

UNIVERSIDAD DE INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

CARRERA DE CIENCIA DE LA COMPUTACIÓN



**Comparación de Algoritmos de Optimización usando
Computación de Alto Rendimiento en Dos Dispositivos
Nanofotónicos: *bend-90°* y *2-splitter***

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

22 de octubre de 2021

Índice general

	Pág.
CAPÍTULO 1 Motivación y Contexto	1
1.1 Introducción	2
1.2 Descripción del Problema	5
1.3 Justificación	6
1.4 Objetivos	7
1.5 Aportes	7
CAPÍTULO 2 Marco Teórico	8
CAPÍTULO 3 Trabajos relacionados	9
3.1 Parametrización	9
3.2 Definición de la FOM	11
3.3 Optimización	12
3.4 Restricciones de fabricación	13

Índice de figuras

1.1	Diseños tradicionales y obtenidos a partir de diseño inverso de un <i>bend-90°</i> y <i>2-splitter</i>	4
1.2	<i>Bend-90</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> . . .	5

Capítulo 1

Motivación y Contexto

Durante los últimos años distintas áreas de la industria han mostrado interés en la fotónica por el elevado ancho de banda que ofrece en comunicaciones. Sin darnos cuenta, esta tecnología se ha ido integrando a nuestro día a día comenzando con el éxito de los cables ópticos. Probablemente, la creciente popularidad de esta área es debido a que el siguiente paso lógico para mejorar el rendimiento de los dispositivos electrónicos, los cuales están llegando a sus límites físicos, parece ser la incorporación o acondicionamiento de estos con dispositivos fotónicos ([Glick et al., 2018](#), [Lukas Chrostowski, 2010](#)). Sin embargo, la convergencia de estas tecnologías aún presenta muchos desafíos. Particularmente, existen dispositivos como el *bend-90°* y *2-splitter* que aún no logran aplicación industrial aún cuando son fundamentales para una variedad de circuitos fotónicos ([Molesky et al., 2018](#)).

La dificultad de encontrar aplicación industrial en parte se debe que al trabajar en la escala de nanómetros los diseños intuitivos han mostrado un bajo rendimiento y poca flexibilidad para incorporar restricciones de fabricación. Debido a ello se comenzó a aplicar el diseño inverso. Con esta metodología primero se define las propiedades deseadas de un dispositivo y luego se busca una geometría que las satisfaga. De esta manera se ha logrado obtener diseños no intuitivos pero con un buen rendimiento ([Su et al., 2020](#)).

El diseño inverso ha recibido mucha atención en fotónica durante los últimos 20 años ([Molesky et al., 2018](#)). Trabajos como los de [Su et al. \(2020\)](#) han logrado encontrar diseños de un *bend-90°* y *2-splitter* con un buen rendimiento de acuerdo a simulaciones. Luego, investigaciones como las de [Su et al. \(2018\)](#) y [Piggott et al. \(2017\)](#) intentan incorporar restricciones de fabricación para obtener dispositivos que al fabricarse mantengan

un buen rendimiento. No obstante, la búsqueda de estos diseños suele realizarse aplicando algoritmos cuya selección y configuración es mayormente debido a un tedioso proceso de prueba y error. Así, han surgido estudios como los de [Elsawy et al. \(2020\)](#), [Gregory et al. \(2015\)](#), [Schneider et al. \(2019\)](#) quienes buscan comparar distintos algoritmos de optimización en el diseño inverso de dispositivos fotónicos.

Aún cuando una cantidad considerable de investigaciones están usando el diseño inverso para optimizar dispositivos fotónicos, existe una carencia de estudios de comparación de algoritmos de optimización aplicados a un *bend-90°* y *2-splitter*. Es importante la realización de ellos pues cada dispositivo es una clase distinta de problema ([Molesky et al., 2018](#)). Así, el objetivo principal de este estudio es cubrir esta brecha evaluando el rendimiento y convergencia de algoritmos de optimización usados para estos dispositivos.

El presente trabajo 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 resolver el problema, define los objetivos y señala los aportes del trabajo.

