nivel de gris <2 %, etc). Luego, usando simulaciones computacionales



(a) *Bend* con diseño tradicional.

(b) *Bend* obtenido con diseño inverso. Extraído de ([Su et al., 2020](#)).



(c) *Splitter* con diseño tradicional.

(d) WDM obtenido con diseño inverso. Extraído de ([Su et al., 2020](#)).

FIGURA 1.1: Diseños tradicionales y obtenidos a partir de diseño inverso de un *bend* y un WDM. En todas las figuras la luz ingresa por la guía de onda izquierda y se propaga hacia la derecha.

podemos determinar las propiedades físicas de una geometría arbitraria. El problema de diseño se reduce a parametrizar una región de diseño y explorar distintas geometrías con esta parametrización hasta encontrar un diseño que cumpla las propiedades deseadas. Esto se formula como un problema de optimización, para lo cual existe una variedad de algoritmos que se pueden aplicar (e.g., *genetic algorithms*, *particle swarm optimization*, etc) ([Molesky et al., 2018](#), [Su et al., 2020](#)). En [Campbell et al. \(2019\)](#), [Elsawy et al. \(2020\)](#),

Schneider *et al.* (2019) se puede encontrar una descripción detallada de los distintos algoritmos de optimización comúnmente empleados en el diseño de dispositivos fotónicos.

El diseño inverso ha logrado conseguir dispositivos con menores pérdidas que las obtenidas por el diseño tradicional por lo que ha ganado interés en el área de fotónica durante las últimas dos décadas (Campbell *et al.*, 2019, Molesky *et al.*, 2018, Su *et al.*, 2018). Identificamos que existen cuatro grandes desafíos con este planteamiento: (i) el espacio de búsqueda es exponencial (Vuckovic, 2019), (ii) las simulaciones computacionales son costosas en términos de tiempo y memoria (Kudyshev *et al.*, 2020), (iii) el espacio de búsqueda es no convexo (Su *et al.*, 2018) y (iv) no todos los diseños son fabricables (Su *et al.*, 2020).

El presente trabajo se centra en estudiar dos dispositivos SiP fundamentales: (i) *bend-90°* y (ii) *2-channel wavelength demultiplexer*. De aquí en adelante nos referiremos a estos simplemente como *bend* y WDM. Así, el objetivo de esta tesis es aplicar el conocimiento en computación para encontrar diseños de estos dispositivos con eficiencias mayores al 90 % y robustos ante errores de fabricación trabajando en la escala de nanómetros. Empleamos el diseño inverso para encontrar los diseños que cumplen con estas propiedades y realizamos una parametrización topológica para explorar los posibles diseños. El estudio se desarrolló con cinco algoritmos de optimización: (i) *Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries* (L-BFGS-B), (ii) *Method of Moving asymptotes* (MMA), (iii) *Covariance Matrix Adapatation Evolution Strategy* (G-CMA-ES), (iv) *Gradient Particle Swarm Optimization* (G-PSO) y (v) *Gradient Genetic Algorithm* (G-GA).

El presente documento está organizado de la siguiente manera:

El Capítulo 1 brinda una introducción al tema de investigación, describe el problema a detalle, justifica la relevancia de resolverlo, define los objetivos y señala los aportes del trabajo.

El Capítulo 2 desarrolla los conceptos necesarios para entender la propuesta presentada en esta tesis.

En el Capítulo 3 presentamos una revisión del estado del arte centrándose en algoritmos utilizados en el diseño inverso y dos estrategias populares de parametrización: (i) basada en conjuntos de nivel y (ii) basada en píxeles.

En el Capítulo 4 presentamos nuestra metodología propuesta para el diseño inverso de dispositivos *bend* y WDM usando optimización topológica robusta. Brindamos detalles sobre la configuración de las simulaciones y algoritmos (dimensiones, parámetros, etc). Además, se describe las etapas de optimización seguidas y el posprocesamiento realizado a los diseños mejor optimizados.

El Capítulo 5 muestra los resultados obtenidos por experimentación y la discusión sobre estos. Comparamos los resultados de los cinco algoritmos evaluados en base a tres criterios: (i) convergencia, (ii) eficiencia y (iii) porcentaje de región gris. Adicionalmente, se analiza y compara con el estado del arte nuestros diseños mejor optimizados del *bend* y WDM.

Por último, en el Capítulo 6 se detallan las conclusiones del presente trabajo de investigación.

1.2 Descripción del Problema

Una forma de definir parámetros a partir de los cuales se pueda representar un dispositivo (i.e. parametrizar) es seleccionando una región rectangular y dividiéndola en $n \times m$ píxeles como si fuera una imagen, ver Figura 1.2. Luego, cada píxel se rellena con dos posibles materiales: óxido de silicio (SiO_2) o silicio (Si). Finalmente, se usa métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Maxwell en este diseño y obtener así la

distribución del campo eléctrico, este permite entender el funcionamiento del dispositivo y sus propiedades ([Molesky et al., 2018](#), [Schneider et al., 2019](#)).

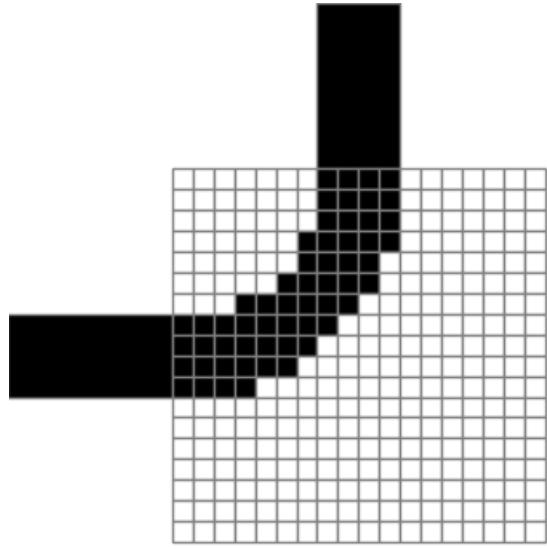


FIGURA 1.2: *Bend* con una región de diseño discretizada en 18×18 píxeles. Cada píxel negro representa la presencia de *Si* y cada píxel blanco de *SiO₂*.

Con esta parametrización, el diseño inverso comienza definiendo los requerimientos del dispositivo para luego tratar de buscar entre los $2^{n \times m}$ posibles diseños algún candidato que se adapte a lo que se busca ([Molesky et al., 2018](#), [Su et al., 2020](#)). Como prueba de concepto, trabajos como el de [Malheiros-Silveira y Delalibera \(2020\)](#) parametrizaron $2^{10 \times 10}$ posibles geometrías. Pero, se presentan algunas dificultades con esta estrategia:

1. No es viable evaluar todos los posibles diseños por haber un número excesivamente elevado de ellos ([Vuckovic, 2019](#)).
2. Las simulaciones computacionales son muy costosas en términos de consumo de memoria y tiempo de ejecución ([Kudyshev et al., 2020](#)).
3. El espacio de búsqueda es no convexo ([Su et al., 2018](#)).
4. No todos los diseños son fabricables por limitaciones físicas ([Su et al., 2020](#)).

5. Cada dispositivo es una clase distinta de problema, es decir, no necesariamente funcionará la misma estrategia para cada dispositivo ([Molesky *et al.*, 2018](#)).

Además, la fabricación viene con otros desafíos, principalmente:

1. Errores de precisión en los instrumentos ([Piggott *et al.*, 2017](#)).
2. Sensibilidad ante cambios de temperatura ([Vuckovic, 2019](#)).

Considerando las anteriores dificultades, el problema es encontrar una parametrización que genere un dispositivo que optimice alguna propiedad deseada, calculado mediante simulaciones computacionales, y que pueda asegurar mantener un óptimo funcionamiento al ser fabricado. Este problema se estudió para dos dispositivos nanofotónicos (i) *bend* y (ii) WDM.

1.3 Justificación

Las mejoras de estos dispositivos permiten diseñar *hardware* eficiente y robusto para interconexión óptica en sistemas de cómputo, lo cual permitirá mejorar la ejecución de programas en sistemas HPC. Esto potencialmente beneficia aplicaciones de alto impacto ([Shen *et al.*, 2019](#)) tales como inteligencia artificial, analítica de datos y computación científica.

Desde el punto de vista computacional, este problema es interesante porque las estrategias computacionales y algoritmos conocidos para resolverlo (e.g., algoritmos genéticos ([Kochenderfer y Wheeler, 2019](#)), estrategias evolutivas ([Hansen, 2016](#)), etc.) motivan su comparación para identificar sus limitaciones.

Además, debido al alto costo computacional de las simulaciones ([Schneider *et al.*, 2019](#)), nuestro trabajo requiere de computación de alto desempeño para el procesamiento.

1.4 Objetivos

Definimos dos objetivos principales:

1. Diseñar un *bend* y WDM con eficiencias mayores al 90 % y robustos ante errores de fabricación en un área de diseño de $2\mu m \times 2\mu m$.
 - a) Seleccionar una estrategia de parametrización que asegure facilidad de fabricación.
 - b) Definir una función objetivo que encapsule las propiedades buscadas en cada dispositivo.
 - c) Encontrar geometrías con valores óptimos de la función objetivo en simulaciones computacionales.
 - d) Encontrar geometrías robustas ante posibles errores de fabricación de dilatación o erosión.
2. Comparar el desempeño y la convergencia de cinco algoritmos de optimización populares usados para optimizar dispositivos nanofotónicos.

Capítulo 2

Marco Teórico

En el presente capítulo se introducen los conceptos fundamentales sobre dispositivos fotónicos y optimización. Primero, se describen los dos dispositivos a optimizar: (i) *bend* y (ii) WDM. Segundo, se explica la parametrización de estos dispositivos mediante un enfoque basado en píxeles. Tercero, se brindan detalles necesarios para simular nuestros diseños utilizando el software de modelamiento SPINS-B ([Su et al., 2020](#)). Cuarto, se detallan dos transformaciones comúnmente utilizadas en la optimización topológica robusta: (i) filtro por densidad y (ii) proyección. Finalmente, se describen ocho algoritmos de optimización utilizados en este trabajo.

2.1 Dispositivos Fotónicos

Al estudiar dispositivos fotónicos es de especial interés: i) la distribución del campo eléctrico, y ii) la transmitancia.

Distribución del campo eléctrico (\mathbf{E}). Este nos permite visualizar la distribución de la energía en un dispositivo calculando lo siguiente:

$$|\mathbf{E}|^2 = |\mathbf{E}_x|^2 + |\mathbf{E}_y|^2 + |\mathbf{E}_z|^2, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ representan las componentes del campo eléctrico en los ejes x, y, z , respectivamente ([Lukas Chrostowski, 2010](#)). Observar en una gráfica el valor de $|\mathbf{E}|^2$ nos ayuda a entender el funcionamiento de un dispositivo.

Transmitancia (T). Una manera de cuantificar el correcto funcionamiento de un diseño es mediante el cálculo de (T). Este valor se define como la relación entre la potencia del flujo que sale del dispositivo con la potencia del flujo que ingresa (Christiansen y Sigmund, 2021b).

En este trabajo estudiamos dos dispositivos fotónicos fundamentales: (i) *bend* y (ii) *wavelength demultiplexer*.

2.1.1 Bend

Un *bend* es un dispositivo fotónico que busca cambiar la dirección de propagación de un haz de ondas. Un *bend* convencional consiste en una guía de onda horizontal usada como entrada y una guía de onda vertical usada como salida, estas son conectadas por una guía de onda con la forma de un cuarto de circunferencia de radio r y con el mismo grosor de las guías de onda de entrada y salida. La Figura 2.1 presenta un *bend* convencional de radio $r = 1\mu m$. Se observa que la parte significativa de la energía se pierde en la región curva. Esto se debe a que el radio de curvatura es muy pequeño, con un valor más grande (e.g., $r = 10\mu m$) las pérdidas se vuelven casi nulas (Lukas Chrostowski, 2010).

Para evitar ambigüedades, dos puntos adicionales a remarcar son: (i) cuando nos referimos al radio estamos haciendo mención al radio medio de curvatura y (ii) todos los diseños mostrados en este trabajo tienen un profundidad de 220nm.

Seguidamente, sea λ la longitud de onda de la entrada y \mathbf{P} los parámetros que caracterizan al diseño, denotaremos como $T_\lambda(\mathbf{P})$ a la transmitancia asociada al dispositivo obtenido con la parametrización \mathbf{P} en la longitud de onda λ . Luego, definimos la función objetivo (f_{obj}) para un *bend*, también conocido en el área como figura de mérito (FOM, por sus siglas en Inglés), mediante la siguiente ecuación (Su *et al.*, 2020):

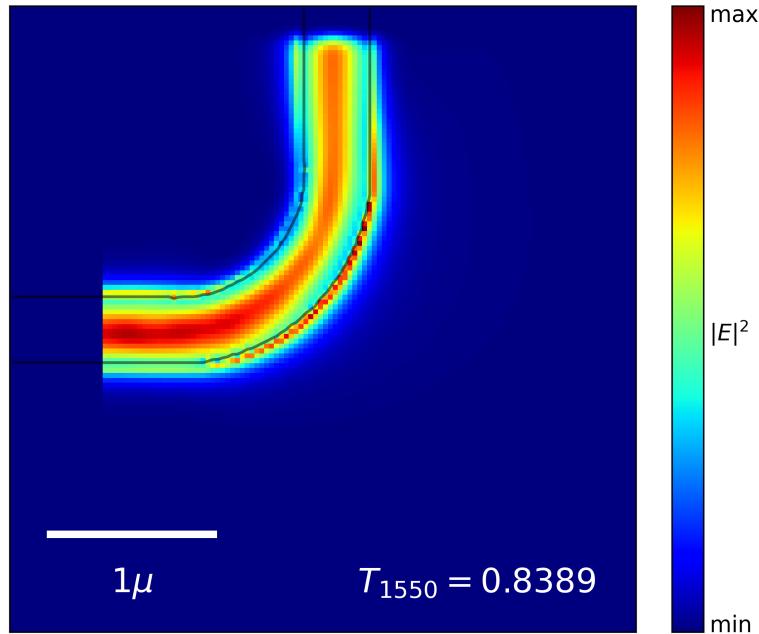


FIGURA 2.1: Representación de $|E|^2$ de un *bend* de $1\mu m$ de radio obtenido usando 3D FDFD bajo una resolución de $30nm$ en una longitud de onda $\lambda = 1550nm$.

$$f_{obj}(\mathbf{P}) = \max \{T_{1550}(\mathbf{P})\}. \quad (2.2)$$

En síntesis, la idea detrás de estas definiciones es describir un *bend* mediante una parametrización \mathbf{P} (Sección 2.2). Luego, usando algoritmos de optimización, buscar entre las distintas combinaciones de los parámetros aquella configuración que optimice la función f_{obj} (Sección 2.5). De este modo, estaremos encontrando un diseño con una elevada transmitancia, es decir con un buen desempeño.

2.1.2 *Wavelength Demultiplexer* (WDM)

Un WDM es un dispositivo fotónico que se encarga de guiar un haz de ondas de acuerdo a su longitud de onda. Por ejemplo, estos pueden trabajar con dos longitudes de

onda y guían las de una longitud por la guía de onda superior y las de otra longitud por la guía de onda inferior.

Análogo al caso del *bend*, utilizaremos la transmitancia para cuantificar el desempeño del dispositivo. Pero, en el presente trabajo usaremos un WDM con dos guías de salida, por ello, utilizaremos como notación $T_\lambda^{(1)}(\mathbf{P})$ para representar la transmitancia en la guía de salida superior cuando se recibe un haz de longitud de onda λ en un diseño descrito por los parámetros \mathbf{P} y $T_\lambda^{(2)}(\mathbf{P})$ para la guía de salida inferior.

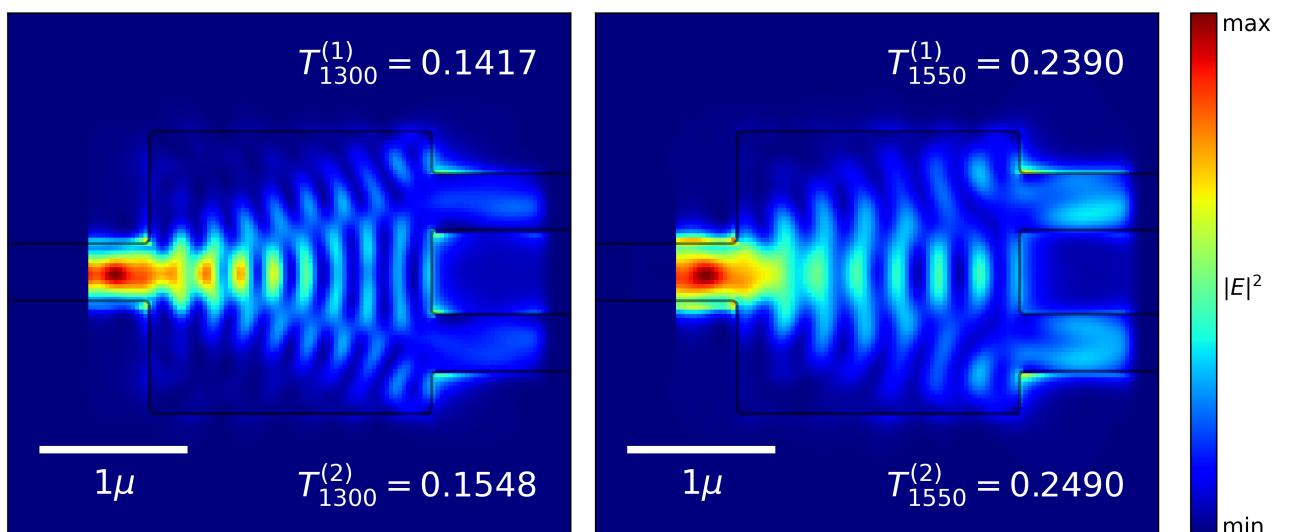


FIGURA 2.2: Representación de $|E|^2$ de un WDM obtenido usando 3D FDFD bajo una resolución de $30nm$.

En la Figura 2.2 se muestra un WDM donde las guías de onda son unidas por una región rectangular de $2.0\mu m \times 2.0\mu m$. En el lado izquierdo se muestra la representación de $|E|^2$ cuando se usa como entrada un haz de ondas de $1300nm$ de longitud, en el lado derecho la entrada es de $1550nm$. En ambos casos el diseño está funcionando más como un *splitter* que como un WDM. Un *splitter* es un dispositivo fotónico que divide la potencia del flujo de la entrada por las guías de salida en una determinada proporción. El diseño intuitivo para este dispositivo es el presentado en la imagen. Similar al caso del *bend*, con unas dimensiones un poco más grandes se puede conseguir pérdidas casi nulas

de energía ([Lukas Chrostowski, 2010](#)). Sin embargo, como se observa en los valores de la transmitancia, este diseño intuitivo no es apropiado para un WDM.

Basándonos en [Su *et al.* \(2020\)](#), definimos su FOM como

$$f_{obj}(\mathbf{P}) = \max \left\{ \frac{\left(T_{1300}^{(1)}(\mathbf{P})\right)^2 + \left(1 - T_{1300}^{(2)}(\mathbf{P})\right)^2 + \left(1 - T_{1550}^{(1)}(\mathbf{P})\right)^2 + \left(T_{1550}^{(2)}(\mathbf{P})\right)^2}{4} \right\}. \quad (2.3)$$

La Ecuación 2.3 busca maximizar la transmitancia por la guía de onda superior y minimizarla para la guía de onda inferior cuando se recibe una longitud de onda de $1300nm$ y lo contrario para una longitud de onda de $1550nm$. Cabe destacar que la división por cuatro se realiza para asegurar que f_{obj} solamente tenga valores en el intervalo $[0, 1]$, al igual que sucede con la función objetivo del *bend*.

La idea para optimizar un WDM es la misma descrita en la anterior sección. En el resto del capítulo se describe en más detalle los siguientes pasos necesarios para lograr esto.

2.2 Parametrización

Tanto para el *bend* como para el WDM se define una región de diseño mediante una parametrización (\mathbf{P}) que permita mapear un conjunto amplio de estos dispositivos. Una de las estrategias más populares para esta tarea es usar parametrización basada en píxeles. Esta estrategia consiste en definir \mathbf{P} como una matriz de n filas y m columnas con valores en el intervalo $[0, 1]$. Al proceso de optimizar un dispositivo con esta parametrización se le conoce como optimización topológica ([Molesky *et al.*, 2018](#)).

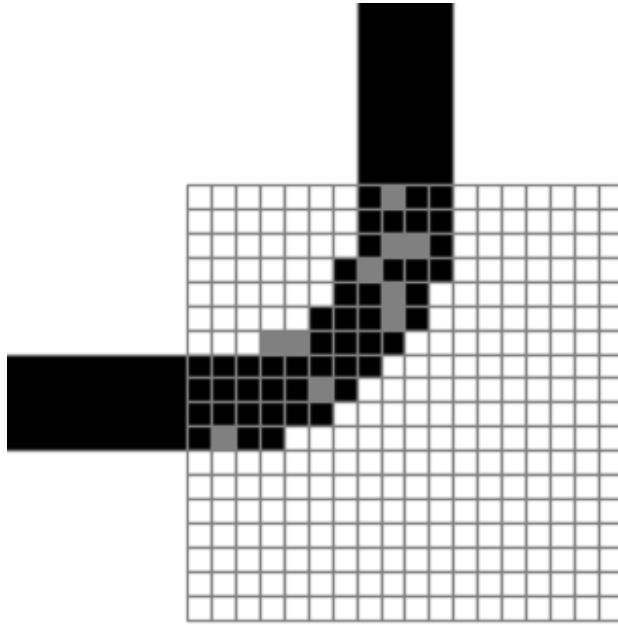


FIGURA 2.3: Parametrización basada en píxeles para un *bend* definiendo \mathbf{P} como una matriz de 18×18 .

A modo de ejemplo, en la Figura 2.3 se ha definido la matriz $\mathbf{P} : [1, n] \times [1, m] \rightarrow [0, 1]$ con $n = m = 18$ y se ha graficado sus valores usando escala gris (0 corresponde al color blanco, 1 al negro y los demás valores a diferentes intensidades del gris). De esta manera observamos como \mathbf{P} logra definir la geometría de un diseño. Adicionalmente, conforme se incrementa el valor de n y m se logra definir detalles con mayor precisión.

Sin embargo, lo anterior solo nos permite describir la geometría de los diseños, no sus propiedades. Además, no queda claro qué representan las regiones grises. Por ello, para describir las propiedades del diseño es necesario asociar a \mathbf{P} alguna propiedad física. Esto lo realizamos calculando la permitividad (ε) mediante la siguiente ecuación:

$$\varepsilon(x, y) = \varepsilon_{Si} * \mathbf{P}(x, y) + (1 - \mathbf{P}(x, y))\varepsilon_{SiO_2} \mid x \in [1, n] \wedge y \in [1, m], \quad (2.4)$$

donde $\varepsilon_{Si} = 3.48^2$ es la permitividad del silicio (Si) y $\varepsilon_{SiO_2} = 1.44^2$ es la permitividad

del óxido de silicio (SiO_2). De esta manera, la celda ubicada en la fila x , columna y de la geometría descrita por $\mathbf{P}(x, y)$ tiene una permitividad de valor $\varepsilon(x, y)$.

Con la Ecuación 2.4 estamos asociando a cada rectángulo de la geometría descrita por \mathbf{P} un valor de permitividad en el rango $[\varepsilon_{SiO2} = 1.44^2, 3.48^2 = \varepsilon_{Si}]$. De esta manera, $\mathbf{P}(x, y) = 1$ describe que el rectángulo ubicado en la posición (x, y) es de Si , un valor de $\mathbf{P}(x, y) = 0$ describe la presencia de SiO_2 y $0 < \mathbf{P}(x, y) < 1$ hace referencia a algún material cuya permitividad es $\varepsilon(x, y)$.

Nótese que un inconveniente de lo descrito es que \mathbf{P} puede mapear a materiales inexistentes (regiones grises), mayor detalle de esta dificultad se estudia en la Sección 2.4. Por otro lado, con la descripción de la permitividad podemos calcular los campos eléctricos con los cuales se puede obtener el valor de f_{obj} definido para el *bend* y WDM. Por esta razón se realizan simulaciones electromagnéticas y se resuelven las inversas de las ecuaciones de Maxwell, esto permite obtener los campos eléctricos ([Su et al., 2020](#)). Para este proceso se pueden utilizar distintos programas que implementan diversos métodos numéricos para realizar los cálculos (Sección 2.3).

2.3 Simulación

Una vez tenemos definido un dispositivo con regiones fijas (guías de onda) y una región de diseño descrita por la parametrización, es necesario incorporar tres componentes adicionales ([Oskooi et al., 2010](#), [Su et al., 2020](#)):

1. **Fuente:** Suele representarse como un rectángulo en un plano perpendicular al flujo que pasa por el lugar donde este se ubica. Simula la emisión de un haz de ondas por el diseño.
2. **Monitores:** Suelen representarse como un rectángulo similar a la fuente. Capturan información en su ubicación, en nuestro estudio valores del campo eléctrico.

3. **Perfectly Matched Layer (PML)**: Representan las condiciones de frontera en la simulación. Se utilizan para limitar el espacio donde se deberá realizar las simulaciones computacionales.

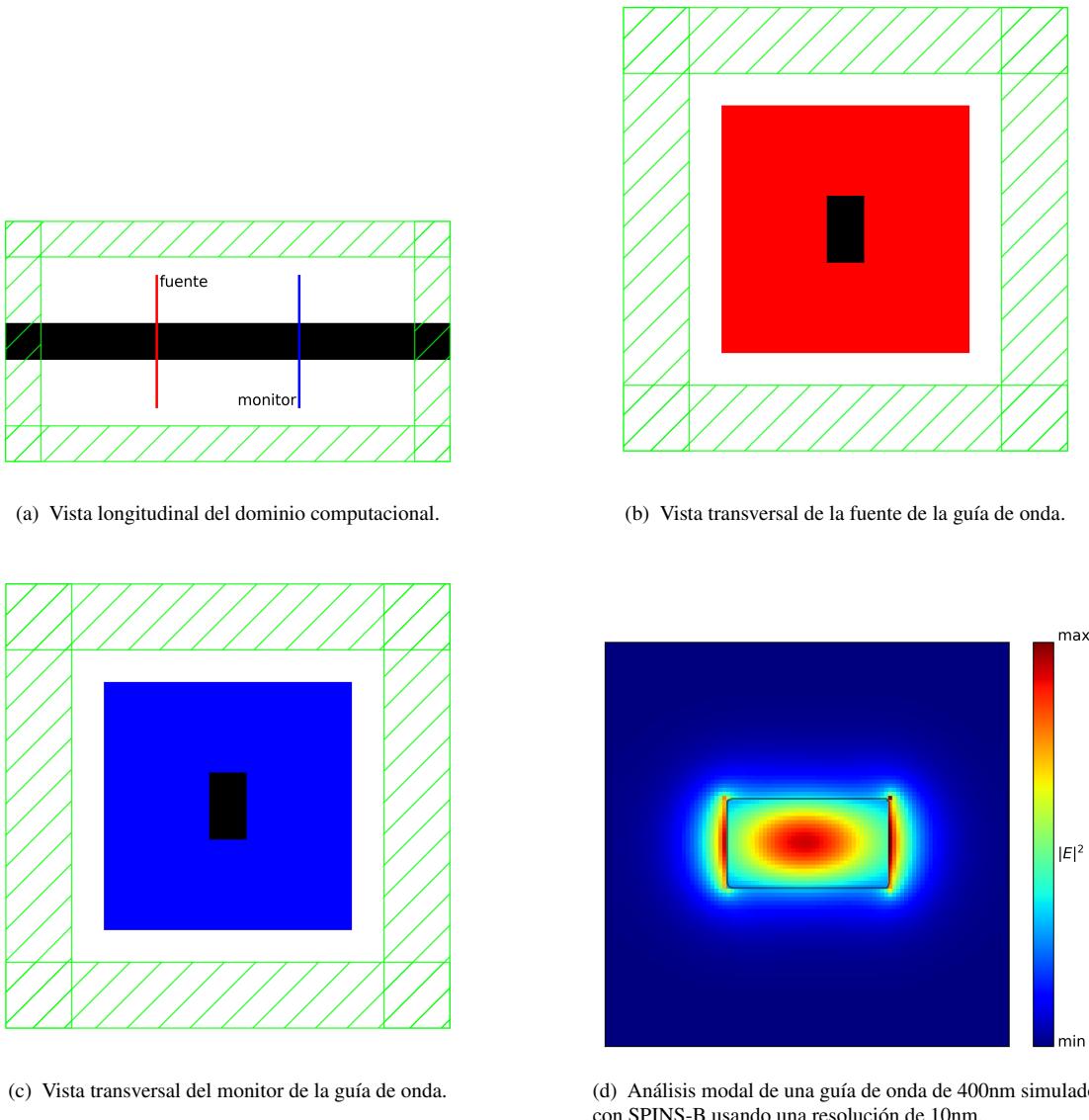


FIGURA 2.4: Configuración de simulación para una guía de onda en 3D.

La Figura 2.4 ilustra una guía de onda en 3D con las tres componentes anteriores. El rectángulo de color negro representa la guía de onda, la región roja la fuente, la región

azul el monitor y lo verde el PML. Guiéndonos de la Figura 2.4(a), al realizar una simulación con esta configuración el flujo iría de la región roja a la región azul. Este seguiría expandiéndose por la guía de onda hasta llegar a la región verde (PML). En palabras sencillas, podemos interpretar el PML como una caja que permite aislar nuestro sistema. Pero, es importante que el PML se superponga con el dispositivo para evitar errores numéricos. Por otro lado, la Figura 2.4(b) representa el mismo diseño pero desde una vista transversal (recordemos que son diseños en 3D) y lo mismo ocurre en la Figura 2.4(c), pero esta es una vista transversal desde otro ángulo. Con la ayuda de las vistas transversales se evi-dencia como la fuente y el monitor son representados por rectángulos, no por rectas. Por último, en la Figura 2.4(d) se muestra la distribución del campo eléctrico del modo TE calculado en la fuente y medido en el monitor. Notemos que para los distintos cálculos solo necesitaremos los valores asociados al modo TE.

Siguiendo lo descrito, podemos utilizar diversos programas para configurar y ejecutar simulaciones de un *bend* y WDM. Una alternativa es usar SPINS-B junto a Maxwell-B, programas implementados en Python como código abierto. Estos funcionan bajo una arquitectura cliente-servidor donde SPINS-B es el cliente y Maxwell-B es el servidor.

Por un lado, SPINS-B permite configurar diseños (fuente, monitores, PML, parametrización, región de diseño, etc.) y solicitar al servidor que obtenga sus propiedades. Un aspecto interesante de este simulador es que trabaja con bloques llamados nodos. Es-tos representan operaciones fundamentales como suma, resta, multiplicación, etc. Luego, el programa guarda nuestra función objetivo (f_{obj}) usando un grafo que tiene estos no-dos de vértices. Así, SPINS-B permite calcular de forma eficiente (usando un número de simulaciones independiente de las dimensiones de \mathbf{P}) el valor de $\nabla f_{obj}(\mathbf{P})$ mediante diferenciación automática ([Kochenderfer y Wheeler, 2019](#), [Su et al., 2020](#)).

Por otro lado, Maxwell-B es un *solver* que implementa un método numérico co-nocido como *finite-difference frequency domain* (FDFD) para resolver numéricamente las ecuaciones de Maxwell y obtener así determinadas propiedades de los diseños que recibe.

Es importante destacar que la implementación de esta librería es en GPUs de NVIDIA y permite aprovechar múltiples GPUs a la vez.

Un último detalle a señalar es que para las simulaciones debemos definir su resolución, esto lo representamos con el parámetro dx . Su valor se utiliza para discretizar nuestro espacio de simulación en una malla de cubos de dimensiones $dx \times dx \times dx$. En general, cuanto más pequeño es este valor los resultados son más precisos, pero la cantidad de memoria y el tiempo de simulación se incrementan considerablemente.

2.4 Transformaciones

En esta sección se discute dos transformaciones populares en optimización topológica para imponer restricciones de fabricación en nuestros diseños: (i) filtro por densidad y (ii) proyección. Esta sección está basada en [Lazarov et al. \(2016\)](#), para una descripción más detallada revisar este trabajo.

2.4.1 Filtro por Densidad

Antes de definir el filtro por densidad, necesitamos definir el concepto de bola cerrada. Para ello, tenemos que definir el concepto de función distancia en nuestra matriz de parametrización. Así, sea $x, x' \in [1, n] \wedge y, y' \in [1, m]$, definimos la distancia entre las posiciones (x, y) y (x', y') de la matriz \mathbf{P} como:

$$dis(x, y, x', y') = |x - x'| * psize_y + |y - y'| * psize_x, \quad (2.5)$$

donde $psize_x$ es el valor de la longitud horizontal que representa cada celda de \mathbf{P} y $psize_y$ es el recíproco para la longitud vertical. **Notemos que esta función distancia se comporta como la distancia de Manhattan, pero aplicando pesos.**

De esta manera, definimos la bola cerrada ($\overline{B}_r(x, y)$) de centro (x, y) y radio $0 < r$ mediante el siguiente conjunto:

$$\overline{B}_r(x, y) = \{(x', y') | 1 \leq x' \leq n \wedge 1 \leq m \leq m \wedge dis(x, y, x', y') \leq r\}. \quad (2.6)$$

Seguidamente, usando estos conceptos en la matriz \mathbf{P} se define el filtro por densidad ($\tilde{\mathbf{P}}$) mediante la ecuación:

$$\tilde{\mathbf{P}}(x, y) = \frac{\sum_{(x', y') \in \overline{B}_{r_f}(x, y)} w_{x,y}(x', y') A(x', y') \mathbf{P}(x', y')}{\sum_{(x', y') \in \overline{B}_{r_f}(x, y)} w_{x,y}(x', y') A(x', y')}, \quad (2.7)$$

$$w_{x,y}(x', y') = \max(0, r_f - dis(x, y, x', y')), \quad (2.8)$$

donde $A(x, y)$ es el área de la celda representada por $\mathbf{P}(x, y)$. Por otro lado, el concepto de mínimo radio de curvatura (r_f) hace referencia a que un diseño se puede dibujar con una circunferencia de radio r_f . El objetivo de la Ecuación 2.8 es tratar de imponer este concepto al diseño.

Finalmente, de la Ecuación 2.7 podemos obtener el valor de su derivada parcial respecto al diseño original calculando lo siguiente:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x, y)}{\partial \mathbf{P}(x^*, y^*)} = \frac{w_{x,y}(x^*, y^*) A(x^*, y^*)}{\sum_{(x', y') \in \overline{B}_{r_f}(x, y)} w_{x,y}(x', y') A(x', y')}. \quad (2.9)$$

2.4.2 Proyección

La proyección descrita en la sección anterior ayuda a obtener diseños que eviten regiones puntiagudas; sin embargo, esta transformación suele generar regiones grises. Por este motivo, es común acompañar el filtro por densidad con una proyección ($\tilde{\tilde{P}}$) descrita como:

$$\tilde{\tilde{P}}(x, y) = \frac{\tanh(\beta \times \eta) + \tanh(\beta \times (\tilde{P}(x, y) - \eta))}{\tanh(\beta \times \eta) + \tanh(\beta \times (1 - \eta))}, \quad (2.10)$$

donde η y β son números escalares. Para entender el impacto de estos parámetros en la Ecuación 2.10, veamos la Figura 2.5. En la figura graficamos esta ecuación con un valor fijo de $\eta = 0.5$ y distintos valores de β . Se observa que con $\beta = 1$ tenemos prácticamente la función identidad y conforme aumenta el valor de β la función se aproxima más a una función escalonada con quiebre en 0.5. En general el quiebre se realiza en el valor que se le da a η .

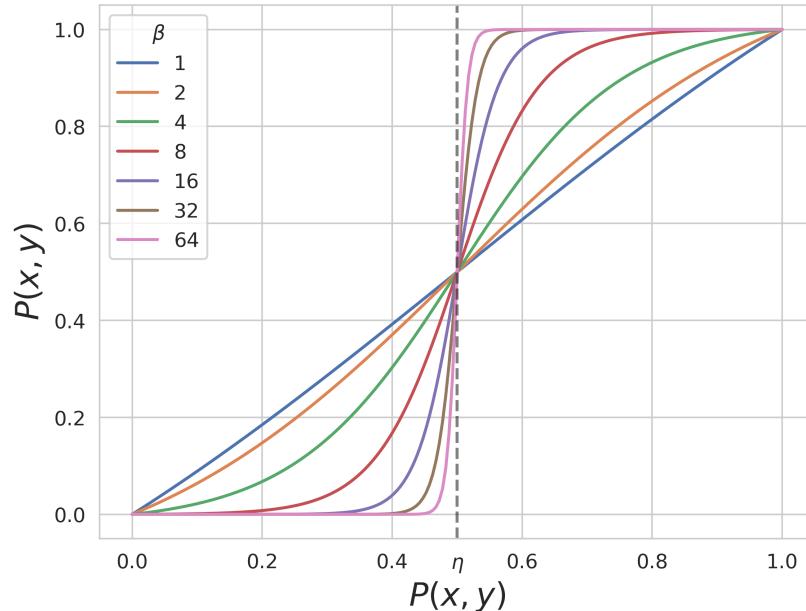


FIGURA 2.5: Transformación de proyección con $\eta = 0.5$ y distintos valores de β .

Además, de la Ecuación 2.10 podemos obtener el valor de su derivada parcial respecto al diseño $\tilde{\mathbf{P}}$ mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x, y)}{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x, y)} = \frac{(1 - \tanh^2(\beta \times (\tilde{\mathbf{P}}(x, y) - \eta)))\beta}{\tanh(\beta \times \eta) + \tanh(\beta \times (1 - \eta))}. \quad (2.11)$$

2.4.3 Aplicación de las Transformaciones

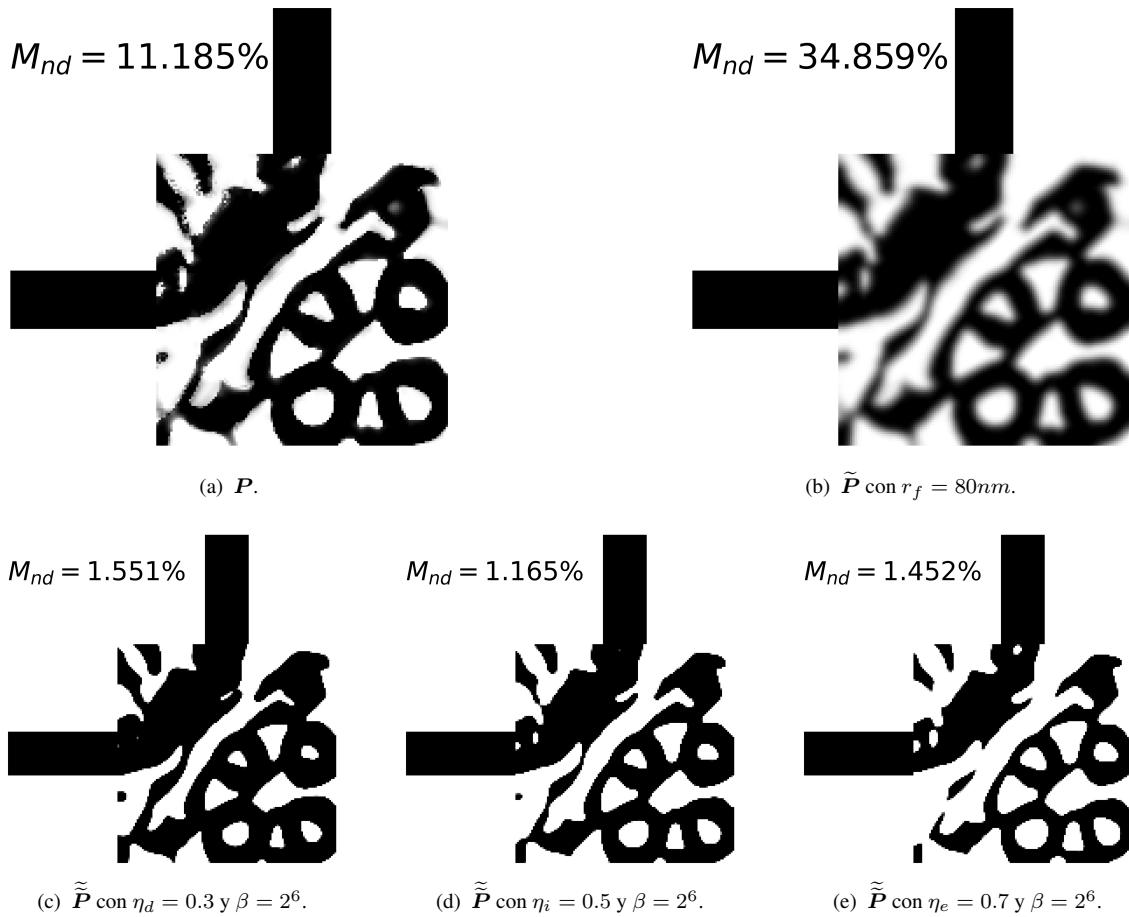


FIGURA 2.6: Aplicación del filtro de densidad y proyección a una parametrización \mathbf{P} .

Con el objetivo de visualizar estas transformaciones, observemos la Figura 2.6. En la Figura 2.6(a) se muestra el diseño que representa una parametrización \mathbf{P} . A su derecha

se encuentra la Figura 2.6(b), aquí aplicamos el filtro de densidad utilizando un radio de curvatura $r_f = 80nm$. Como podemos observar, este diseño posee regiones grises, mas ha logrado eliminar zonas puntiagudas. Seguidamente, en las Figuras 2.6(c), 2.6(d), 2.6(e) se muestra el diseño de la Figura 2.6(b) tras aplicar la proyección descrita con $\beta = 2^6$ y distintos valores de η . Al utilizar $\eta = \eta_i = 0.5$ (Figura 2.6(d)) estamos discretizando el diseño. Por otro lado, al usar $\eta = \eta_d = 0.3$ (Figura 2.6(c)) simulamos que el diseño se ha dilatado (i.e., la región de Si del diseño intenta expandirse). Finalmente, al usar $\eta = \eta_e = 0.7$ (Figura 2.6(e)) simulamos que el diseño ha erosionado (i.e., la región de SiO_2 del diseño intenta expandirse).

Así, observamos como la proyección presentada en esta sección no solo nos permite discretizar diseños, sino también simular una dilatación o erosión de estos. Particularmente, la optimización topológica se considera robusta cuando tiene en cuenta estas dos posibles modificaciones en el proceso de optimización. Por otro lado, del mismo modo que se aplicó en la Figura 2.6, para poder diferenciar el uso de η denotaremos como η_i al valor usado en un diseño nominal, η_e para los diseños erosionados y η_d para los diseños dilatados. Además, es importante señalar que se suele escoger los valores de η_e y η_d de las manera que $\eta_d = 1 - \eta_e$. Por último, notemos que estos parámetros deben seleccionarse con cuidado; caso contrario, el diseño podría representar una dilatación o erosión muy exageradas ([Lazarov et al., 2016](#)).

Un último punto a considerar es que nuestro proceso de optimización necesitará calcular $\nabla f_{obj}(\mathbf{P})$, pero al aplicar estas transformaciones terminaremos calculando $\nabla f_{obj}(\tilde{\tilde{\mathbf{P}}})$. Para solucionar este problema podemos implementar las transformaciones presentadas de manera que aprovechen la diferenciación automática (similar a lo realizado en la implementación de MEEP ([Oskooi et al., 2010](#))); sin embargo, en el presente trabajo optamos por un enfoque más sencillo que consiste en utilizar la Ecuación 2.9 y la Ecuación 2.11 para realizar el cálculo utilizando lo siguiente:

$$\frac{\partial f_{obj}}{\partial \mathbf{P}(x, y)} = \sum_{(x', y') \in \bar{B}_{r_f}(x, y)} \frac{\partial f_{obj}}{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x', y')} \frac{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x', y')}{\partial \mathbf{P}(x', y')} \frac{\partial \tilde{\mathbf{P}}(x', y')}{\partial \mathbf{P}(x, y)}. \quad (2.12)$$

Para finalizar esta sección, se presenta una función para medir la presencia de regiones grises. Esta función (M_{nd}) nos ayudará en la evaluación de los diseños optimizados obtenidos en esta tesis, si obtenemos un valor menor al 2 % podremos decir que nuestro diseño ha sido adecuadamente binarizado.

$$M_{nd}(\mathbf{P}) = \frac{\sum_{1 \leq x \leq n \wedge 1 \leq y \leq m} 4\mathbf{P}(x, y)(1 - \mathbf{P}(x, y))}{n \times m} \times 100\%. \quad (2.13)$$

Con todo lo descrito en este capítulo, ya tenemos las herramientas necesarias para plantear la optimización de nuestros dispositivos.