El capítulo 2 desarrolla conceptos y terminología necesaria para entender las siguientes capítulos.

El capítulo 3 describe trabajos relacionados del estado del arte.

1.1 Introducción

La fotónica está atrayendo el interés de la industria debido a su potencial en términos de escalabilidad y los beneficios de costo-eficiencia. Este potencial es evidente, por ejemplo, con los siguientes tres puntos. Primero, si se quiere mantener la tendencia que cada 10 años se mejore en un factor de 1000 el rendimiento de los sistemas electrónicos, entonces parece ser indispensable la convergencia de estos con sistemas fotónicos ([Glick](#)

et al., 2018). Segundo, existe una inversión billonaria en la fabricación de transistores cuyos procesos se están comenzando a lograr adaptar para fabricar circuitos fotónicos (Lukas Chrostowski, 2010). Tercero, el elevado ancho de banda que ofrece en comunicaciones digitales ha despertado el interés de cinco grandes sectores de producción: i) centrales de datos, ii) internet de las cosas, iii) sector automotriz, iv) sensores, v) fotónica RF (Glick et al., 2018, Lukas Chrostowski, 2010).

Los dispositivos fotónicos se utilizan en grandes cantidades en los circuitos fotónicos integrados (Lukas Chrostowski, 2010). Estos trabajan en la escala de nanómetros y son diseñados para funcionar bajo ciertas especificaciones. Así, para cumplir los requerimientos deseados existen dos estrategias comunes: diseño tradicional y diseño inverso (Molesky et al., 2018).

En el diseño tradicional se define el dispositivo con geometrías simples que permiten obtener funciones analíticas de sus propiedades físicas. Esto se realiza para poder optimizar la función obtenida a partir de los parámetros que la definan. Dicha optimización se suele ejecutar haciendo un barrido de los parámetros, con algoritmos genéticos o usando *particle swarm optimization*. Es un enfoque simple, pero que ha obtenido buenos resultados. Sin embargo, existen tres grandes inconvenientes con este planteamiento. Primero, solo estamos explorando una pequeña fracción de todos los posibles diseños. Segundo, por lo general no es conocido el límite de rendimiento del dispositivo. Tercero, al trabajar en la escala de nanómetros, existen casos como el *bend-90°* y *2-splitter* que han presentado un bajo rendimiento con diseños tradicionales (Molesky et al., 2018, Su et al., 2020).

En el diseño inverso se busca hacer una mayor exploración de todos los posibles diseños. Para ello, ya no nos limitamos a solo usar diseños intuitivos, ver figura 1.1. Ahora, definimos geometrías arbitrarias y usamos simulaciones computacionales para determinar las propiedades físicas del dispositivo (Molesky et al., 2018, Su et al., 2020). Este enfoque

ha logrado conseguir mejores resultados que los obtenidos por el diseño tradicional ([Molesky et al., 2018](#), [Su et al., 2018](#)). Sin embargo, este planteamiento viene acompañado de nuevos desafíos.



(a) *Bend-90°* con diseño tradicional



(b) *Bend-90°* obtenido con diseño inverso. Extraído de ([Su et al., 2020](#))



(c) *2-splitter* con diseño tradicional



(d) *2-splitter*° 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-90°* y *2-splitter*

1.2 Descripción del Problema

Para poder calcular las propiedades físicas de un dispositivo (e.g. campo eléctrico, transmitancia) se debe resolver las ecuaciones de Maxwell. Así, con el objetivo de evaluar las propiedades de cualquier geometría se suele utilizar métodos numéricos como elementos finitos (FEM) y diferencias finitas en el dominio de tiempo (FDTD) (Schneider et al., 2019). Con estos planteamientos se selecciona una región rectangular a optimizar y se la divide en $n \times m$ píxeles como si fuera una imagen, ver Figure 1.2. Luego, a cada píxel se le asocia el número 0 o 1. Típicamente, cero representa la presencia de SiO_2 en la ubicación del píxel y uno la presencia de Si (Molesky et al., 2018).