2.5 Algoritmos de Optimización

Notemos que nuestro problema se termina reduciendo a maximizar f_{obj} . Sin pérdida de generalidad, en la presente sección se describen algoritmos para minimizar la función $f = -f_{obj}$. Esto es posible ya que maximizar una función es equivalente a minimizar su negativo (Kochenderfer y Wheeler, 2019).

Para minimizar la función f , sea \mathcal{P} el conjunto de todas las matrices $\mathbf{P} : [1, n] \times [1, m] \rightarrow [0, 1]$, queremos encontrar algún mínimo global $\mathbf{P}^* \in \mathcal{P}$, donde este elemento se define como una matriz que satisface que $f(\mathbf{P}^*) \leq f(\mathbf{P})$, $\forall \mathbf{P} \in \mathcal{P}$. Dicho de otra manera, nuestro problema es encontrar \mathbf{P}^* ; sin embargo, esto es una tarea computacionalmente difícil de resolver (Angeris *et al.*, 2021).

Un problema más viable es encontrar $\sigma > 0 \wedge \mathbf{P}^+ \in \mathcal{P}$ tal que $f(\mathbf{P}^+) \leq f(\mathbf{P})$, $\forall \mathbf{P} \in \mathcal{P} : \|\mathbf{P} - \mathbf{P}^+\| < \sigma$. Es decir, es más práctico encontrar \mathbf{P}^+ (conocido

como mínimo local) el cual es un elemento que es un mínimo global si restringimos el espacio de búsqueda a cierta región alrededor de este elemento.

Debemos resaltar que ninguno de los algoritmos de esta sección puede asegurar encontrar el mínimo global; sin embargo, sus estrategias de búsqueda suelen permitir encontrar óptimos locales adecuados (Angeris *et al.*, 2021, Schneider *et al.*, 2019). Además, todos estos algoritmos se aseguran de mantener los valores de \mathbf{P} en el intervalo $[0, 1]$ aplicando $\mathbf{P}(x, y) \leftarrow \max(0, \min(1, \mathbf{P}(x, y)))$, mas este detalle se obvia en las explicaciones por simplicidad en la notación.

Para visualizar las características de algunos de los algoritmos de esta sección, a modo de ejemplo se utiliza la Ecuación 2.14 para mostrar que estrategias se aplican para minimizar esta función. En la Figura 2.7 podemos observar los conjuntos de nivel de la función $g(x, y)$. La estrella representa el óptimo global.

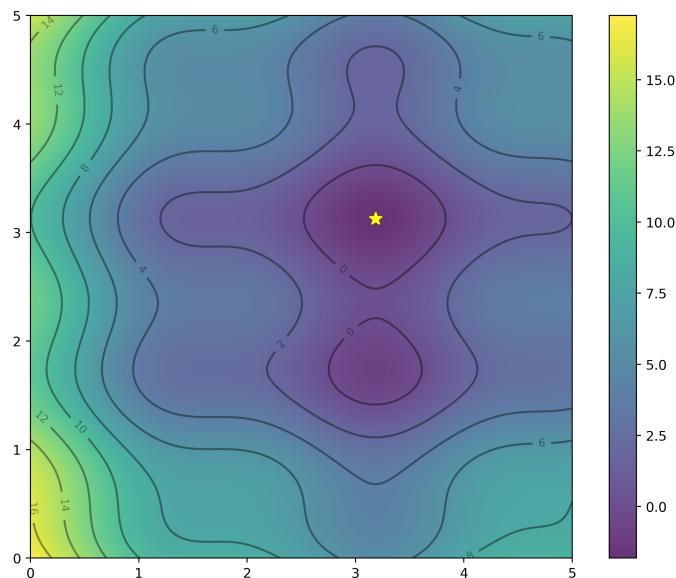


FIGURA 2.7: Contornos de nivel de la función $g(x, y)$.

$$g(x, y) = (x - 3.14)^2 + (y - 2.72)^2 + \sin(3x + 1.41) + \sin(4y - 1.73). \quad (2.14)$$

2.5.1 Genetic Algorithms (GA)

Como se describe en el Algoritmo 1 ([Kochenderfer y Wheeler, 2019](#)), la idea es comenzar generando una población (*population*) de tamaño *population_size*. Esta población es un conjunto de matrices de $n \times m$ generadas a partir de una parametrización inicial \mathbf{P} , línea 1. Los siguientes tres pasos se ejecutan por k iteraciones. Primero, se realiza un proceso de selección para obtener las mejores parametrizaciones (*parents*), línea 3. Segundo, los seleccionados se encargan de producir la nueva generación (*children*), línea 4. Tercero, la nueva generación muta obteniendo nuevas características, línea 5.

Algorithm 1: Genetic Algorithms (GA)

Data: \mathbf{P} , *population_size*, *GA_range*, *n_selected_parents*, *prob_mutation*
Result: $\min(\text{population})$

```

1 population = generate_population()
2 for  $t = 0$ ;  $t < k$ ;  $t++$  do
3   parents = select(population)
4   children = crossover(parents)
5   population = mutation(children)

```

Como se observa en el Algoritmo 1, tenemos las siguientes funciones:

- *generate_population()* : retorna *population_size* matrices \mathbf{P}' tal que $|\mathbf{P}'(x, y) - \mathbf{P}(x, y)| \in U(-GA_range, GA_range)$, $\forall x \in [1, n] \wedge y \in [1, m]$.
- *select(population)* : retorna *n_selected_parents* elementos de *population* de acuerdo a la probabilidad $prob_i$ dada por la ecuación

$$prob_i = \frac{\max(f) - f^{(i)}}{\sum_j \max(f) - f^{(j)}}, \quad (2.15)$$

donde $f^{(i)}$ representa el valor de f aplicado a la i -ésima parametrización de *population* y $\max(f)$ es el máximo valor de f al haber sido aplicado a todas las matrices de *population*.

- *crossover(parents)* : retorna *population_size* nuevas parametrizaciones. Cada nueva matriz \mathbf{S} es la combinación de dos parametrizaciones aleatorias \mathbf{P}_1 y \mathbf{P}_2 seleccionados de *parents*. En esta combinación, para cada $x \in [1, n] \wedge y \in [1, m]$ se define con igual probabilidad que $\mathbf{S}(x, y) = \mathbf{P}_1(x, y)$ o $\mathbf{S}(x, y) = \mathbf{P}_2(x, y)$.
- *mutation(children)* : retorna *children*, pero a cada elemento de todas estas matrices le agrega un valor en $U(-GA_range, GA_range)$ con probabilidad $0 < prob_mutation < 1$.

Para nuestro problema en específico como los valores de la matriz \mathbf{P} están en el rango $[0, 1]$, el parámetro *GA_range* también debe encontrarse en este rango. Una selección adecuada de estos parámetros requiere de experimentación. Los valores usados en este trabajo son detallados en el Capítulo 4.

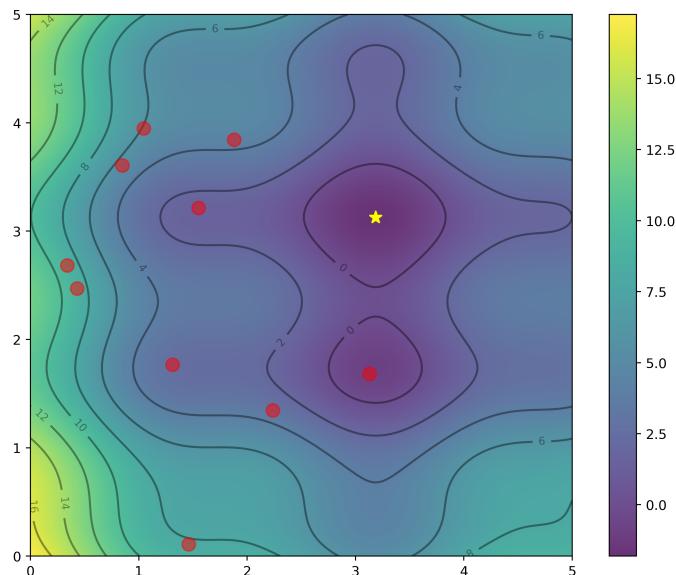


FIGURA 2.8: Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando GA.

En la Figura 2.8 se visualiza como GA optimiza $g(x, y)$ comenzando con distribuir puntos aleatorios en el espacio de búsqueda. Luego, de forma iterativa sigue los pasos descritos en el Algoritmo 1 para intentar encontrar el óptimo global (i.e., la estrella).

2.5.2 Particle Swarm Optimization (PSO)

Podemos pensar este algoritmo como un caso especial del Algoritmo 1 ([Kochenderfer y Wheeler, 2019](#)). La idea es visualizar el i -ésimo individuo como una partícula definida por su posición ($\mathbf{P}^{(i)}$), velocidad ($\mathbf{V}^{(i)}$) y la mejor posición encontrada por la partícula ($\mathbf{P}_b^{(i)}$). Para nuestro problema la matriz de parametrización representa la posición y la velocidad es una matriz que guía la exploración a otras parametrizaciones.

La idea principal del algoritmo es que cada partícula acumula velocidad en una dirección favorable dada por: (i) la mejor posición encontrada hasta el momento por esta partícula y (ii) la mejor posición encontrada por la población completa. Como consecuencia, los individuos se pueden mover independientemente de perturbaciones locales. Adicionalmente, agregando caminos aleatorios los individuos incorporan comportamientos impredecibles que puede permitirles encontrar potenciales mejores elementos. Esta idea se sintetiza en el Algoritmo 2.

Algorithm 2: Particle Swarm Optimization (PSO)

Data: \mathbf{P} , $population_size$, PSO_range , ω , c_1 , c_2

Result: \mathbf{P}_b

```

1 population = generate_population()
2 for  $t = 0$ ;  $t < k$ ;  $t++$  do
3    $\mathbf{P}_b = select(population)$ 
4   population = mutation(population, Pb)

```

Como se observa en el Algoritmo 2, tenemos las siguientes funciones:

- $generate_population()$: retorna $population_size$ matrices \mathbf{P}' tal que $|\mathbf{P}'(x, y) - \mathbf{P}(x, y)| \in U(-PSO_range, PSO_range)$, $\forall x \in [1, n] \wedge y \in [1, m]$. Además genera las matrices V con valores en $U(0, 1)$.
- $select(population)$: retorna el individuo con el menor valor de f encontrado hasta el momento.

- $\text{mutation}(\text{population}, \mathbf{P}_b)$: Aplica las siguientes transformaciones a population :

$$\mathbf{P}^{(i)} \leftarrow \mathbf{P}^{(i)} + \mathbf{V}^{(i)}, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{V}^{(i)} \leftarrow \omega \mathbf{V}^{(i)} + c_1 r_1 (\mathbf{P}_b^{(i)} - \mathbf{P}^{(i)}) + c_2 r_2 (\mathbf{P}_b - \mathbf{P}^{(i)}), \quad (2.17)$$

donde \mathbf{P}_b es la mejor posición encontrada globalmente, ω representa la tendencia de la partícula de conservar su velocidad actual, c_1 y c_2 cuantifica la atracción relativa con $\mathbf{P}_b^{(i)}$ y \mathbf{P}_b respectivamente, y $r_1, r_2 \in U(0, 1)$ representan el comportamiento impredecible.

Para nuestro problema en específico $PSO_range \in [0, 1]$ y su selección requiere de experimentación. Por otro lado, es válido experimentar usando $\omega = c_1 = c_2 = 0.5$ basándonos en el trabajo de [Schneider et al. \(2019\)](#).

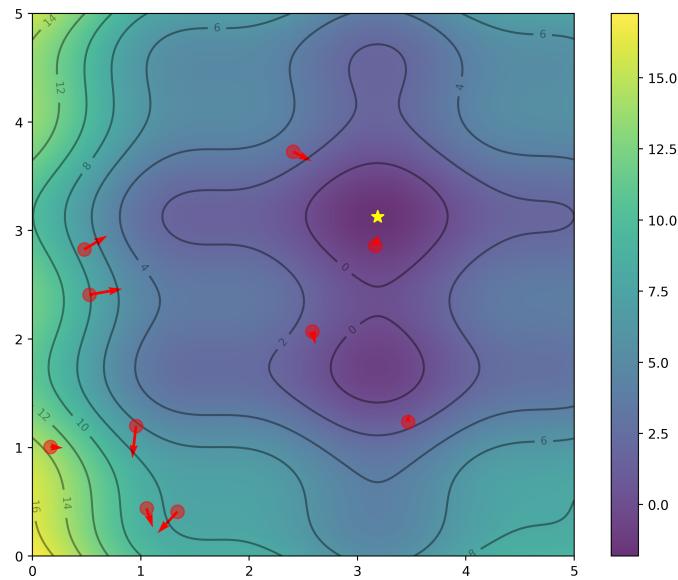


FIGURA 2.9: Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando PSO.

En la Figura 2.9 se visualiza como PSO optimiza $g(x, y)$ comenzando con distribuir puntos aleatorios en el espacio de búsqueda. Adicionalmente, se observa que cada

punto tiene asociado una flecha de tamaño y dirección variable. Esto es para representar que cada partícula intentará explorar, potencialmente, en distintas regiones del espacio de búsqueda y avanzando distintas distancias. En siguientes iteraciones las partículas se irán dirigiendo hacia la partícula que globalmente ha encontrado el mejor resultado. La velocidad de este proceso depende de la elección de los parámetros.

2.5.3 Covariance Matrix Adapatation Evolution Strategy (CMA-ES)

La idea general de esta estrategia evolutiva, mostrada en el Algoritmo 3, es mantener: (i) un vector μ p -dimensional, (ii) una matriz C y (iii) un número σ para ir generando n individuos p -dimensionales a partir una distribución $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2 C)$.

Tomar puntos de esta distribución limita el espacio de búsqueda a una hiperelipse. Así, el algoritmo evalúa puntos en esta región limitada. Luego, usando los valores obtenidos, se puede decidir entre: (i) mover la hiperelipse a otra región del espacio de búsqueda (ii) expandir o reducir la región cubierta por la distribución. El algoritmo de CMA-ES trabaja iterativamente sobre esta idea hasta que la hiperelipse termina casi degenerándose en un punto, potencialmente un óptimo.

Algorithm 3: CMA-ES

Data: P , *population_size*, σ
Result: μ

```

1  $\mu = flatten(P)$ 
2 for  $t = 0$ ;  $t < k$ ;  $t++$  do
3   sample() // Obtener population_size puntos de  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2 C)$ 
4   update() // Ecuación 2.18
5   control() // Ecuación 2.19
6   adapt() // Ecuación 2.21

```

Entrando en más detalles del Algoritmo 3, en la línea 1 simplemente se linealiza la matriz P en un vector μ de dimensión $p = n \times m$ (i.e., se unen sus vectores filas de manera consecutiva para formar un solo vector). Luego, dentro del bucle en la iteración

t, en la línea 3 se genera *population_size* puntos *p*-dimensionales \mathbf{x}_i de la distribución $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \mathbf{C})$, donde estos son ordenados ascendentemente de acuerdo al valor de *f*. En la Línea 4 actualizamos la media $\boldsymbol{\mu}$ usando el promedio ponderado dado por

$$\boldsymbol{\mu}^{(t+1)} \leftarrow \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{x}_i, \quad (2.18)$$

donde w_i son valores fijos y escogidos de tal manera que proporcionen mayor contribución a los puntos con menor valor al evaluarlos en *f*. Esto permite mover la media $\boldsymbol{\mu}$ en una dirección favorable.

Seguidamente, se necesita actualizar σ para expandir o reducir la hiperelipse en la siguiente iteración. Por este motivo, la línea 5 controla este valor mediante las ecuaciones

$$\sigma^{(t+1)} \leftarrow \sigma^{(t)} \exp \left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \underbrace{\left(\frac{\|\mathbf{p}_\sigma\|}{\mathbb{E}\|\mathcal{N}(0, \mathbf{I})\|} - 1 \right)}_{\text{evolution path comparison}} \right), \quad (2.19)$$

$$\mathbb{E}\|\mathcal{N}(0, \mathbf{I})\| = \sqrt{2} \left(\frac{\Gamma(\frac{p+1}{2})}{\Gamma(\frac{p}{2})} \right), \quad (2.20)$$

donde \mathbf{p}_σ es una variable que acumula los pasos llevados, $c_\sigma \in [0, 1]$ es una variable que determina el tiempo acumulado para p_σ y $d_\sigma \approx 1$ es un parámetro que determina el ratio de posibilidad de cambio de $\sigma^{(t+1)}$. La principal parte de la Ecuación 2.19 es el término *evolution path comparison*, aquí se compara el tamaño de p_σ con su tamaño esperado bajo selección aleatoria. De esta comparación podemos controlar si el valor de σ debe incrementarse, disminuirse o permanecer igual.

Finalmente, en la línea 6 cambiamos \mathbf{C} a una dirección favorable usando lo siguiente:

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}^{(t+1)} \leftarrow & \overbrace{\left(1 - c_1 c_c (1 - h_\sigma) (2 - c_c) - c_1 - c_\mu\right) \mathbf{C}^{(t)}}^{\text{cumulative update}} \\
& + \underbrace{c_1 \mathbf{p}_C \mathbf{p}_C^T}_{\text{rank-one update}} + c_\mu \underbrace{\sum_{i=1}^n w_i' \boldsymbol{\delta}^{(i)} (\boldsymbol{\delta}^{(i)})^T}_{\text{rank-}\mu\text{ update}}, \quad (2.21)
\end{aligned}$$

donde $c_\mu \leq 1$ es el radio de aprendizaje para el término *rank- μ update*, $c_1 \leq 1 - c_\mu$ es el radio de aprendizaje para el término *rank-one update*, $c_c \in [0, 1]$ es el radio de aprendizaje para el término *cumulative update*, h_σ es la evaluación bajo la función unitaria usado para actualizar apropiadamente el camino evolutivo, \mathbf{p}_C es un vector acumulativo usado para actualizar la matriz de covarianza, w_i' son los coeficientes de ponderación modificados y $\boldsymbol{\delta}^{(i)}$ son las desviaciones seleccionadas.

En la Ecuación 2.21, el primer término (*cumulative update*) mantiene información de la anterior matriz de covarianza. El segundo término (*rank-one update*) permite expandir la distribución en una dirección favorable. El tercer término (*rank- μ update*) incrementa la búsqueda en espacios donde es probable encontrar buenas soluciones. La combinación de estos tres términos actualiza \mathbf{C} de tal manera que mueva la hiperelipse en una dirección favorable. Para una descripción más detallada del algoritmo, revisar los trabajos de [Hansen \(2016\)](#) y [Kochenderfer y Wheeler \(2019\)](#).

En la Figura 2.10 se visualiza como CMA-ES optimiza $g(x, y)$ generando puntos dentro de la hyperelipse para explorar el espacio de búsqueda. En siguientes iteraciones, de acuerdo a la exploración realizada la hyperelipse puede desplazarse y contraerse o expandirse. Esto proceso es repetido iterativamente hasta que la hyperelipse termina reduciéndose a prácticamente un punto.

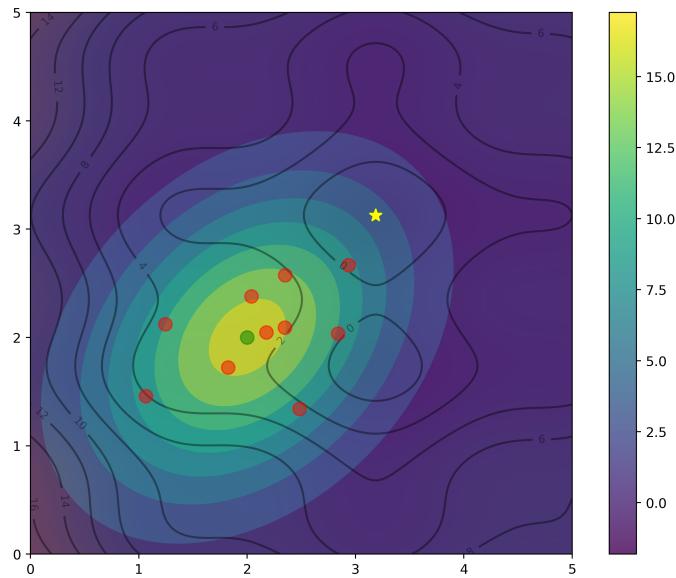


FIGURA 2.10: Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando CMA-ES.

2.5.4 Gradient Descent (GD)

Este algoritmo comienza desde un punto inicial, en nuestro caso la matriz \mathbf{P} . Luego, usa la derivada en ese punto para guiar su búsqueda iterativamente, esto lo realiza mediante la siguiente ecuación:

$$\mathbf{P}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{P}^{(t)} - \gamma \nabla \mathbf{P}^{(t)}, \quad (2.22)$$

donde t representa la iteración actual y γ (conocido como el ratio de aprendizaje) determina la magnitud de como actualizar $\mathbf{P}^{(t)}$. Particularmente, un enfoque razonable para buscar convergencia a un mínimo local es actualizar γ en cada iteración mediante la ecuación

$$\gamma^{(t+1)} = \frac{|(\mathbf{P}^{(t)} - \mathbf{P}^{(t-1)})^T (\nabla f(\mathbf{P}^{(t)}) - \nabla f(\mathbf{P}^{(t-1)}))|}{\|\nabla f(\mathbf{P}^{(t)}) - \nabla f(\mathbf{P}^{(t-1)})\|^2}. \quad (2.23)$$

Un detalle importante a señalar es que por simplicidad en la notación, la Ecación 2.23 se describió de esta manera; sin embargo, en realidad debemos trabajar con la matriz \mathbf{P} después de ser linealizada para que las operaciones de esta ecuación estén bien definidas. Mayores detalles del algoritmo se pueden encontrar en [Demidova y Gorchakov \(2020\)](#).

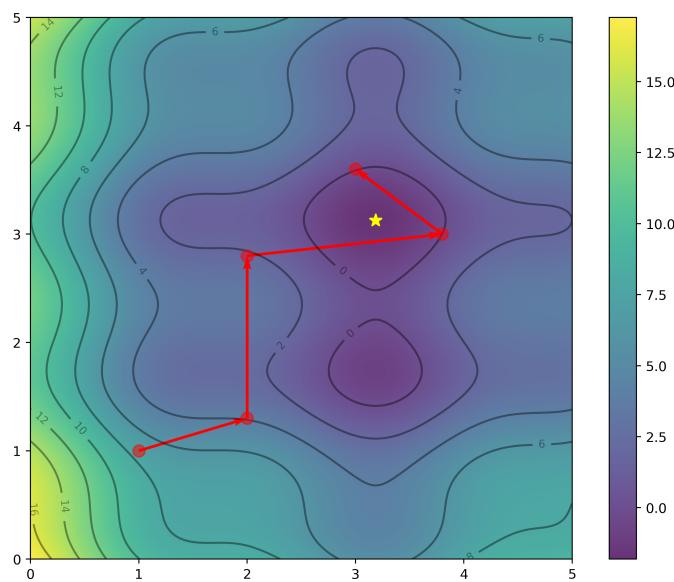


FIGURA 2.11: Visualización del proceso de optimización de $g(x, y)$ usando GD.

En la Figura 2.11 se visualiza como GD optimiza $g(x, y)$. El algoritmo comienza desde un punto y y se mueve en dirección de la gradiente. Como se observa, este algoritmo puede moverse eficientemente hacia posiciones más óptimas; sin embargo, el algoritmo podría quedarse estancado en óptimos locales.

2.5.5 *Method of Moving asymptotes* (MMA)

Method of moving asymptotes (MMA) es un algoritmo de optimización local basado en la gradiente, es decir, de primer orden. En esta sección usaremos $x^{(i)}$ para representar la linealización de la i -ésima parametrización calculada (\mathbf{P}_i). Además, en este

algoritmo se asume que tenemos $j = 1, 2, \dots, m^+$ inecuaciones ($f_j(\mathbf{x}) < \bar{f}_j$) que deben cumplirse y la función a optimizar se denota como f_0 .

Como se detalla en [Svanberg \(1987\)](#), el algoritmo se resume en estos 5 pasos:

1. El escoge un punto inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ y se inicializa $i \leftarrow 0$. La elección de $\mathbf{x}^{(0)}$ puede ser un punto aleatorio.
2. Se verifica que $\mathbf{x}^{(0)}$ no satisfaga criterios de convergencia, sino el programa termina.
3. Se calcula $f_j(\mathbf{x}^{(i)})$ y $\nabla f_j(\mathbf{x}^{(i)})$ para $j = 0, 1, \dots, m^+$.
4. Se utiliza multiplicadores de Lagrange a los resultados del paso anterior para plantear un nuevo subproblema.
5. Se resuelve el subproblema obteniendo como solución $\mathbf{x}^{(i)}$. Se actualiza $i \leftarrow i + 1$ y se regresa al paso 2.

En la iteración i , para cada f_j se escogen los parámetros $L_t^{(i)}$ y $U_t^{(i)}$ tal que $L_t^{(i)} < x_t^{(i)} < U_t^{(i)}$ para $t = 1, 2, \dots, n = \dim(\mathbf{x}^{(i)})$. Luego, para $j = 0, 1, \dots, m^+$, se define:

$$f_j^{(i)}(\mathbf{x}) = r_j^{(k)} + \sum_{t=1}^n \left(\frac{p_{jt}^{(i)}}{U_t^{(i)} - x_t} + \frac{q_{jt}^{(i)}}{x_t - L_t^{(i)}} \right), \quad (2.24)$$

donde

$$p_{jt}^{(i)} = \begin{cases} (U_t^{(i)} - x_t^{(i)})^2 \partial f_j / \partial x_t, & \text{si } 0 < \partial f_j / \partial x_t \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (2.25)$$

$$q_{jt}^{(i)} = \begin{cases} -(x_t^{(u)} - L_t^{(i)})^2 \partial f_j / \partial x_t, & \text{si } \partial f_j / \partial x_t < 0 \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (2.26)$$

$$r_j^{(i)} = f_j(\mathbf{x}^{(i)}) + \sum_{t=1}^n \left(\frac{p_{jt}^{(i)}}{U_t^{(i)} - x_t^{(i)}} + \frac{q_{jt}^{(i)}}{x_t^{(i)} - L_t^{(i)}} \right), \quad (2.27)$$

donde $\partial f_j / \partial x_t$ son evaluados en $\mathbf{x}^{(i)}$. Es importante señalar que entre más cercanos a $x_t^{(i)}$ se encuentren $L_t^{(i)}$ y $U_t^{(i)}$, entonces la segunda derivada toma un mayor valor, lo cual implica que la aproximación se vuelve más cercana al valor real. Los valores de estos parámetros van cambiando en cada iteración, esto es llamado mover asíntotas, de ahí el nombre del algoritmo. Los detalles de como escoger estos parámetros son desarrollados en detalle en [Svanberg \(1987\)](#).

En realidad en el presente trabajo usaremos una versión mejorada del MMA conocida como *Conservative Convex Separable Approximation* (CCSA) debido a su popularidad en optimización topológica, pero nos seguiremos refiriendo al algoritmo como MMA por convención. Esta variante tiene la particularidad de lograr converger a un mínimo local independientemente del punto inicial. Los detalles se pueden revisar en [Svanberg \(2002\)](#).

2.5.6 *Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries (L-BFGS-B)*

Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with boundaries (L-BFGS-B) es un algoritmo de optimización de primer orden que suele utilizarse cuando no es práctico el cálculo de la matriz Hesiana.

Sea \mathbf{x}_i la parametrización \mathbf{P} evaluada en la iteración i luego de que esta matriz se linealice (i.e. se unieran sus vectores filas de manera consecutiva para formar un solo vector). Se define el siguiente modelo cuadrático:

$$m_i(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_i) + (\nabla f(\mathbf{x}_i))^T(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x})^T \mathbf{B}_i(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}), \quad (2.28)$$

donde \mathbf{B}_i es una aproximación de la matriz Hesiana que usa una cantidad de memoria de orden lineal.

El algoritmo L-BFGS-B aproximadamente minimiza $m_i(\mathbf{x})$ de forma iterativa. La idea general del algoritmo se resume en los siguientes ocho pasos:

1. Dado un punto inicial \mathbf{x}_0 , se inicializa $i \leftarrow 0$ y $\mathbf{B}_0 \leftarrow \mathbf{I}$. Adicionalmente, se calcula $f(\mathbf{x}_0)$ y $\nabla f(\mathbf{x}_0)$. La elección de x_0 puede ser un punto aleatorio.
2. Si $\|\mathbf{x}_i - \nabla f(\mathbf{x}_i)\|_\infty < pgtol$, entonces el programa termina. El valor $pgtol$ es un parámetro del algoritmo, se recomienda que sea mayor a la raíz cuadrada de la precisión del computador donde se ejecute.
3. Se calcula el punto generalizado de Cauchy, este punto se define como el primer mínimo local del camino definido por $\mathbf{x}_i - t\nabla f(\mathbf{x}_i)$, $t \in \mathbb{R}$. Los detalles de este cálculo se pueden encontrar en [Byrd et al. \(1995\)](#).
4. Utilizando el resultado del anterior paso, se fijan ciertas dimensiones y se minimiza sobre las restantes. Producto de esta minimización se obtiene una solución aproximada $\bar{\mathbf{x}}_{i+1}$. Así se define la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_i = \bar{\mathbf{x}}_{i+1} - \mathbf{x}_i$. Los detalles de los métodos de minimización sobre este subespacio se explican en [Byrd et al. \(1995\)](#).
5. Se realiza una búsqueda en el camino definido por $\mathbf{x}_i - t\mathbf{d}_i$, $t \in \mathbb{R}$. La solución encontrada (λ_i) se utiliza para definir $\mathbf{x}_{i+1} \leftarrow \mathbf{x}_i + \lambda_i \mathbf{d}_i$. Es importante señalar que esta solución satisface

$$f(\mathbf{x}_{i+1}) \leq f(\mathbf{x}_i) + \alpha \lambda_i \nabla(f(\mathbf{x}_i))^T \mathbf{d}_i, \quad (2.29)$$

e intenta cumplir con la inecuación

$$|(\nabla f(\mathbf{x}_{i+1}))^T \mathbf{d}_i| < \beta |(\nabla f(\mathbf{x}_i))^T \mathbf{d}_i|, \quad (2.30)$$

donde α y β son parámetros del algoritmo. En el trabajo de [Byrd *et al.* \(1995\)](#) se utilizó $\alpha = 10^{-5}$ y $\beta = 0.9$ y se muestran los detalles de la búsqueda.

6. Se calcula $\nabla f(\mathbf{x}_{i+1})$.
7. Se calcula \mathbf{B}_{i+1} . Los detalles de este paso se pueden encontrar en [Byrd *et al.* \(1995\)](#).
8. Se actualiza $i \leftarrow i + 1$ y se regresa al paso 2.

Adicionalmente, para el cálculo de la aproximación \mathbf{B} el algoritmo recibe un parámetro \bar{m} para guardar información relacionada con la gradiente de solo las últimas \bar{m} iteraciones. Para este parámetro valores pequeños ($3 \leq \bar{m} \leq 20$) son recomendados. Así, el algoritmo es adecuado para problemas con dimensiones elevadas debido a que ha mostrado buen desempeño en distintos problemas utilizando bajos recursos de memoria ($O(\bar{m}n)$) y de tiempo de ejecución por iteración ($O(\bar{m}^2n)$) ([Zhu *et al.*, 1997](#)).

Para una descripción más detallada del algoritmo, revisar los trabajos de [Byrd *et al.* \(1995\)](#) y [Zhu *et al.* \(1997\)](#).

2.5.7 G-CMA-ES

Esta es una variación de la Subsección 2.5.3. El algoritmo es el mismo que el CMA-ES, pero antes de ejecutar la línea 3 del Algoritmo 3, se calcula la gradiente de la actual media (i.e., $\nabla f(\mu)$). Con este valor se busca guiar mejor las operaciones de la hyperelipse. Los detalles a profundidad se pueden encontrar en [Akimoto y Hansen \(2021\)](#).

2.5.8 G-PSO

Esta es una variación propuesta en la presente tesis. Basándonos en el trabajo de [Demidova y Gorchakov \(2020\)](#), después de cada iteración del Algoritmo 2 (i.e., línea 4), añadimos los siguientes pasos:

1. Se ejecuta el algoritmo GD (Subsección 2.5.4) tomando como punto inicial P_b .

Este algoritmo se ejecuta por k_{gd} iteraciones con un parámetro inicial de γ . El algoritmo se guarda como P_b^+ .

2. Se actualiza la mejor posición encontrada globalmente entre P_b^+ y P_b .

La idea detrás de esta variante es asegurar que la mejor solución global alcance un mejor resultado y que guie a las demás partículas. Así, manteniendo el enfoque de un algoritmo de optimización global, se espera que este algoritmo no se estanke fácilmente en óptimos locales.

2.5.9 G-GA

Similar al G-PSO, después de cada iteración del Algoritmo 1 (i.e. 5), se escoge dos elementos aleatorios para actualizarlos aplicándoles GD por k_{gd} iteraciones con un parámetro inicial de γ . Se escoge dos elementos y no solo uno para asegurar que los resultados de aplicar GD se compartan con los demás individuos en pocas iteraciones, similar a lo que sucede en Subsección 2.5.8.

En el presente capítulo se ha descrito la teoría necesaria para optimizar el diseño de un *bend* y WDM. Esto ha implicado la explicación de la parametrización basada en píxeles, el uso de SPINS-B y transformaciones utilizadas en la optimización topológica robusta. Además, se ha desarrollado la explicación de tres algoritmos que no necesitan calcular la gradiente: (i) GA, (ii) PSO y (iii) CMA-ES. Asimismo, se describió seis algoritmos de primer orden (que usan la gradiente): (i) GD, (ii) MMA y (iii) L-BFGS-B, (iv) G-CMA-ES, (v) G-PSO y (vi) G-GA. Siendo los últimos dos algoritmos contribuciones del presente trabajo de investigación. Los conceptos presentados en este capítulo serán de utilidad para entender la metodología descrita en el Capítulo 4.

Capítulo 3

Trabajos Relacionados

En el presente capítulo comenzaremos discutiendo sobre un trabajo que optimiza un *splitter*. Seguidamente, identificaremos dos inconvenientes con este trabajo e iremos mostrando como otras investigaciones han afrontado estos desafíos.

En [Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) se optimizó un *splitter* con guías de onda fijas de $0.5\mu m$, donde las guías de onda de salida son separadas por $0.2\mu m$ y todas estas son unidas con una región rectangular de diseño de $2\mu m \times 1.5\mu m$. Con esta geometría se simulan distintos diseños dividiendo la región rectangular en ($z = 13$) segmentos uniformemente separados. Cada segmento puede variar su altura dentro del rectángulo, estos se centran de forma vertical y se van uniendo sus extremos. La representación de esta idea la podemos observar en la Figura 3.1 con $z = 5$ segmentos.

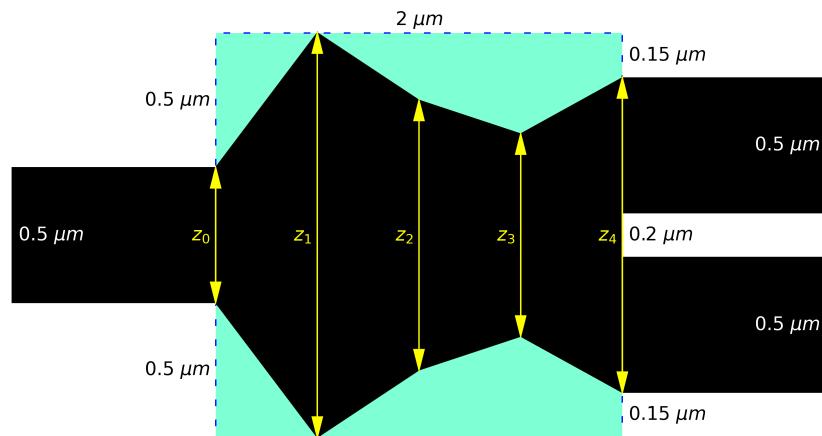


FIGURA 3.1: Diseño de un *splitter* basado en ([Prosopio-Galarza et al., 2019](#)) utilizando $z = 5$ segmentos.

Como función objetivo se establece maximizar la transmitancia en la guía de onda superior trabajando con una longitud de onda de 1550nm . Los mejores resultados son obtenidos al usar PSO como algoritmo de optimización.

Es destacable que al usar esta parametrización se puede limitar las alturas de los segmentos para asegurar obtener ángulos agudos, los cuales son los más adecuados como regla práctica de diseño ([Lukas Chrostowski, 2010](#)). Sin embargo, hay dos inconvenientes con este trabajo:

- **Inconveniente 1:** La parametrización utilizada descarta la posibilidad de diseños menos intuitivos (por ejemplo, con agujeros) que podrían ocupar menor área y mantener una buena transmitancia.
- **Inconveniente 2:** Las optimizaciones solo se repitieron una vez con apenas 30 iteraciones y una población de 14 individuos.

A continuación, vamos a desarrollar en más detalle como otros trabajos han buscado solucionar estos dos inconvenientes.

3.1 Inconveniente 1: La Parametrización

Como se detalla en [Molesky et al. \(2018\)](#), para permitir diseños con mayor grado de libertad se suele trabajar con dos enfoques: (i) parametrización basada en conjuntos de nivel y (ii) parametrización basada en píxeles.

La parametrización basada en conjuntos de nivel permite describir geometrías poco intuitivas, con elevada transmitancia y sin necesidad de regiones grises. [Piggott et al. \(2015\)](#) utiliza esta parametrización para optimizar un WDM con guías de onda de $0.5\mu\text{m}$ y una región de diseño de $2.8\mu\text{m} \times 2.8\mu\text{m}$ trabajando a 1300nm y 1550nm . Comienza con un diseño inicial aleatorio, luego realiza la optimización en tres etapas consecutivas:

(i) optimiza sin restricciones con una parametrización basada en píxeles (pudiendo producir regiones grises), (ii) introduce una parametrización basada en conjuntos de nivel, (iii) busca optimizar en distintas longitudes de onda con el fin de buscar un diseño robusto. Este enfoque ha dado buenos resultados incluso al fabricarse. Además, en [Piggott et al. \(2017\)](#) se desarrolla un algoritmo para tratar de imponer un mínimo radio de curvatura a los diseños y asegurar mayor coherencia entre las simulaciones y los diseños fabricados.

De manera similar, [Su et al. \(2020\)](#) obtiene transmitancias alrededor de 90 % al optimizar un WDM trabajando a 1400nm y 1550nm . Sin embargo, su proceso de optimización consiste en solo dos etapas: (i) optimización continua y (ii) optimización discreta. Lo interesante de su propuesta es que en la optimización continua trabaja con subetapas donde aplica una transformación sigmoidal (similar a la Ecuación 2.10) para ir discretizando los diseños. Luego, en la optimización discreta aplica una parametrización basada en conjuntos de nivel para eliminar regiones grises e imponer un mínimo radio de curvatura de 100nm .

Por otro lado, la parametrización basada en píxeles también ha obtenido buenos resultados en la optimización topológica. Como se describe en [Lazarov et al. \(2016\)](#), generalmente se utiliza las transformaciones descritas en la Sección 2.4: filtro por densidad y proyección. Particularmente, utilizando estas mismas transformaciones se logra simular dos posibles errores de fabricación: dilatación y erosión. A modo de tutorial, [Christiansen y Sigmund \(2021b\)](#) optimiza un WDM con guías de onda de $0.299\mu\text{m}$ y una región de diseño de $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$ trabajando a 1300nm y 1550nm . Utilizando parametrización basada en píxeles, realiza un proceso similar a la optimización continua de [Su et al. \(2020\)](#); pero, en vez de aplicar una función sigmoidal para discretizar el diseño, aplica el filtro por densidad para tratar de imponer un mínimo radio de curvatura y después la proyección para discretizar los diseños. Asimismo, define su función objetivo de tal modo que asegura diseños robustos ante dilatación o erosión.

De manera similar [Hammond *et al.* \(2020\)](#) trabaja con optimización topológica robusta para optimizar un *splitter* en una región de diseño de $3\mu m \times 3\mu m$. En este trabajo se realiza la optimización imponiendo distintos radios de curvatura. De sus resultados se puede observar que a menor radio de curvatura se logra definir más detalles en los diseños y la optimización logra mejores resultados. Posteriormente, [Hammond *et al.* \(2021\)](#) fabrica diseños obtenidos con esta idea y muestra buenos resultados. Pero, detallan la presencia de pequeñas variaciones en las simulaciones y datos experimentales posiblemente causada por regiones aisladas en el diseño.

3.2 Inconveniente 2: La Optimización

En [Malheiros-Silveira y Delalibera \(2020\)](#) se compararon dos algoritmos en la optimización de un dispositivo. A diferencia de [Prosopio-Galarza *et al.* \(2019\)](#), la comparación no se realizó en base a la cantidad de iteraciones realizadas por cada algoritmo, en cambio se hizo de acuerdo a la cantidad de simulaciones realizadas (≈ 2000), es decir, la cantidad de veces que se evaluó la FOM. Esta estrategia es más adecuada para comparar algoritmos con distintas características de una manera más justa.

En otros trabajos que se centran en comparar algoritmos para optimizar un mismo dispositivo se sigue la misma idea para la comparación ([Gregory *et al.*, 2015](#), [Schneider *et al.*, 2019](#)); sin embargo, no parece haber un consenso sobre algún algoritmo que funcione bien para optimizar cualquier dispositivo.

En general, PSO y GA han sido extensamente usados en el área de acuerdo de acuerdo a reseñas como las de [Elsawy *et al.* \(2020\)](#) y [Campbell *et al.* \(2019\)](#). Tal y como es señalado en estos trabajos, el desempeño de ambos algoritmos es sensible a los parámetros escogidos. Este es un gran inconveniente debido a que escoger parámetros adecuados

puede consumir mucho tiempo y esto se debe hacer independientemente para cada dispositivo. Con el propósito de superar esta dificultad, distintos trabajos están optando por usar algoritmos que no necesiten configurar parámetros internos.

Bajo este enfoque, en [Gregory et al. \(2015\)](#) se resaltó el buen desempeño que pude obtener el algoritmo CMA-ES en la optimización de ciertos dispositivos, llegando a superar al PSO. De manera similar, en [Schneider et al. \(2019\)](#) se realizó un trabajo muy completo comparando distintos algoritmos llegando a resultados donde la optimización bayesiana mostró los resultados más prometedores, pero esta comparación fue para un bajo número de parámetros (< 15). Y, aunque no detalla la razón, en [Su et al. \(2020\)](#) se empleó el algoritmo L-BFGS-B en la optimización de un *bend* y WDM llegando a obtener resultados destacados.

Un aspecto importante a resaltar de estos últimos tres trabajos es que al comparar distintos algoritmos para optimizar dispositivos fotónicos necesitamos contar con (i) un elevado número de simulaciones y (ii) distintas ejecuciones que comiencen con diferentes puntos iniciales.

Como se ha discutido en este capítulo, la parametrización de nuestros dispositivos usando un bajo número de parámetros puede ir condicionando nuestros resultados, ante ellos dos posibles soluciones son usar (i) parametrización basada en conjuntos de nivel o (ii) parametrización basada en píxeles. Esto supone nuevos desafíos, mas ya existen estrategias para afrontarlos e incluso para incluir restricciones de fabricación a ambas parametrizaciones utilizando distintas estrategias de optimización. Por otro lado, aunque no se mencionó explícitamente, en el área de fotónica no parece haber muchas investigaciones que comparen distintos algoritmos cuando trabajamos con un elevado número de parámetros para representar nuestros dispositivos, en especial si los algoritmos no son PSO o GA.

Capítulo 4

Metodología

En el presente capítulo se describe la metodología a seguir en esta tesis. Primero, se describe de forma general los seis pasos que se trabajarán. Luego, se detalla en una sección completa cada uno de estos. Finalmente, se brindan los alcances y limitaciones de la propuesta.

Como se muestra en la Figura 4.1, en esta investigación se siguieron los siguientes seis pasos: (i) preparación de simulación, (ii) preparación de optimización, (iii) optimización continua, (iv) optimización discreta, (v) optimización de fabricación y (vi) preparación para fabricación.

Estos pasos se siguieron para optimizar tanto un *bend* como un WDM. Una vez preparada la simulación, la etapa de optimización (continua, discreta y de fabricación) se realizó tres veces por cada algoritmo. La primera ejecución usa un valor de semilla de 128, la segunda de 256 y la tercera de 512. De esta manera se aseguró iniciar con diseños aleatorios y mantener los resultados reproducibles.

Es importante señalar que los resultados de la optimización continua se usan como punto de inicio para la optimización discreta. Asimismo, los resultados de la optimización discreta se utilizan como entrada para la optimización de fabricación. Este proceso tiene como fin el mantener un buen resultado ([Yang y Fan, 2017](#)).