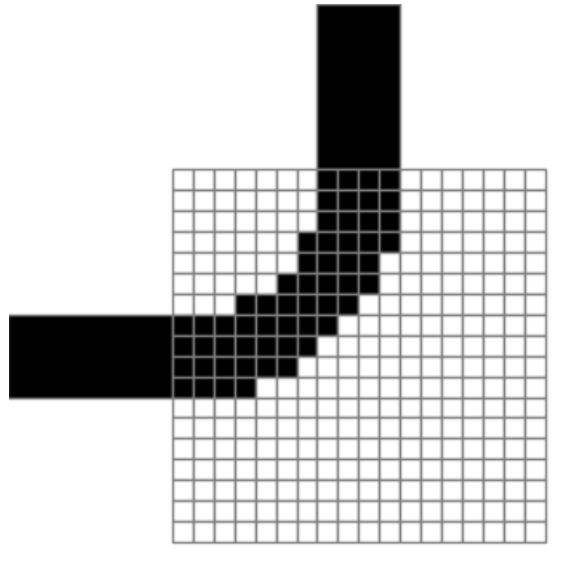


FIGURA 1.2: *Bend-90* con una región de diseño discretizada en 18×18 píxeles. Cada píxel negro representa la presencia de Si y cada píxel blanco de SiO_2

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 and Delalibera (2020) parametrizaron $2^{10 \times 10}$ posibles diseños.

Por otro lado, [Su et al. \(2020\)](#) con el objetivo de fabricar un dispositivo con buen rendimiento, configuró un espacio de búsqueda de $2^{34 \times 34}$ opciones. Así, se presentan algunas dificultades con el diseño inverso:

1. Es imposible evaluar todas los posibles diseños.
2. Las simulaciones computacionales son muy costosas ([Kudyshev et al., 2020](#)).
3. El espacio de búsqueda es altamente no convexo ([Su et al., 2018](#)).
4. No todos los diseños son fabricables ([Su et al., 2020](#)).
5. Cada dispositivo es una clase distinta de problema ([Molesky et al., 2018](#)).

De este modo, existe una demanda crítica de un *framework* capaz de optimizar dispositivos con un elevado número de parámetros dentro de un espacio de búsqueda no convexo ([Kudyshev et al., 2020](#)). Este es un problema muy grande, por ello en la presente tesis nos centraremos en optimizar un *bend-90°* y un *2-splitter*.

1.3 Justificación

Deste el punto de vista industrial, el *bend-90°* y *2-splitter* se han escogido debido a que han sido estudiados usando diseño inverso desde el 2004, pero aún no han encontrado aplicación masiva en la industria ([Molesky et al., 2018](#)).

Desde el punto de vista computacional, este problema es interesante porque ya hay estrategias computacionales conocidas para resolverlo, desde algoritmos evolutivos ([Hansen, 2016](#)) hasta redes neuronales ([Goodfellow et al., 2015](#)) y *depth learning* ([Malkiel et al., 2018](#)). Además, debido al alto costo computacional de las simulaciones ([Schneider et al., 2019](#)), el trabajo requiere de computación de alto desempeño. Así, es probable que se pueda obtener buenos resultados en la investigación aplicando el conocimiento ya existente en computación.

1.4 Objetivos

- Evaluar y comparar el rendimiento y la convergencia de algoritmos de optimización usadas para optimizar un *bend-90°* y *2-splitter* usando computación de alto rendimiento.
- Fabricar el diseño con mejor rendimiento que se obtenga del *bend-90°* y del *2-splitter* para poder comparar las simulaciones computacionales con las mediciones físicas.

1.5 Aportes

Este trabajo busca brindar una comparativa de las técnicas de optimización más relevantes que se aplican para optimizar un *bend-90°* y un *2-splitter* cuando estos son parametrizados con un elevado número de variables.

Capítulo 2

Marco Teórico

El marco teórico deberá contener sólo la teoría necesaria para que el lector pueda comprender su propuesta. No sea muy detallista ni específico, intente resumir y colocar los conceptos más importantes. (Entre 2 a 3 páginas)

Capítulo 3

Trabajos relacionados

Dentro de las investigaciones que buscan optimizar un dispositivo fotónico usando diseño inverso, podemos identificar cuatro grandes pasos que estos trabajos siguen: i) parametrización, ii) definición de la figura de mérito (FOM), iii) optimización, iv) restricciones de fabricación.