En particular, el valor de β , presente en la Ecuación 2.10, representa el factor discretizador de nuestros diseños. Este valor se va incrementando en la optimización discreta y de fabricación como se muestra en la Figura 4.1.

Finalmente, se realizó un posprocesamiento, análisis y conversión al formato GDSII de los diseños mejor optimizados, esto con el fin de dejar todo preparado para una futura etapa de fabricación de estos diseños.

En las siguientes subsecciones se explica en detalle cada una de los pasos de la metodología seguida en esta tesis.

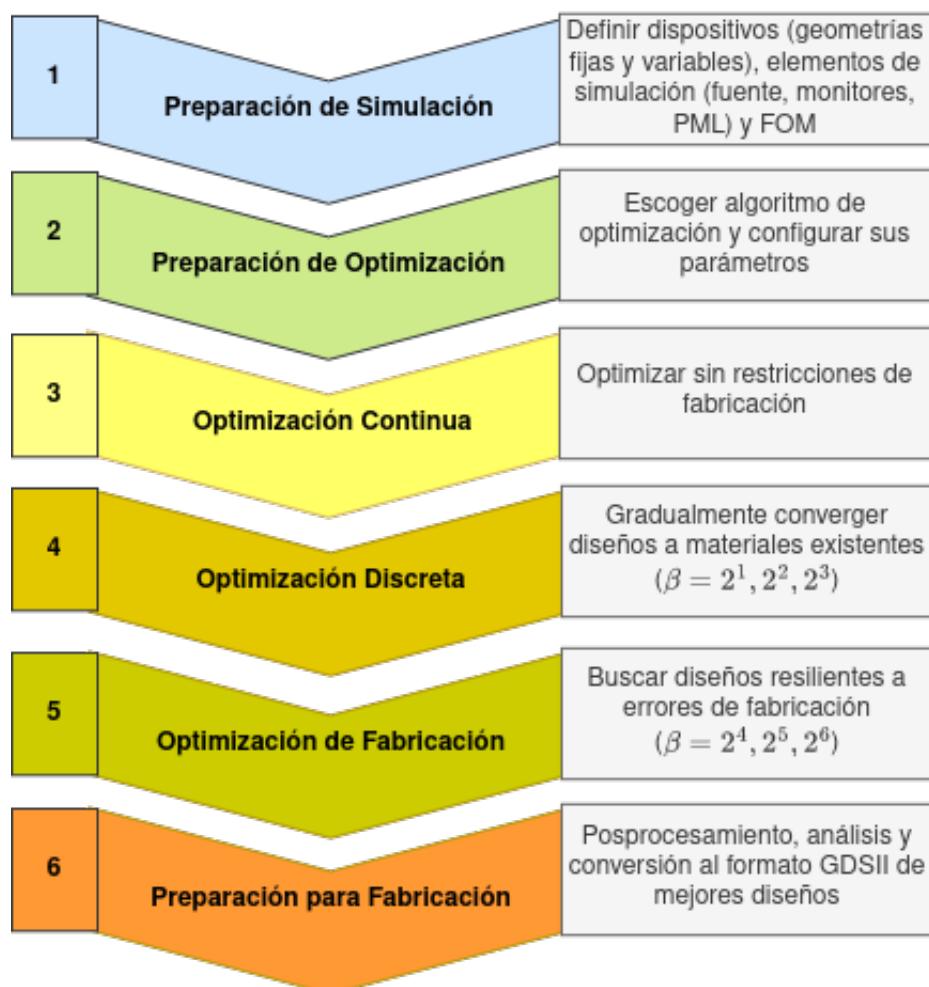


FIGURA 4.1: Metodología del trabajo de investigación

4.1 Preparación de Simulación

El *bend* y WDM se parametrizaron usando la parametrización basada en píxeles descrita en la Sección 2.2. La implementación se realizó en SPINS. La descripción detallada para los dos dispositivos de estudio se presentan en las siguientes dos subsecciones.

4.1.1 Bend

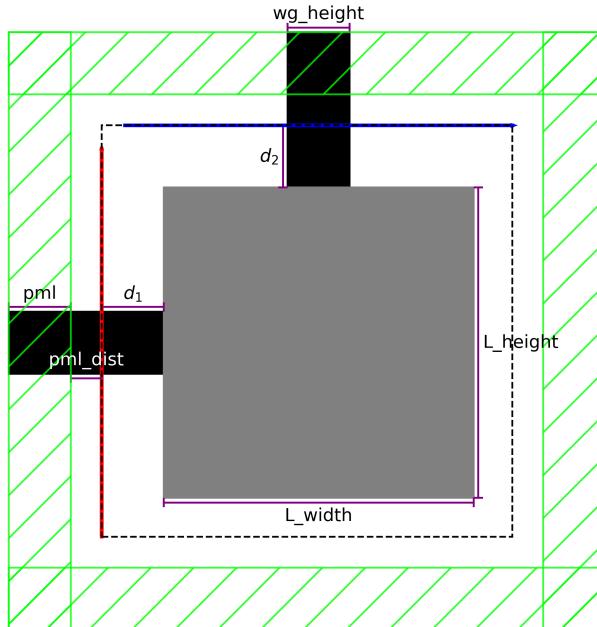


FIGURA 4.2: Parámetros del diseño del *bend* a optimizar.

En la Figura 4.2 se muestra el diseño y parámetros del *bend* a utilizar. Se espera que este dispositivo trabaje a 1550nm. Los rectángulos negros representan las guías de onda, estos tienen las mismas dimensiones aunque en distinta orientación. La región gris representa la región de diseño. La recta roja simula la fuente y la recta azul el monitor, su extensión está simbolizada por las variables *source* y *monitor*, respectivamente. Además, la profundidad de estos dos elementos es la misma, valor denotado como *z_length*. Por

otro lado, la región punteada se utiliza como referencia para definir el PML (región verde), del cual dista un valor definido como pml_dist . La profundidad de toda la geometría es especificada por la variable $depth$.

Cabe destacar que los parámetros fueron escogidos inspirados por el trabajo de [Su et al. \(2020\)](#). De este modo, la región de diseño se dividió en rectángulos de $16nm \times 16nm$, obteniendo así una matriz de 125×125 . Notemos que con esta configuración, en la Ecuación 2.5 tenemos $psize_x = psize_y = 16nm$. El valor de los demás parámetros del diseño se presenta en la Tabla 4.1.

Parámetro	Valor (nm)
wg_height	400
pml	300
pml_dist	200
d_1	400
d_2	400
L_width	2000
L_height	2000
source	2500
monitor	2500
z_length	1000
depth	220

TABLA 4.1: Parámetros usados en el diseño del *bend* a optimizar.

4.1.2 WDM

En la Figura 4.3 se muestra el diseño y parámetros del WDM a utilizar. Se espera que este dispositivo trabaje a $1300nm$ en el brazo superior y a $1550nm$ en el brazo inferior. Los rectángulo negros representan las guías de onda, estos tienen las mismas dimensiones. La región gris representa la región de diseño. La recta roja simula la fuente y su extensión se simboliza por la variable *source*. Las rectas azul y marrón describen los monitores cuya extensión está definida por las variables *monitor*. Además, la profundidad de la fuente y monitores es la misma, denotado como *z_length*. Por otro lado, la región punteada se

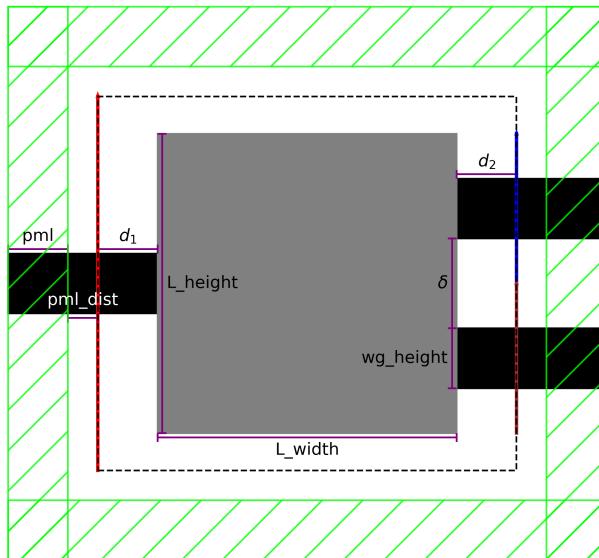


FIGURA 4.3: Parámetros del diseño del WDM a optimizar.

utiliza como referencia para definir el PML (región verde), del cual dista un valor definido como *pml_dist*. La profundidad de toda la geometría es especificada por la variable *depth*.

En este caso, los parámetros fueron escogidos inspirados por el trabajo de [Christiansen y Sigmund \(2021b\)](#). Del mismo modo como se realizó para el *bend*, la región de diseño se dividió en rectángulos de $16nm \times 16nm$, obteniendo así una matriz de 125×125 . El valor de los demás parámetros se presenta en la Tabla 4.2.

4.2 Preparación de Optimización

Con lo descrito en la anterior sección ya podemos evaluar distintos diseños. Ahora, utilizando como función objetivo la Ecuación 2.2 para el *bend* y la Ecuación 2.3 para el WDM, estamos ante un problema de optimización. Para resolverlo, la propuesta inicial era utilizar estos cinco algoritmos: (i) GA, (ii) PSO, (iii) CMA-ES, (iv) L-BFGS-B, (v) MMA.

Parámetro	Valor (nm)
wg_height	400
pml	300
pml_dist	200
d_1	400
d_2	400
L_width	2000
L_height	2000
δ	600
source	2500
monitor	1000
z_length	1000
depth	220

TABLA 4.2: Parámetros usados en el diseño del WDM a optimizar.

La elección de estos fue por diversos motivos. GA y PSO se escogieron por ser populares en el área ([Elsawy et al., 2020](#), [Molesky et al., 2018](#), [Prosopio-Galarza et al., 2019](#)). CMA-ES por haber tenido un buen desempeño en [Gregory et al. \(2015\)](#) y las buenas referencias brindadas en [Campbell et al. \(2019\)](#). L-BFGS-B por haber obtenido buenos resultados en trabajos como [Su et al. \(2020\)](#) y [Zhang et al. \(2021\)](#). MMA por haber sido recomendado como un buen candidato para la optimización topológica ([Lazarov et al., 2016](#)).

Por trabajos como los de [Su et al. \(2020\)](#), [Christiansen y Sigmund \(2021b\)](#) y [Lazarov et al. \(2016\)](#) ya nos podíamos anticipar que al usar L-BFGS-B o MMA se obtendrían buenos resultados en parte gracias a usar la gradiente para guiar la búsqueda. Sin embargo, por la cantidad de variables utilizadas (125×125) no podíamos asegurar lo mismo con GA, PSO y CMA.

Debido a ello, primero se realizó un experimento preliminar para evaluar el desempeño de estos algoritmos al realizar como máximo 1200 evaluaciones en la optimización del *bend* propuesto, estos resultados son presentados en la Figura 4.4. Como podemos observar, especialmente del CMA-ES, hay una ligera tendencia de mejora. Por otro lado, por los resultados mostrados en [Christiansen y Sigmund \(2021a\)](#) uno esperaría que algoritmos

como GA lograran obtener resultados similares a los obtenidos por algún algoritmo basado en la gradiente (e.g., L-BFGS-B y MMA); sin embargo, esto podría necesitar evaluar el FOM un número muy elevado de veces (entre 10^4 y 10^5).

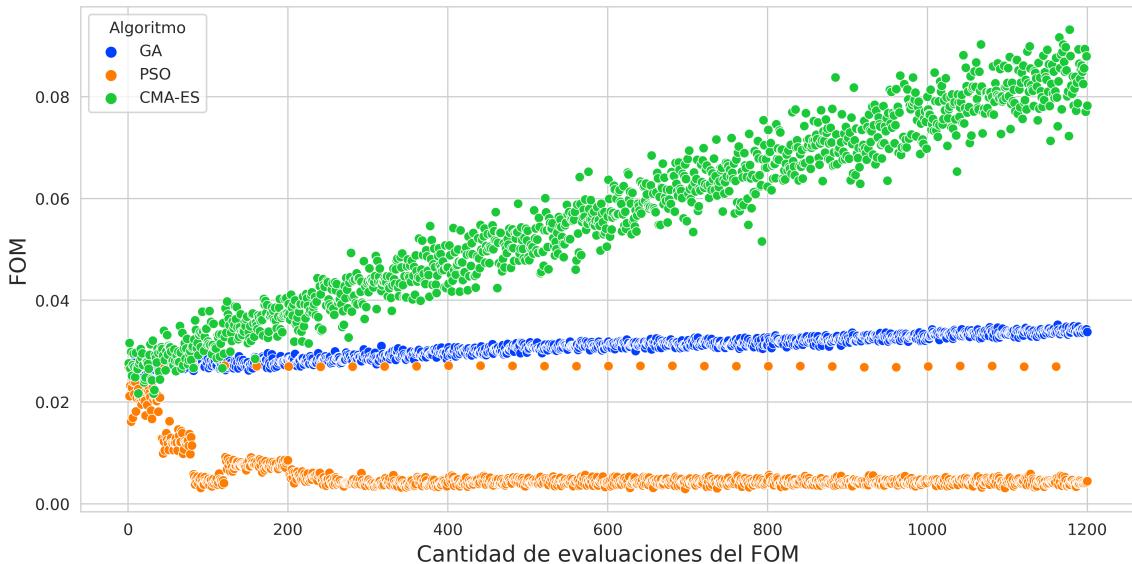


FIGURA 4.4: Comparación del desempeño de GA, PSO y CMA-ES para optimizar el *bend* propuesto.

De este modo, en esta tesis se optó por comparar solamente algoritmos de primer orden, es decir, que utilicen el cómputo de la gradiente en sus rutinas. Así, se seguirá evaluando los algoritmos GA, PSO y CMA-ES pero ahora en sus versiones que usan la gradiente. Para poder comparar el desempeño de estos se configuró la máxima cantidad de veces que podían evaluar la función objetivo. Los parámetros específicos con los que se ejecutaron cada algoritmo se detallan en la Tabla 4.3 siguiendo la nomenclatura presentada en la Sección 2.5. La elección de estos parámetros es producto de la revisión de la literatura y de experimentación propia de prueba y error.

Es resumen, usando simulaciones en 3D FDFD con SPINS-B, evaluamos estos cinco algoritmos:

1. G-PSO

Algoritmo	Parámetro	Valor (nm)
MMA	m^+	0
L-BFGS-B	\bar{m}	10
L-BFGS-B	pgtol	0
G-GA	population_size	40
G-GA	n_selected_parents	10
G-GA	GA_range	0.1
G-GA	prob_mutation	0.1
G-PSO	population_size	40
G-PSO	PSO_range	0.1
G-PSO	ω	0.5
G-PSO	c_1	0.5
G-PSO	c_2	0.5
G-CMA-ES	population_size	40
G-CMA-ES	σ	0.3
G-PSO	k_gd	10
G-PSO	gamma	0.1
G-GA	k_gd	10
G-GA	gamma	0.1

TABLA 4.3: Parámetros usados por los algoritmos de optimización.

Los experimentos con este algoritmo se desarrollaron con una implementación propia siguiendo lo descrito en Subsección 2.5.8.

2. G-GA

Los experimentos con este algoritmo se desarrollaron con una implementación propia siguiendo lo descrito en Subsección 2.5.9.

3. G-CMA-ES

Los experimentos con este algoritmo se desarrollaron usando el paquete de Python pycma ([Hansen et al., 2019](#)).

4. MMA (Subsección 2.5.5)

No se realizaron variantes en este algoritmo. Los experimentos se desarrollaron usando el paquete de Python NLOpt ([Johnson, 2022](#)).

5. L-BFGS-B (Subsección 2.5.6)

No se realizaron variantes en este algoritmo. Los experimentos se desarrollaron usando el paquete de Python SciPy ([Virtanen et al., 2020](#)).

A continuación, se detalla la estrategia de optimización seguida en este trabajo. Esta propuesta esta inspirada (principalmente) en el trabajo de [Su et al. \(2020\)](#) y [Christiansen y Sigmund \(2021b\)](#). En cada una de estas etapas se limitó la cantidad de veces que se podía evaluar f_{obj} para su posterior comparación. Además, para G-GA y G-PSO se agregó una condición para terminar el algoritmo en caso de no encontrar mejoras mayores a 10^{-9} en las últimas 5 iteraciones, para el L-BFGS-B se usó valores por defecto de la implementación encontrada en Scipy y para MMA se estableció como criterio de convergencia el lograr una tolerancia relativa de 10^{-9} .

4.3 Optimización Continua

En esta etapa se configuró la máxima cantidad de evaluaciones a 2000. Luego, se ejecutaron los cinco algoritmos para optimizar el *bend* y WDM. Cada algoritmo se ejecutó 3 veces, la primera con un valor de semilla de 128, la segunda de 256 y la tercera de 512. La idea de esta etapa es optimizar los diseños sin imponer ninguna restricción. Es decir, directamente usamos la parametrización \mathbf{P} para evaluar la permitividad ε (Ecuación 2.4), lo cual lo podemos representar como $(\mathbf{P} \rightsquigarrow \varepsilon)$.

4.4 Optimización Discreta

Los objetivos de esta etapa son dos: (i) obtener diseños con un mínimo radio de curvatura r_f e (ii) ir eliminando las regiones grises. Para el primer objetivo se aplicó la Ecuación 2.7 a la parametrización \mathbf{P} usando un radio de curvatura $r_f = 80nm$. Como $80nm$ es igual a 5 veces el tamaño de los píxeles configurados en la Sección 4.1,

solamente fue necesario explorar una submatriz de 11×11 alrededor de cada elemento para el cálculo de esta ecuación. Para el segundo objetivo se aplicó la Ecuación 2.10 al resultado conseguido por el anterior filtro. Este proceso lo podemos representar como ($\mathbf{P} \rightsquigarrow \tilde{\mathbf{P}} \rightsquigarrow \tilde{\tilde{\mathbf{P}}} \rightsquigarrow \varepsilon$).

Para la optimización se utilizó los resultados de la optimización continua como punto inicial. Para ello se realizó una primera optimización configurando la máxima cantidad de evaluaciones en 800 y aplicando a cada diseño los filtros descritos anteriormente con $\beta = 2^1$ y $\eta = 0.5$ para la Ecuación 2.10. El resultado de esta optimización se usa como punto inicial para repetir este proceso, pero ahora con $\beta = 2^2$. Finalmente, se repite una vez más el procedimiento con $\beta = 2^3$.

4.5 Optimización de Fabricación

Por último, se busca imponer a los diseños restricciones de fabricación y robustez a posibles errores de fabricación.

Tomando como referencia el trabajo de [Hammond et al. \(2020\)](#) para asegurar un buen desempeño pese a los errores de fabricación, por cada parametrización \mathbf{P} se calculó:

- $\tilde{\tilde{\mathbf{P}}}_d$ que representa el diseño como si el dispositivo se hubiera dilatado.
- $\tilde{\tilde{\mathbf{P}}}_i$ que representa el diseño nominal.
- $\tilde{\tilde{\mathbf{P}}}_e$ que representa el diseño como si el dispositivo hubiera erosionado.

Estos tres elementos se calcularon siguiendo los mismos filtros descritos en la anterior sección ($\mathbf{P} \rightsquigarrow \tilde{\mathbf{P}} \rightsquigarrow \tilde{\tilde{\mathbf{P}}} \rightsquigarrow \varepsilon$). Pero, para el diseño dilatado se usó $\eta_d = 0.45$, para el diseño nominal $\eta_i = 0.5$ y para el diseño expandido $\eta_e = 0.55$.

Luego, se definió una nueva función objetivo mediante la siguiente ecuación:

$$F_{obj} = \max(\min(f_{obj}(\tilde{\tilde{P}}_d), f_{obj}(\tilde{\tilde{P}}_i), f_{obj}(\tilde{\tilde{P}}_e))) \quad (4.1)$$

Así, considerando el peor escenario ante dos posibles errores de fabricación (expansión o contracción), se busca el diseño más robusto posible. Para optimizar esta nueva función objetivo se realizó el mismo proceso de la optimización discreta, pero ahora con valores $\beta = 2^4, 2^5, 2^6$ y limitando a 400 evaluaciones de F_{obj} por cada β . De esta manera, en paralelo, seguimos con el proceso de discretizar nuestros resultados.

4.6 Preparación para Fabricación

Finalmente, se seleccionó el diseño más óptimo obtenido para un *bend* y WDM. Luego, se realizó un análisis del funcionamiento de estos dispositivos a distintas longitudes de onda y se evaluó su desempeño al eliminar regiones aisladas. Para la eliminación de regiones aisladas se realizó una búsqueda por profundidad desde la intersección entre la guía de entrada y la región de diseño. Para ello recorrimos la matriz $\tilde{\tilde{P}}$ como un grafo implícito moviéndonos a una celda vecina si esta poseía un valor mayor a 0.5.

Posteriormente, usando la permitividad asociada a sus parametrizaciones se obtuvo la geometría del dispositivo. Esta geometría se aproximó mediante polígonos usando el paquete *matplotlib* de Python. Luego, se utilizaron estos polígonos con rutinas de SPINS-B para representar el diseño en formato GDSII. De esta manera los mejores diseños optimizados quedaron preparados para una futura etapa de fabricación.

4.7 Alcances y Limitaciones

El presente trabajo solo se realizó mediante simulaciones computacionales, no se llegó a la parte de fabricación por temas de tiempo y presupuesto. Sin embargo, los mejores diseños optimizados se encuentran listos para poder ser fabricados.

En este capítulo hemos explicado los seis pasos seguidos en esta tesis. Primero, comenzamos describiendo la configuración de nuestros dispositivos a optimizar. Segundo, se detalló los cinco algoritmos a utilizar, sus parámetros y justificación de elección. Luego, se desarrolló la estrategia de optimización a seguir: optimización continua, discreta y de fabricación. Finalmente, se describió la etapa final realizada con los mejores diseños obtenidos.

Capítulo 5

Experimentaciones y Resultados

En la presente sección comenzamos mostrando los sistemas de cómputo utilizados para la experimentación. Seguidamente, dividimos este capítulo en seis secciones. Primero, se muestra los resultados de la optimización del *bend*. Para ello se inicia mostrando en tres gráficas distintas el desempeño de cada algoritmo en las tres etapas de la estrategia de optimización; luego, se detalla los resultados por cada algoritmo de manera individual. Segundo, se realiza un análisis al diseño del *bend* mejor optimizado. Tercero, de manera similar al caso del *bend*, se expone los resultado de la optimización del WDM. Cuarto, se desarrolla un análisis al diseño del WDM mejor optimizado. Quinto, se realiza una discusión crítica sobre los resultados de la optimización del *bend*. Finalmente, se realiza una discusión similar sobre los resultados del WDM.