TODO: Para la siguiente entrega pienso agregar el marco teórico antes de este capítulo, describir estos cuatro pasos y otros conceptos necesarios para entender el paper. Así, este capítulo seguiría la misma estructura, pero ya solo se centraría en mostrar las distintas estrategias seguidas por otros papers en cada paso. Creo que no debería ser un gran cambio por como lo he escrito.

3.1 Parametrización

En esta etapa se busca parametrizar la región de diseño con el objetivo de conseguir distintos dispositivos conforme variamos estos parámetros. Tres estrategias conocidas son: i) división por segmentos, ii) división por píxeles, iii) división por conjuntos de nivel.

1. División por segmentos

[Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) utiliza esta estrategia para dividir un rectángulo de $2\mu m \times 1.5\mu m$ en 13 rectángulos verticales idénticos que particionan la región de diseño. Luego, parametriza esta región con 13 variables que representan la altura de cada rectángulo. Finalmente, centra cada rectángulo verticalmente y une los extremos de rectángulos consecutivos con un recta. De esta manera, se obtienen diseños

compactos y con simetría respecto al eje X . Esta región es unida a tres guías de onda fijas de $0.5\mu m$ para formar un *2-splitter* de un espesor de $2\mu m$.

2. División por píxeles

[Su et al. \(2020\)](#) divide una región cuadrada de $2.5\mu m \times 2.5\mu m$ en píxeles de $40nm \times 40nm$ y luego lo une a guías de onda de $40nm$ para diseñar un *bend-90°*. A cada píxel le asocia un valor dado por la fórmula 3.1:

$$\varepsilon(x, y) = \varepsilon_{Si} + (1 - \lambda_{x,y})\varepsilon_{SiO_2} \quad \lambda_{x,y} \in [0, 1], \lambda_{x,y} \in \mathbb{R} \quad (3.1)$$

Donde $\varepsilon_{Si} = 3.48$ es la permitividad del Si y $\varepsilon_{SiO_2} = 1.44$ es la permitividad del SiO_2 . Con esta ecuación [Su et al. \(2020\)](#) mapea el intervalo $[0, 1]$ con el intervalo $[1.44, 3.48]$. Esto se realiza para determinar la permitividad que hay en la ubicación del píxel y poder simular las ecuaciones de Maxwell en el dispositivo. Con esta parametrización obtenemos una cantidad infinita de diseños, mas solo nos interesan aquellos donde $\lambda_{x,y}$ es entero, pues en caso contrario un píxel se mapea a la permitividad de un material desconocido lo cual lo volvería infabricable.

3. División por conjuntos de nivel

[Piggott et al. \(2017\)](#) diseña un *3-splitter* dividiendo una región de $3.8\mu m \times 2.5\mu m$ en píxeles de $40nm \times 40nm$. A cada píxel le asocia una permitividad dada por la siguiente fórmula:

$$\varepsilon(x, y) = \begin{cases} \varepsilon_{Si} & \text{si } \phi(x, y) \leq 0 \\ \varepsilon_{SiO_2} & \text{si } \phi(x, y) > 0 \end{cases}$$

Así, [Piggott et al. \(2017\)](#) puede definir ϕ como una función continua y obtener un diseño fabricable.

TODO: Insertar imágenes para que se entienda mejor.

Las distintas estrategias mostradas tienen sus propias características. [Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) utiliza una parametrización que le asegura simetría y regiones compactas, pero tiene un espacio de búsqueda más reducido que las otras opciones. Por otro lado, [Su et al. \(2020\)](#) usa píxeles para trabajar con un espacio de búsqueda más grande a cambio de poder parametrizar diseños no fabricables. De manera similar [Piggott et al. \(2017\)](#) usa píxeles, pero mantiene la parametrización del dispositivo con curvas suaves.