Los experimentos se realizaron en tres equipos brindados por la Universidad de Ingeniería y Tecnología:

1. Un Intel Core i7-3770K 3.50 GHz con 8 cores y 32 GB de RAM. Este computador contó con un GPU NVIDIA Quadro RTX 4000 con 8GB GDDR6.
2. Del *cluster* Khipu, un Intel Xeon Gold 6230 2.10 GHz con 40 *cores* y 128 GB de RAM. Este nodo contó con un GPU NVIDIA Tesla T4 con 16 GB GDDR6.
3. Del *cluster* Khipu, un AMD EPYC 7742 2.25 GHz con 128 *cores* y 1024 GB de RAM. Este nodo contó con un GPU NVIDIA Ampere A100 con 40 GB HMB2.

Sacando la media geométrica de los tiempos calculados, el tiempo promedio de simulación en los tres sistemas en cada etapa de la estrategia de optimización se detalla en

la Tabla 5.1 (el signo - indica que en ese sistema de cómputo no se realizaron experimentos con ese dispositivo).

Tiempo promedio (s)	Quadro RTX	Tesla T4	Ampere A100
Optimización continua (<i>bend</i>)	14.261	15.432	-
Optimización discreta (<i>bend</i>)	15.961	18.718	-
Optimización de fabricación (<i>bend</i>)	47.084	50.639	-
Optimización continua (WDM)	16.876	-	17.479
Optimización discreta (WDM)	18.431	-	19.780
Optimización de fabricación (WDM)	53.941	-	55.406

TABLA 5.1: Tiempos promedio de simulación en cada etapa de optimización para el *bend* y WDM con los tres sistemas de cómputo usados.

Por cada optimización se realizó como máximo 2000 evaluaciones de f_{obj} en la optimización continua, 3×800 en la optimización discreta y 3×400 en la optimización de fabricación. Así, por ejemplo, usando Quadro RTX la optimización de un *bend* podía tomar hasta 34 horas y usando Ampere A100 la optimización de un WDM podía tomar hasta 41 horas. Es importante destacar que con estas estimaciones se está obviando factores como el tiempo de escritura en disco para los *logs* y el tiempo de ejecución de cada algoritmo, simplemente se está considerando el tiempo desde que se envía una solicitud a Maxwell-B para simular un dispositivo en el GPU hasta el momento que SPINS-B recibe el resultado.

Por otro lado, cada GPU solo puede realizar una simulación a la vez, en caso de querer evaluar dos parametrizaciones al mismo tiempo una era puesta en cola. De este modo, siendo el tiempo de simulación el cuello de botella de las optimizaciones, los programas simplemente se ejecutaron con un solo *core* y se limitó la memoria a 32 GB para los nodos del *cluster* Khipu mediante SLURM (herramienta que funciona como gestor de recursos de Khipu).

En las siguientes secciones las imágenes que muestran resultados de simulación del *bend* o WDM incluyen un círculo blanco, este representa una circunferencia de radio $r_f = 80nm$, el mínimo radio de curvatura que se está intentando imponer. Además,

las imágenes que resumen el proceso de optimización de cada dispositivo incluyen rectas horizontales punteadas por un tema de visualización (distintos algoritmos-iteraciones alcanzaron condiciones para detenerse antes de alcanzar la máxima cantidad permitida de evaluaciones del FOM), estas rectas simplemente extienden el mejor resultado obtenido.

5.1 Resultados de Optimización del *Bend*

En la Figura 5.1, Figura 5.2 y Figura 5.3 se observa el desempeño de los cinco algoritmos seleccionados en la etapa de optimización continua, discreta y de fabricación del *bend*, respectivamente. Los resultados en más detalle por algoritmo se pueden encontrar en la ?? (L-BFGS-B), ?? (G-CMA-ES), ?? (MMA), ?? (G-PSO) y ?? (G-GA).

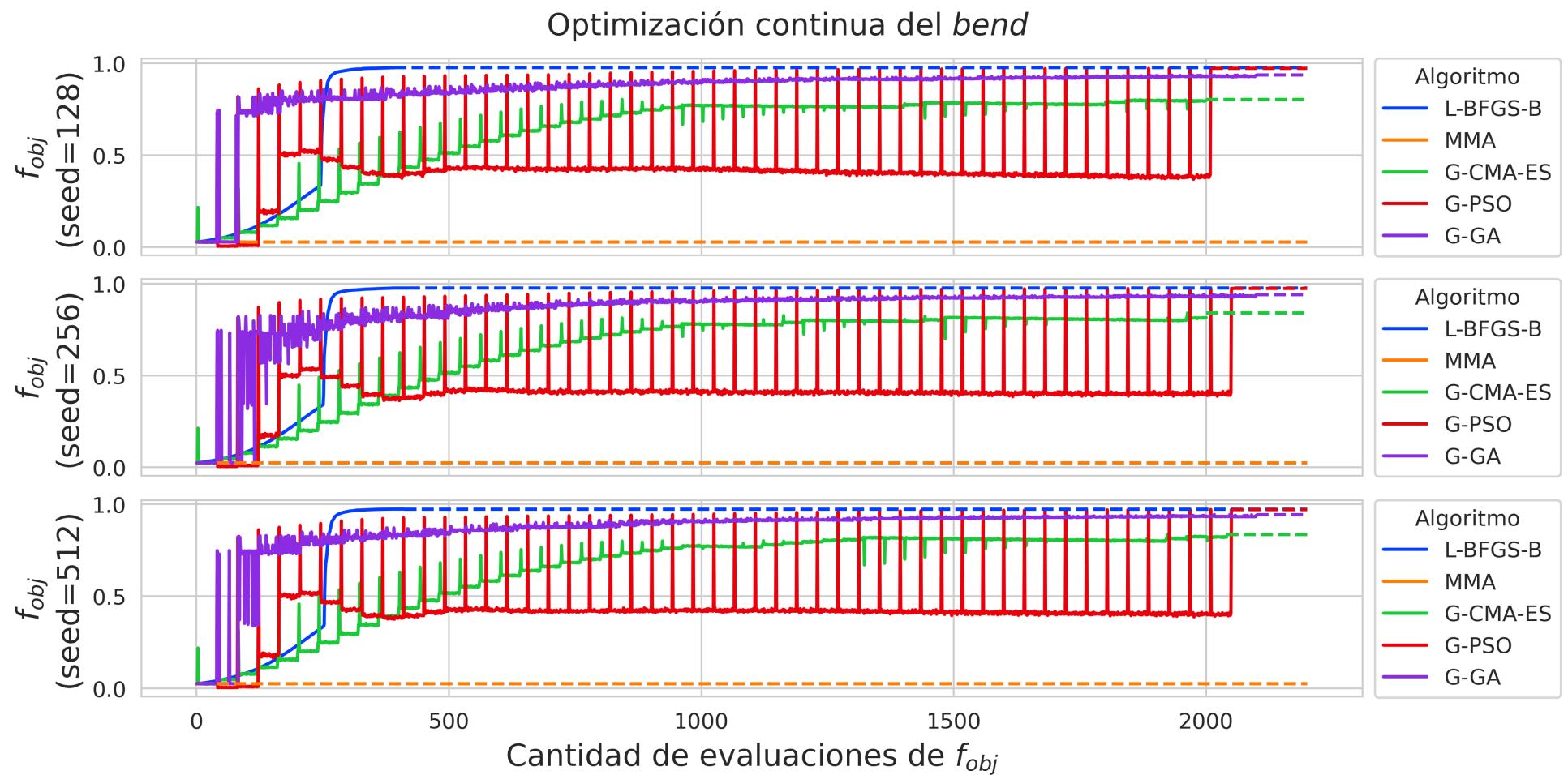


FIGURA 5.1: Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización continua del *bend*

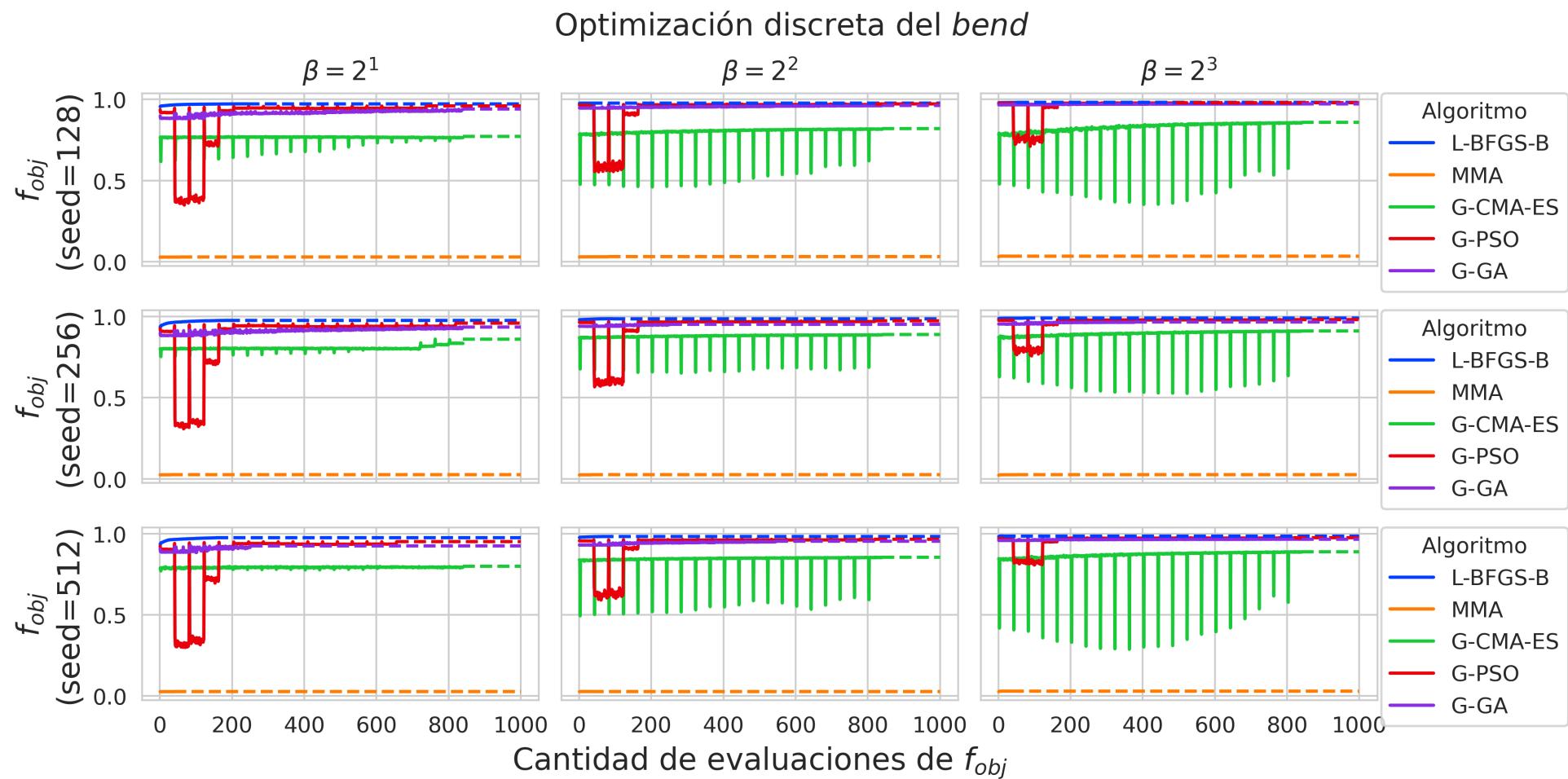


FIGURA 5.2: Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización discreta del *bend*

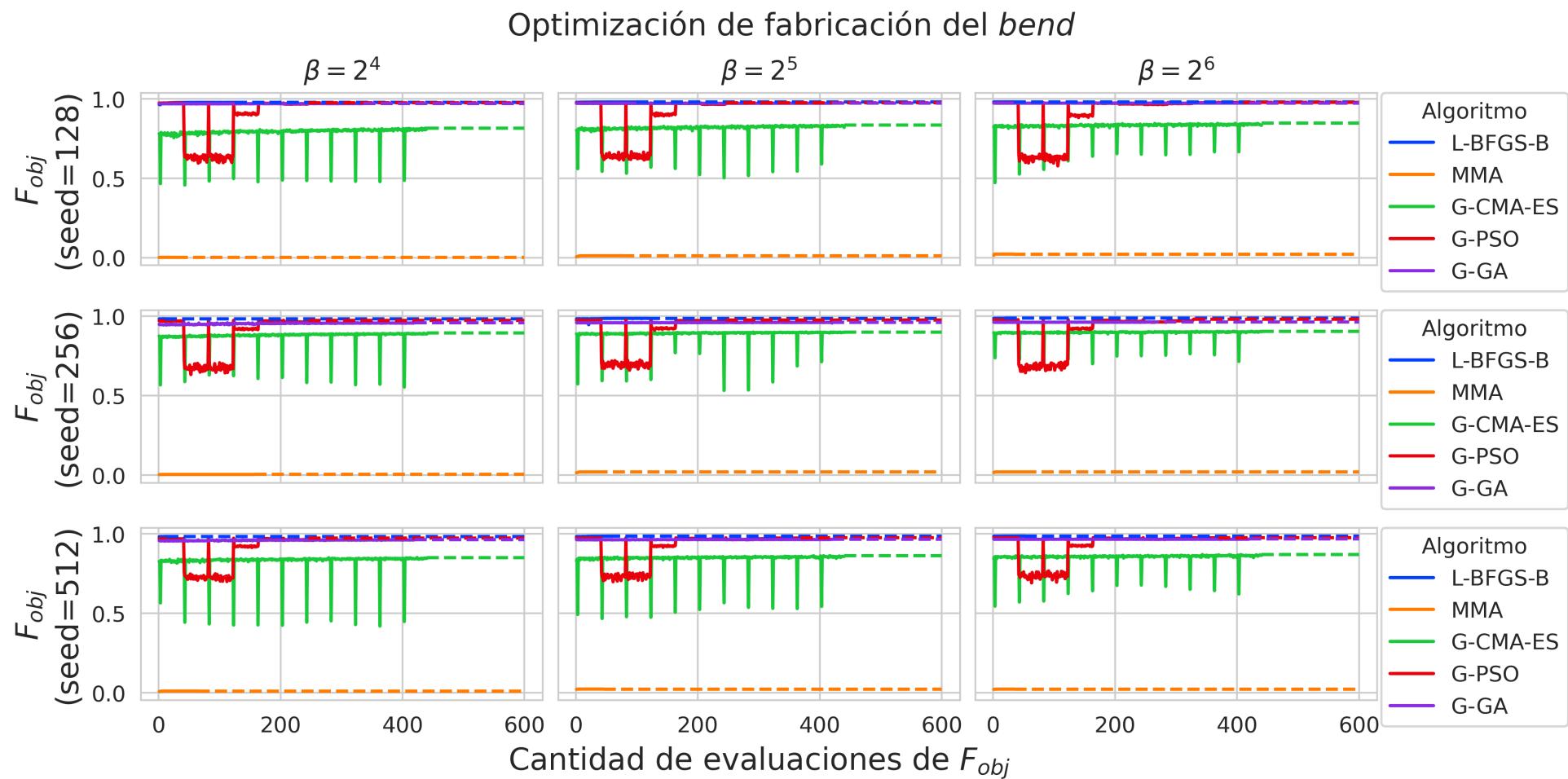


FIGURA 5.3: Gráfico de valores de F_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización de fabricación del *bend*

5.2 Diseño del *Bend* Mejor Optimizado

De la sección anterior tenemos que el *bend* mejor optimizado se consiguió utilizando el algoritmo L-BFGS-B con un *seed* (valor de semilla) de 256.

Al aplicar la Ecuación 2.13 obtenemos que el porcentaje de región gris en el diseño es de 1.165 %, un valor menor a 2 %, por lo cual podemos considerar que el diseño ha sido adecuadamente binarizado. Por otro lado, si eliminamos las regiones no conectadas con la guía de entrada tenemos un diseño con un porcentaje de gris de 0.559 %. Estos diseños lo podemos observar en la Figura 5.4, el contorno morado alrededor de las geometrías de (a) y (b) representan los polígonos usados para aproximar estas geometrías con el fin de obtener la descripción en el formato GDSII, lo cual se puede observar en (e) y (f). Adicionalmente, en la Figura 5.5 se muestra el comportamiento del diseño en un rango de longitudes de onda de 1500nm a 1600nm, resultados obtenidos usando una ventana de 50nm. En este rango, considerando los errores de erosión y dilatación, la máxima diferencia de transmitancia es de 0.032 para el diseño nominal y de 0.034 para el diseño nominal tras eliminar regiones no conexas.

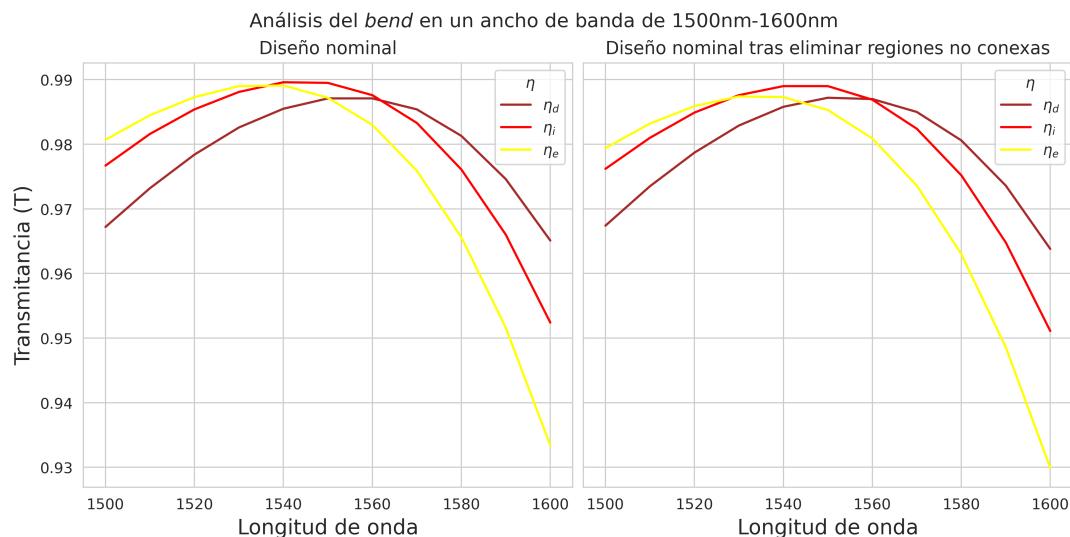


FIGURA 5.5: Análisis del *bend* mejor optimizado en un rango de longitudes de onda (1500nm – 1600nm)

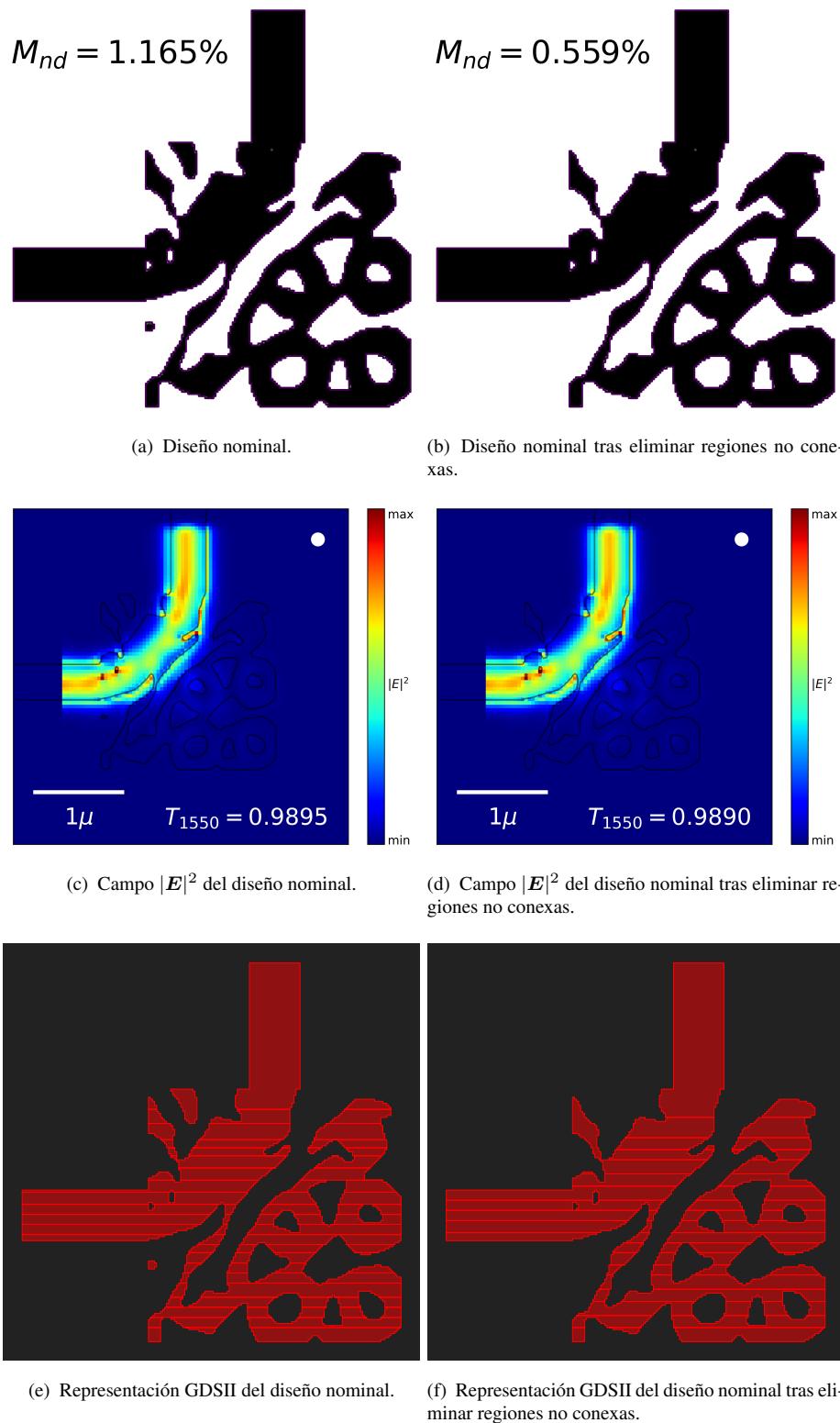


FIGURA 5.4: Posprocesamiento del diseño del *bend* mejor optimizado.

Adicionalmente, de la figura Figura 5.4d es destacable señalar que la región inferior derecha está conectada con el resto del dispositivo por una región delgada. El hecho que esta región sea considerada conexa es debido a que como se detalló en el Capítulo 4, para determinar la región compacta hacemos un recorrido entre celdas adyacentes de la matriz $\tilde{\mathbf{P}}$ con valores mayores a 0.5 y no realizamos más verificaciones pues el diseño debería poder ser dibujado por una circunferencia de radio $r_f = 80nm$ debido al proceso $\mathbf{P} \rightsquigarrow \tilde{\mathbf{P}}$. Sin embargo, para entender mejor el impacto de la región inferior derecha de este diseño en el desempeño del dispositivo, se realizó el proceso $\mathbf{P} \rightsquigarrow \tilde{\mathbf{P}}$, pero con $r_f = 100nm$. En la Figura 5.6, se observa que el diseño resultante es compacto, pero tiene menor transmitancia que los diseños de la Figura 5.4. Así, parece sensato concluir que esta región influye en el desempeño del dispositivo. Mas, en el mejor de mi conocimiento, no puedo explicar como es dicha contribución. Probablemente, esta región este funcionando como un punto de rebote.

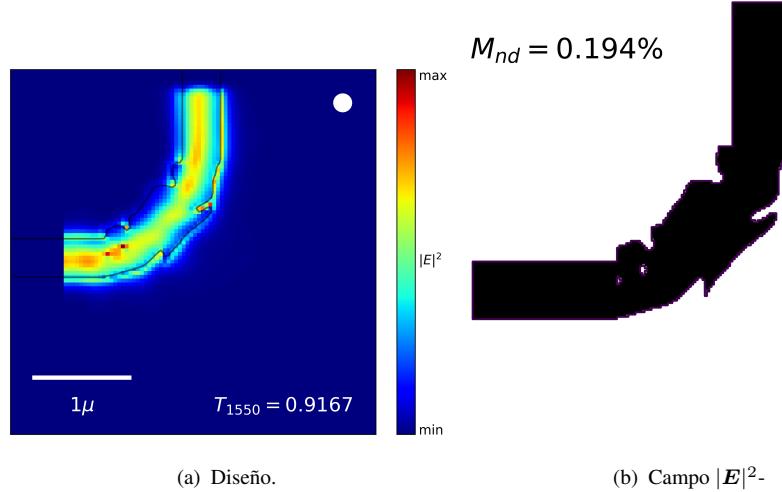


FIGURA 5.6: Posprocesamiento del diseño del *bend* mejor optimizado tras eliminar regiones no conexas usando $r_f = 100nm$.

5.3 Resultados de Optimización del WDM

En la Figura 5.7, Figura 5.8 y Figura 5.9 se observa el desempeño de los cinco algoritmos seleccionados en la etapa de optimización continua, discreta y de fabricación del WDM, respectivamente. Los resultados en más detalle por algoritmo se pueden encontrar en la ?? (L-BFGS-B), ?? (G-CMA-ES), ?? (MMA), ?? (G-PSO) y ?? (G-GA).

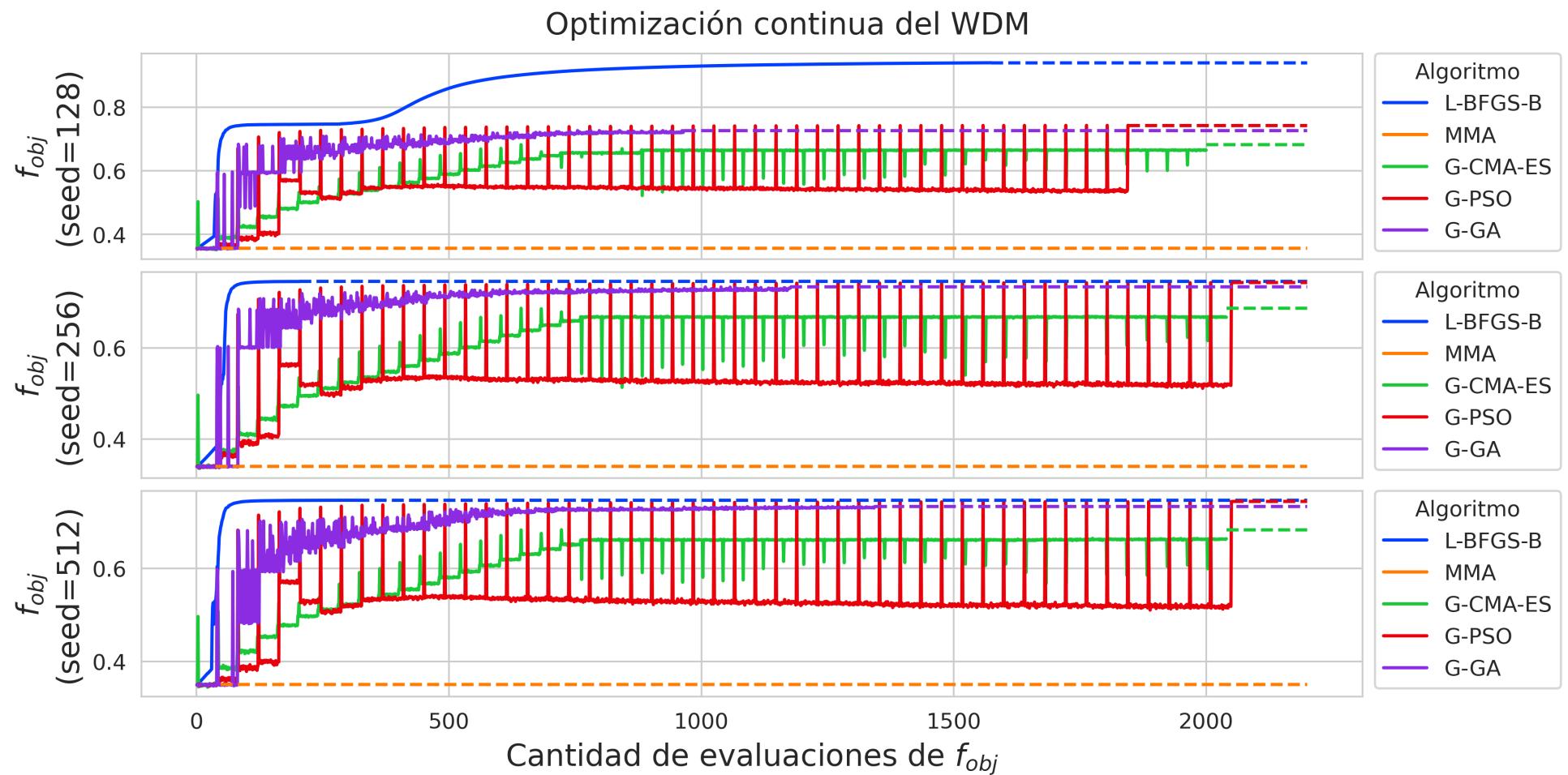


FIGURA 5.7: Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización continua del WDM

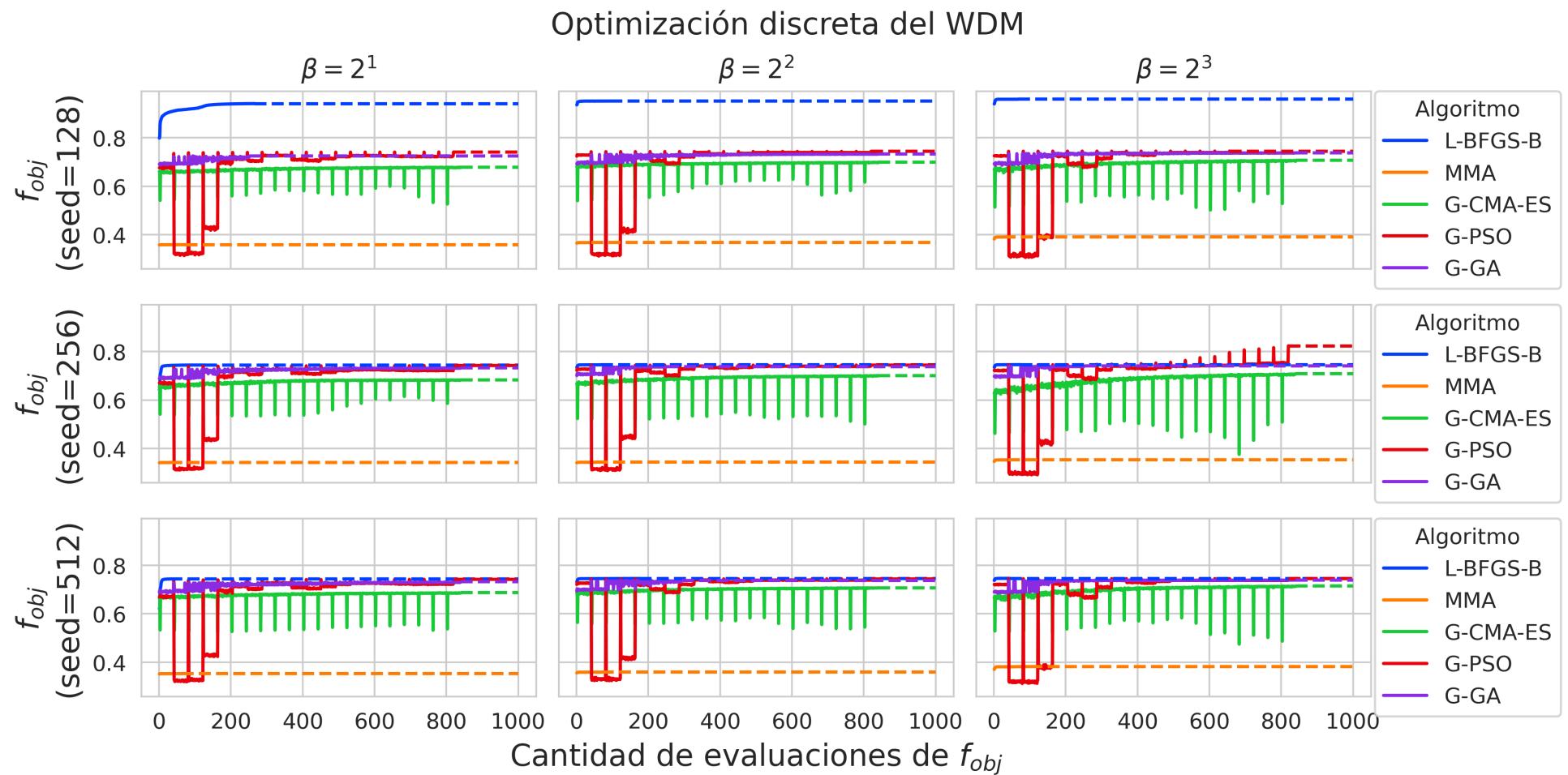


FIGURA 5.8: Gráfico de valores de f_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización discreta del WDM

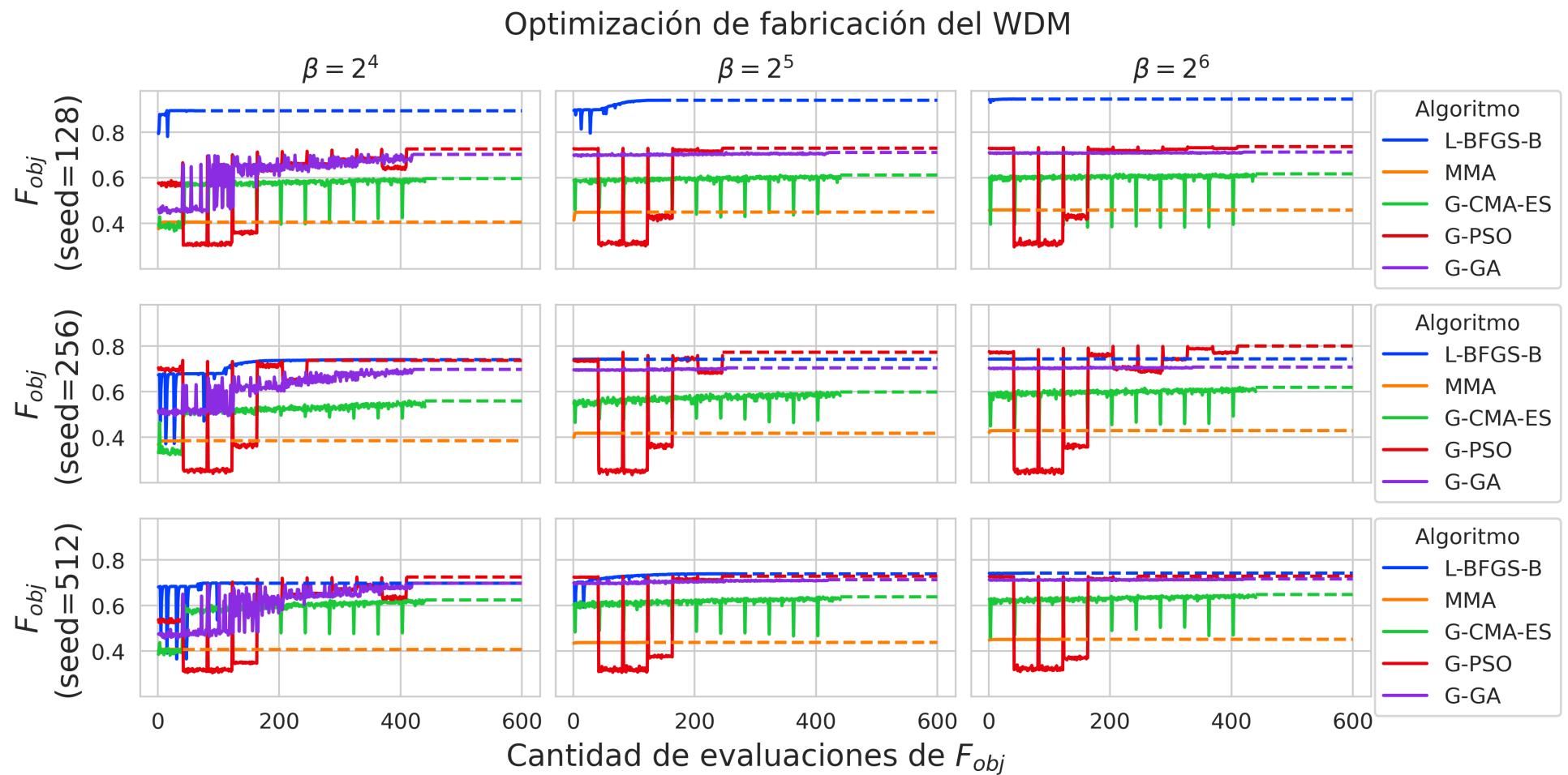


FIGURA 5.9: Gráfico de valores de F_{obj} obtenidos por los algoritmos en la optimización de fabricación del WDM

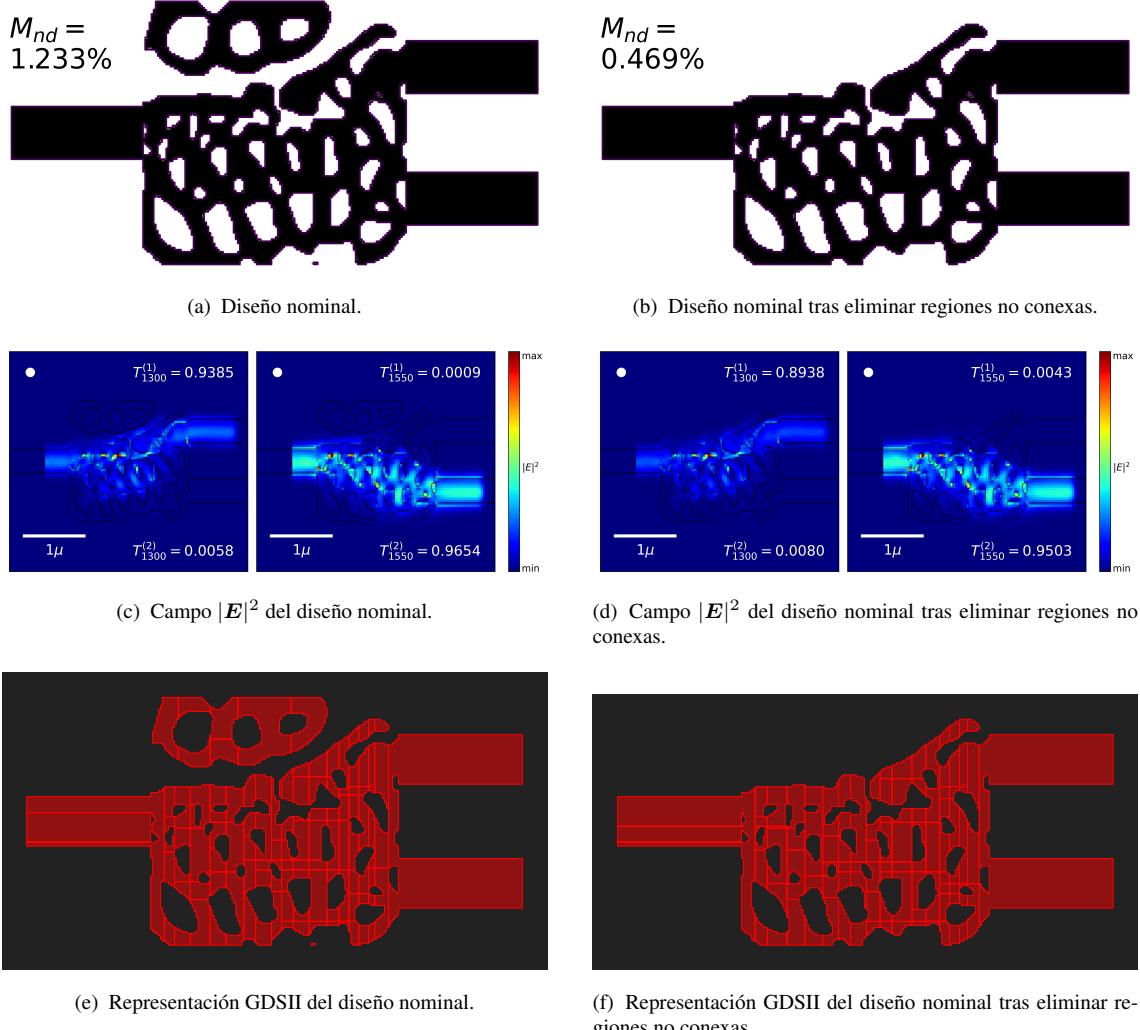


FIGURA 5.10: Posprocesamiento del diseño del WDM mejor optimizado.

5.4 Diseño del WDM Mejor Optimizado

De la sección anterior tenemos que el WDM mejor optimizado se consiguió utilizando el algoritmo L-BFGS-B con un *seed* (valor de semilla) de 128.

Al aplicar la Ecuación 2.13 obtenemos que el porcentaje de región gris en el diseño es de 1.233 %, un valor menor a 2 %, por lo cual podemos considerar que el diseño ha sido

adecuadamente binarizado. Por otro lado, si eliminamos las regiones no conectadas con la guía de entrada tenemos un diseño con un porcentaje de gris de 0.469 %. Estos diseños lo podemos observar en la Figura 5.10, el contorno morado alrededor de las geometrías de (a) y (b) representan los polígonos usados para aproximar estas geometrías con el fin de obtener la descripción en el formato GDSII, lo cual se puede observar en (e) y (f). Adicionalmente, en la Figura 5.11 se muestra el comportamiento del diseño en un rango de longitudes de onda de 1250nm a 1600nm, resultados obtenidos usando una ventana de 50nm. En este rango, considerando los errores de erosión y dilatación, para el diseño nominal la máxima diferencia de transmitancia es de 0.108 en la guía de onda superior y de 0.116 en la guía de onda inferior. De manera similar, para el diseño nominal tras eliminar regiones no conexas, la máxima diferencia de transmitancia es de 0.114 en la guía de onda superior y de 0.098 en la guía de onda inferior.

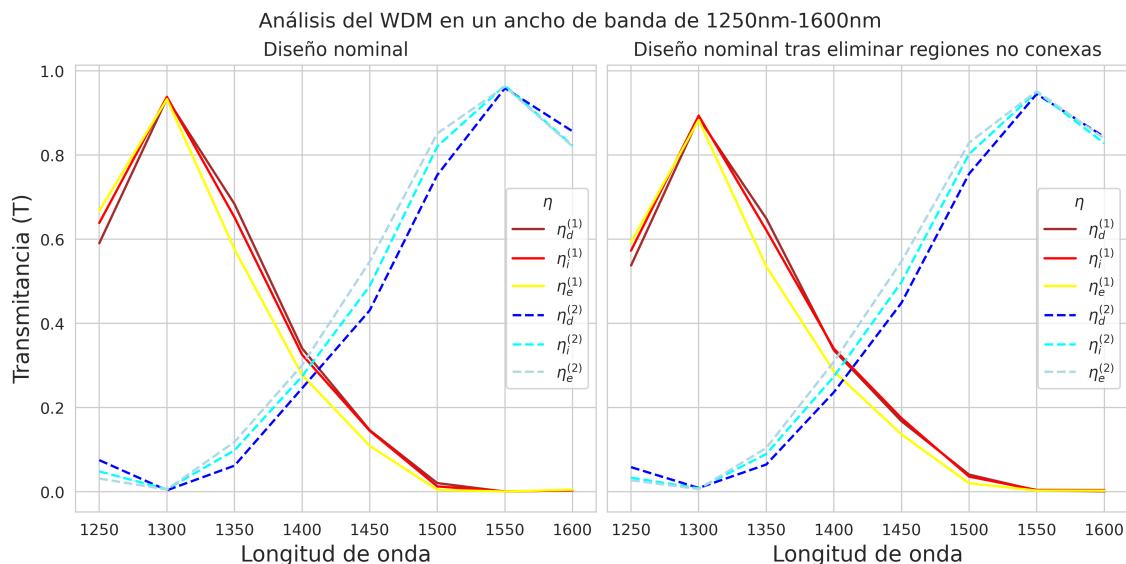


FIGURA 5.11: Análisis del WDM mejor optimizado en un rango de longitudes de onda (1250nm – 1550nm)

5.5 Discusión de Resultados del *Bend*

Para poder entender nuestros resultados buscamos una referencia del estado del arte en la optimización de un *bend*. Sin embargo, en el mejor de nuestro conocimiento no hay publicaciones recientes que muestren resultados explícitos en la optimización de un *bend* de un área de diseño de $2\mu m \times 2\mu m$. Pero, utilizando SPINS-B tenemos que el diseño intuitivo posee una transmitancia de 0.8399 a 1550nm.