3.2 Definición de la FOM

La FOM es la función que nos permite determinar que diseños son mejores. Existen distintas estrategias para definirla, por ejemplo:

- [Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) busca optimizar la transmitancia.
- [Su et al. \(2020\)](#) muestra tres estrategias:
 1. Definir un valor deseado de transmitancia.
 2. Maximizar la transmitancia en una guía de onda y minimizar en la otra para una longitud de onda y lo contrario para otra longitud de onda.
 3. Combinar la anterior definición considerando la fase del dispositivo.
- [Piggott et al. \(2017\)](#) busca trabajar con 3 longitudes de onda y que con cada longitud la transmitancia se maximice en una guía de onda de salida y se minimice en las otras.

TODO: Tal vez escribirlo con fórmulas para dejarlo más claro.

3.3 Optimización

En la etapa de optimización la forma a proceder depende de la parametrización realizada. Así, tenemos:

- [Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) define un rango en el que puede variar cada altura con lo cual limita el espacio de búsqueda. Luego, por separado, utiliza tres algoritmos para explorar los posibles diseños: i) *Particle Swarm Optimization*, ii) *Shrinking Box algorithm*, iii) *Steepest Ascent algorithm*. Para obtener el valor de la FOM utiliza como simulador ANSYS Lumerical FDTD.
- [Su et al. \(2020\)](#) ya cuenta con una parametrización donde cada píxel tiene un rango definido de valores. Pero, para asegurar el obtener un diseño fabricable divide la optimización en dos pasos:
 1. Optimización continua: Se varía el valor de λ_i en el intervalo $[0, 1]$ sin importar si se obtiene dispositivos no fabricables.
 2. Optimización discreta: Se considera el resultado de la optimización continua como punto inicial, se comienza a optimizar, pero se va aplicando transformaciones que permitan que cada *pixel* vaya convergiendo a un valor entero.

TODO: Creo que aquí pondré la fórmula de la transformación usada por Su et al. y alguna diferente usada en otro paper. En general, describir más sobre la optimización discreta.

Como algoritmo de optimización utiliza $L-BFGS-B$ y MMA . Las simulaciones son realizadas en SPINS.

- [Piggott et al. \(2017\)](#) trabaja sobre la función ϕ en un espacio de búsqueda no limitado. Luego, realiza la optimización con un algoritmo propio que está basado en *gradient-descent* y *line search*. De igual manera que [Su et al. \(2020\)](#), las simulaciones son realizadas en SPINS.

TODO: Aquí creo que agregaré una sección para hablar en más detalle sobre los algoritmos empleados en las optimizaciones y la configuración que usan. Para ello pienso basarme principalmente en los trabajos de Scheneide, Elsawy y Gregory

3.4 Restricciones de fabricación

El diseño obtenido por la fabricación por lo general aún debe pasar por una etapa donde se tenga en consideración aspectos de fabricación para que los dispositivos fabricados tengan un buen rendimiento al fabricarse. Así, tenemos:

- [Prosopio-Galarza et al. \(2019\)](#) busca establecer un rango válido que deberían tener los ángulos formados entre rectángulos consecutivos.
- [Su et al. \(2020\)](#) se aseguró que el tamaño de los píxeles fuera más grande que el mínimo tamaño que se podía fabricar.
- [Piggott et al. \(2017\)](#) consideró que su diseño tenga un radio de curvatura mayor a un valor dado y que no haya presencia de huecos que superen un tamaño determinado.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Elsawy, M. M., Lanteri, S., Duvinneau, 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.
- Goodfellow, I. J., Vinyals, O., and Saxe, A. M. (2015). Qualitatively characterizing neural network optimization problems. *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015 - Conference Track Proceedings*.
- Gregory, M. D., Martin, S. V., and Werner, D. H. (2015). Improved Electromagnetics Optimization. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 57(june):48–59.
- Hansen, N. (2016). The CMA Evolution Strategy: A Tutorial.
- 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.
- 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.

- Malkiel, I., Mrejen, M., Nagler, A., Arieli, U., Wolf, L., and Suchowski, H. (2018). Plasmonic nanostructure design and characterization via Deep Learning. *Light: Science and Applications*, 7(1).
- 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.
- 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.
- 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., Vercruysse, 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).