Luego, analizando la Figura 5.1, Figura 5.2 y Figura 5.3 pudimos comparar el desempeño y convergencia de los cinco algoritmos escogidos en la optimización del *bend*. En nuestro caso el desempeño viene dado por el valor de la FOM, a mayor FOM decimos que el algoritmo tuvo un mejor desempeño. Particularmente, observamos que la optimización continua es la etapa que influye más en los diseños finales encontrados. Esto tiene sentido pues las dos siguientes etapas son principalmente para refinar los resultados de esta primera etapa en un diseño fabricable.

Centrándonos en los resultados del MMA, lo primero que nos llamó la atención de la optimización continua (Figura 5.1) es el hecho que el algoritmo converge incluso antes de realizar 100 evaluaciones de f_{obj} . Al inicio pensamos que era un error de configuración, pero incluso si forzábamos al algoritmo a realizar todas las evaluaciones permitidas, este se estancaba en diseños con transmitancias cercanas a 0. Además, esta misma tendencia se repitió en la optimización discreta (Figura 5.2) y la optimización de fabricación (Figura 5.3). Por último, en la ?? observamos que los diseños ni siquiera lograron conectar las guías de onda. En conclusión, si bien este algoritmo converge rápidamente, en términos de desempeño es el peor algoritmo de los estudiados para el caso del *bend*. De hecho, tenemos que MMA fue el único algoritmo que no logró conectar las guías de onda y que no logró obtener un diseño con mejor transmitancia que el diseño intuitivo.

Centrándonos en los resultados del G-CMA-ES, notamos que después del MMA este algoritmo obtuvo los diseños con menor transmitancia en las tres etapa de optimización; además, en promedio fue quien más se demoró en converger (Figura 5.1, Figura 5.2 y Figura 5.3). Seguidamente, en la ?? pudimos apreciar que G-CMA-ES obtuvo geometrías con presencia de pequeñas zonas grises (en promedio, $M_{nd} = 5.459\%$) y zonas puntiagudas. En conclusión, tanto en términos de eficiencia como de convergencia este algoritmo no mostró los mejores resultados.

Centrándonos en los resultados de los restantes algoritmos (L-BFGS-B, G-PSO y G-GA) notamos que los tres lograron encontrar diseños con transmitancias mayores al 90% en todas las etapas de optimización. Sin embargo, L-BFGS-B mostró superioridad tanto en términos de eficiencia como de convergencia. Los otros dos algoritmos (G-PSO y G-GA) obtuvieron valores del FOM ligeramente menores y necesitaron mayor tiempo de convergencia. Adicionalmente, a partir de la ??, ?? y ?? pudimos notar que en promedio solamente L-BFGS-B y G-PSO generaron diseños adecuadamente binarizados ($M_{nd} < 2\%$) y con poca presencia de regiones puntiagudas.

En síntesis, se obversó que L-BFGS-B y G-PSO fueron las únicas opciones que lograron producir dispositivos adecuadamente binarizados, con elevadas transmitancias y facilidad de fabricación. A partir de las observaciones realizadas se elaboró una relación de orden entre los algoritmos de acuerdo a los criterios: (i) desempeño (mayor valor de F_{obj}), (ii) convergencia (más rápida, promedio de las tres etapas de optimización) y (iii) M_{nd} promedio (menor porcentaje de gris). Esto se puede encontrar en la Tabla 5.2.

Desempeño	Convergencia	M_{nd}
L-BFGS-B (0.9895)	MMA (165)	L-BFGS-B (1.157 %)
G-PSO (0.9830)	L-BFGS-B (566)	G-PSO (1.519 %)
G-GA (0.9744)	G-PSO (3094)	G-GA (2.062 %)
G-CMA-ES (0.9155)	G-GA (3117)	G-CMA-ES (5.459 %)
MMA (0.0383)	G-CMA-ES (3320)	MMA (23.958 %)

TABLA 5.2: Relación de orden de los algoritmos en la optimización del *bend* según los criterios de (i) desempeño, (ii) convergencia y (iii) M_{nd} .

Por último, sin contar al MMA, los algoritmos produjeron pequeñas “islas” (regiones no conexas entre las guía de entrada y la guía de salida). En la Sección 5.2 se utilizó el diseño mejor optimizado para experimentar quitando estos elementos. Sorprendentemente, estos resultados siguieron teniendo una transmitancia mayor a 90 %. Incluso si trabajamos en longitudes de onda en el rango de $1500\text{nm} - 1600\text{nm}$ los resultados se mantienen similares aún cuando pueda ocurrir errores de erosión o dilatación. De este modo, se comprobó que el diseño obtenido es eficiente y robusto no solo a errores de fabricación, sino que también es flexible en la longitud de onda con la que puede trabajar.

5.6 Discusión de Resultados del WDM

Para poder entender nuestros resultados buscamos una referencia del estado del arte en la optimización de un WDM. Así, encontramos que [Piggott et al. \(2015\)](#) optimizaron un WDM con una región de diseño de $2.8\mu\text{m} \times 2.8\mu\text{m}$ trabajando a 1300nm y 1550nm . En su trabajo muestran los resultados en gráficas por lo cual es difícil encontrar los valores exactos de transmitancia reportados. Sin embargo, en [Sigmund et al. \(2016\)](#) se detalla que el diseño obtenido posee $T_{1310}^{(1)} = 0.8377$ y $T_{1550}^{(2)} = 0.8076$. También existen trabajos como los de [Christiansen y Sigmund \(2021b\)](#) y [Zhang et al. \(2021\)](#) que optimizan un WDM; pero, realizaron las simulaciones en 2D por lo cual la comparación no es justa.

Como se observa en la Sección 5.4, el diseño del WDM mejor optimizado en este trabajo posee $T_{1300}^{(1)} = 0.9385$ y $T_{1550}^{(2)} = 0.9503$ y tras eliminar las regiones no conexas obtiene $T_{1300}^{(1)} = 0.8938$ y $T_{1550}^{(2)} = 0.9503$. Además, al realizar el análisis en un rango de longitudes de onda de $1250\text{nm} - 1600\text{nm}$ obtuvimos un comportamiento similar al logrado en [Piggott et al. \(2015\)](#). De este modo, aparentemente hemos obtenido un diseño que supera el estado del arte en simulaciones 3D. Sin embargo, es necesario fabricar estos diseños para corroborar los resultados de las simulaciones.

Por otro lado, centrándonos en los resultados del MMA, tenemos que al igual que sucedió con el *bend*, el algoritmo no logró llegar a diseños que al menos conecten las guías de onda, ver ???. Primero, se consideró la posibilidad de haber algún error en el cálculo de la gradiente; sin embargo, otros algoritmos si han logrado encontrar diseños funcionales tanto del *bend* como del WDM. Así, este escenario es poco probable. Además, para la configuración del algoritmo se utilizó como guía un tutorial de MEEP ([Oskooi et al., 2010](#)), por lo que un error de configuración también parece sensato de descartarse. Probablemente, el algoritmo simplemente requería de una cantidad mayor de iteraciones.

Respecto al desempeño de los demás algoritmos, notamos que se cumplía una tendencia similar al caso del *bend* respecto al desempeño de los algoritmos: MMA tuvo el peor desempeño con dispositivos con geometrías sin forma definida y no funcionales (??), G-CMA-ES obtuvo los siguientes mejores resultados, pero incluía un gran porcentaje de región gris en sus diseños y regiones puntiagudas. Finalmente, omitiendo el valor de semilla de 128, L-BFGS-B, G-CMA-ES y G-PSO obtuvieron desempeños similares. Sin embargo, en promedio L-BFGS-B fue el único algoritmo que encontró geometrías adecuadamente binarizadas. De esta manera, se intuye que era necesario más iteraciones en la etapa de optimización para asegurar un menor porcentaje de gris.

Particularmente, si bien todos los algoritmos (a excepción del MMA) lograron conectar una guía de salida con la guía de entrada, solo una instancia del L-BFGS-B y del G-PSO consiguieron diseños que conectaron ambas guías de salida de manera funcional, las demás optimizaciones prefirieron mantener la guía de salida superior desconexa y buscar alcanzar una transmisione cercana a 1 en el brazo inferior a 1550nm . Así, parece sensato concluir que la definición de nuestra función objetivo aún carece de un término que incentive en mayor medida que ambas guías de salida queden conectadas.

En síntesis, se observó que L-BFGS-B fue la única opción que logró producir un diseño adecuadamente binarizado, con elevadas transmisiones y facilidad de fabricación.

A partir de las observaciones realizadas se elaboró una relación de orden entre los algoritmos de acuerdo a los criterios: (i) desempeño (mayor valor de F_{obj}), (ii) convergencia (más rápida, promedio de las tres etapas de optimización) y (iii) M_{nd} promedio (menor porcentaje de gris). Esto se puede encontrar en la Tabla 5.3.

Desempeño	Convergencia	M_{nd}
L-BFGS-B (0.9465)	MMA (168)	L-BFGS-B (1.237 %)
G-PSO (0.8005)	L-BFGS-B (946)	G-PSO (2.224 %)
G-GA (0.7176)	G-GA (2137)	G-GA (4.300 %)
G-CMA-ES (0.6427)	G-PSO (3103)	G-CMA-ES (7.977 %)
MMA (0.4594)	G-CMA-ES (3320)	MMA (23.898 %)

TABLA 5.3: Relación de orden de los algoritmos en la optimización del WDM según los criterios de (i) desempeño, (ii) convergencia y (iii) M_{nd} .

En este capítulo hemos desarrollado la propuesta presentada en el Capítulo 4. Primero, se realizó una descripción de los resultados de la optimización del *bend* y se analizó al mejor diseño obtenido. Luego, se practicó la misma estrategia sobre los resultados del WDM. Finalmente, hemos realizado una discusión crítica sobre estos resultados. Así, como hemos podidos observar, hemos conseguido diseños eficientes y robustos tanto para un *bend* como para un WDM siguiendo la estrategia de optimización planteada.

Capítulo 6

Conclusiones y Trabajos Futuros

6.1 Conclusiones

- Siguiendo la estrategia planteada, se logra diseñar tanto un *bend* como un WDM con transmitancias mayores al 90 % y con diseños resilientes a errores de dilatación y erosión. Además, el *bend* optimizado logra funcionar con una transmitancia de alrededor de 90 % en el rango de 1500nm a 1600nm. Por otro lado, el WDM optimizado muestra un comportamiento sin cambios bruscos al trabajar entre 1250nm a 1600nm.
- La optimización topológica facilita la búsqueda de los diseños robustos ante errores de fabricación. Sin embargo, parece imprescindible el uso de algoritmos de primer orden al utilizar esta estrategia. Caso contrario, la convergencia a diseños compactos avanza a un ritmo muy lento.
- Para el caso del *bend*, definir la función objetivo como maximizar la transmitancia en una sola longitud de onda permite obtener diseños que funcionan bien incluso en longitudes de onda cercanas. Por otro lado, la función objetivo empleada para el WDM logra producir buenos resultados, mas en promedio esto no es así. Es necesario incorporar un término que incentive que el diseño termine con todas las guías de onda conectadas.
- Para la optimización de un *bend* y WDM con una región de diseño de $2\mu m \times 2\mu m$, el algoritmo MMA converge rápidamente y se estanca en diseños no funcionales y difíciles de fabricar. Así, parece necesario un mayor estudio al aplicar este algoritmo en estos dos casos.

- Excluyendo los resultados del MMA, el algoritmo L-BFGS-B ha mostrado superioridad en términos de desempeño, convergencia y porcentaje de regiones grises. Parece sensato comenzar futuras investigaciones aplicando este algoritmo.
- El algoritmo G-CMA-ES ha mostrado mejores resultados que su contraparte que no usa la información de la gradiente. Sin embargo, posee la peor convergencia de los algoritmos estudiados, bajos valores del FOM y produce diseños no correctamente binarizados. De este modo, el algoritmo no parece ser la mejor opción a utilizar en optimización topológica.
- En promedio, el algoritmo G-PSO muestra mejores resultados que G-GA en términos de desempeño y porcentaje de regiones grises. Además, ambos algoritmos muestran un desempeño mucho mejor que sus contrapartes que no usan la información de la gradiente.

6.2 Trabajos Futuros

Próximamente, se espera concretar la fabricación de los diseños optimizados para contrastar los resultados. Por otro lado, con el objetivo de obtener incluso mejores diseños, hay una variedad de investigaciones relacionadas que pueden ayudar:

- Para imponer restricciones de conectividad en los diseños se presentan como potenciales candidatos el incluir: (i) restricciones de energía ([Zhang et al., 2021](#)) o (ii) restricciones de temperatura ([Li et al., 2016](#)).
- Para acelerar el proceso de optimización es posible entrenar una red neuronal para obtener los resultados de la simulación de un diseño en menos de un segundo. Esto permitiría evaluar un proceso de optimización más extenso o, incluso, usar la misma red para predecir un diseño óptimo ([Liu et al., 2018](#), [Peurifoy et al., 2018](#)).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Akimoto, Y. and Hansen, N. (2021). Cma-es and advanced adaptation mechanisms. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*, GECCO '21, page 636–663, New York, NY, USA. Association for Computing Machinery.
- Anderson, E., González, J., Gazman, A., Azevedo, R., and Bergman, K. (2018). Optically connected and reconfigurable gpu architecture for optimized peer-to-peer access. In *Proceedings of the International Symposium on Memory Systems*, MEMSYS '18, page 257–258, New York, NY, USA. Association for Computing Machinery.
- Angeris, G., Vučković, J., and Boyd, S. (2021). Heuristic methods and performance bounds for photonic design. *Opt. Express*, 29(2):2827–2854.
- Bogaerts, W. and Chrostowski, L. (2018). Silicon photonics circuit design: Methods, tools and challenges. *Laser & Photonics Reviews*, 12(4):1700237.
- Byrd, R., Lu, P., Nocedal, J., and Zhu, C. (1995). A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 16:1190–1208.
- Campbell, S. D., Sell, D., Jenkins, R. P., Whiting, E. B., Fan, J. A., and Werner, D. H. (2019). Review of numerical optimization techniques for meta-device design [invited]. *Opt. Mater. Express*, 9(4):1842–1863.

- Christiansen, R. E. and Sigmund, O. (2021a). Compact 200 line matlab code for inverse design in photonics by topology optimization: tutorial. *J. Opt. Soc. Am. B*, 38(2):510–520.
- Christiansen, R. E. and Sigmund, O. (2021b). Inverse design in photonics by topology optimization: tutorial. *J. Opt. Soc. Am. B*, 38(2):496–509.
- Demidova, L. A. and Gorchakov, A. V. (2020). Research and study of the hybrid algorithms based on the collective behavior of fish schools and classical optimization methods. *Algorithms*, 13(4).
- Elsawy, M. M., Lanteri, S., Duvigneau, R., Fan, J. A., and Genevet, P. (2020). Numerical Optimization Methods for Metasurfaces. *Laser and Photonics Reviews*, 14(10):1–17.
- Glick, M., Kimmerling, L. C., and Pfahl, R. C. (2018). A Roadmap for Integrated Photonics. *Optics and Photonics News*, 29(3):36.
- Gregory, M. D., Martin, S. V., and Werner, D. H. (2015). Improved Electromagnetics Optimization. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 57(june):48–59.
- Hammond, A. M., Oskooi, A., Johnson, S. G., and Ralph, S. E. (2020). Robust topology optimization of foundry-manufacturable photonic devices: An open-source fDTD toolbox. In *Frontiers in Optics / Laser Science*, page FTh1C.4. Optical Society of America.
- Hammond, A. M., Slaby, J., Saha, G., and Ralph, S. E. (2021). Robust topology optimization for foundry-photonics inverse design: Examining compact and arbitrary power splitters. In *2021 European Conference on Optical Communication (ECOC)*, pages 1–4.
- Hansen, N. (2016). The CMA Evolution Strategy: A Tutorial.
- Hansen, N., Akimoto, Y., and Baudis, P. (2019). CMA-ES/pycma on Github. Zenodo, DOI:10.5281/zenodo.2559634.

- Huang, H. and Ouyang, Z. (2018). General method for eliminating wave reflection in 2d photonic crystal waveguides by introducing extra scatterers based on interference cancellation of waves. *Optics Communications*, 406:260–270. Optoelectronics and Photonics Based on Two-dimensional Materials.
- Hughes, T. W. and Fan, S. (2016). Plasmonic circuit theory for multiresonant light funneling to a single spatial hot spot. *Nano Letters*, 16(9):5764–5769.
- Johnson, S. G. (2022). The nlopt nonlinear-optimization package.
- Kochenderfer, M. J. and Wheeler, T. A. (2019). *Algorithms for Optimization*. The MIT Press.
- Kudyshev, Z. A., Kildishev, A. V., Shalaev, V. M., and Boltasseva, A. (2020). Machine learning-assisted global optimization of photonic devices. *Nanophotonics*, 10(1):371–383.
- Lazarov, B. S., Wang, F., and Sigmund, O. (2016). Length scale and manufacturability in density-based topology optimization. *Archive of Applied Mechanics*, 86(1-2):189–218.
- Li, N., Ho, C. P., Wang, I.-T., Pitchappa, P., Fu, Y. H., Zhu, Y., and Lee, L. Y. T. (2021). Spectral imaging and spectral lidar systems: moving toward compact nanophotonics-based sensing. *Nanophotonics*, 10(5):1437–1467.
- Li, Q., Chen, W., Liu, S., and Tong, L. (2016). Structural topology optimization considering connectivity constraint. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 54(4):971–984.
- Liu, D., Tan, Y., Khoram, E., and Yu, Z. (2018). Training deep neural networks for the inverse design of nanophotonic structures. *ACS Photonics*, 5(4):1365–1369.
- Lukas Chrostowski (2010). *Silicon Photonics Design: From Device to System*.

- Malheiros-Silveira, G. N. and Delalibera, F. G. (2020). Inverse design of photonic structures using an artificial bee colony algorithm. *Applied Optics*, 59(13):4171.
- Molesky, S., Lin, Z., Piggott, A. Y., Jin, W., Vucković, J., and Rodriguez, A. W. (2018). Inverse design in nanophotonics. *Nature Photonics*, 12(11):659–670.
- Oskooi, A. F., Roundy, D., Ibanescu, M., Bermel, P., Joannopoulos, J. D., and Johnson, S. G. (2010). Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. *Computer Physics Communications*, 181(3):687–702.
- Peurifoy, J., Shen, Y., Jing, L., Yang, Y., Cano-Renteria, F., DeLacy, B. G., Joannopoulos, J. D., Tegmark, M., and Soljačić, M. (2018). Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks. *Science Advances*, 4(6):eaar4206.
- Piggott, A. Y., Lu, J., Lagoudakis, K. G., Petykiewicz, J., Babinec, T. M., and Vučković, J. (2015). Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer. *Nature Photonics*, 9(6):374–377.
- Piggott, A. Y., Petykiewicz, J., Su, L., and Vučković, J. (2017). Fabrication-constrained nanophotonic inverse design. *Scientific Reports*, 7(1):1–7.
- Prosopio-Galarza, R., De La Cruz-Coronado, J., Hernandez-Figueroa, H. E., and Rubio-Noriega, R. (2019). Comparison between optimization techniques for Y-junction devices in SOI substrates. *Proceedings of the 2019 IEEE 26th International Conference on Electronics, Electrical Engineering and Computing, INTERCON 2019*, pages 1–4.
- Schneider, P. I., Garcia Santiago, X., Soltwisch, V., Hammerschmidt, M., Burger, S., and Rockstuhl, C. (2019). Benchmarking Five Global Optimization Approaches for Nano-optical Shape Optimization and Parameter Reconstruction. *ACS Photonics*, 6(11):2726–2733.

- Shen, Y., Harris, N. C., Skirlo, S., Prabhu, M., Baehr-Jones, T., Hochberg, M., Sun, X., Zhao, S., Larochelle, H., Englund, D., and Soljačić, M. (2017). Deep learning with coherent nanophotonic circuits. *Nature Photonics*, 11(7):441–446.
- Shen, Y., Meng, X., Cheng, Q., Rumley, S., Abrams, N., Gazman, A., Manzhosov, E., Glick, M. S., and Bergman, K. (2019). Silicon photonics for extreme scale systems. *J. Lightwave Technol.*, 37(2):245–259.
- Sigmund, O., Jensen, J. S., and Frandsen, L. H. (2016). On nanostructured silicon success. *Nature Photonics*, 10(3):142–143.
- Song, W. and Xie, K. (2008). Optimal design of a multi-mode interference splitter based on SOI. *Optoelectronics Letters*, 4(2):92–95.
- Su, L., Piggott, A. Y., Sapra, N. V., Petykiewicz, J., and Vučković, J. (2018). Inverse Design and Demonstration of a Compact on-Chip Narrowband Three-Channel Wavelength Demultiplexer. *ACS Photonics*, 5(2):301–305.
- Su, L., Vercruyse, D., Skarda, J., Sapra, N. V., Petykiewicz, J. A., and Vučković, J. (2020). Nanophotonic inverse design with SPINS: Software architecture and practical considerations. *Applied Physics Reviews*, 7(1).
- Svanberg, K. (1987). The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(2):359–373.
- Svanberg, K. (2002). A class of globally convergent optimization methods based on conservative convex separable approximations. *SIAM Journal on Optimization*, pages 555–573.
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S. J., Brett, M.,

- Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A. R. J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C. J., Polat, İ., Feng, Y., Moore, E. W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E. A., Harris, C. R., Archibald, A. M., Ribeiro, A. H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P., and SciPy 1.0 Contributors (2020). SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, 17:261–272.
- Vuckovic, J. (2019). From inverse design to implementation of practical (quantum) photonics (Conference Presentation). In Soci, C., Sheldon, M. T., and Agio, M., editors, *Quantum Nanophotonic Materials, Devices, and Systems 2019*, volume 11091. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- Yang, J. and Fan, J. A. (2017). Topology-optimized metasurfaces: impact of initial geometric layout. *Opt. Lett.*, 42(16):3161–3164.
- Zhang, G., Xu, D.-X., Grinberg, Y., and Liboiron-Ladouceur, O. (2021). Topological inverse design of nanophotonic devices with energy constraint. *Opt. Express*, 29(8):12681–12695.
- Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P., and Nocedal, J. (1997). Algorithm 778: L-bfgs-b: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Trans. Math. Softw.*, 23(4):550–560.