

Приемы оптимизации алгоритмов строгого анализа связанных волн

А. И. Антонов, Г. И. Грейсх*^{*}, Е. Г. Ежов

Пензенский государственный университет архитектуры и строительства, 440028, Пенза, Россия

^{*}Контактный автор: Грейсх Григорий Исаевич, e-mail: subscribing_2002@mail.ru

Поступила 21 ноября 2023 г., доработана 05 марта 2024 г., принята в печать 10 апреля 2024 г.

Предложены три приема сокращения времени, необходимого для расчета одного значения или ряда значений дифракционной эффективности, полученных с помощью алгоритмов строгого анализа связанных волн. Это прием, использующий свойства матрицы Теплица, прием уменьшения количества переменных в функции коэффициентов Фурье и прием использования параллельных вычислений. На примерах задач по построению зависимостей дифракционной эффективности двухслойных двухрельефных пилообразных микроструктур с просветляющими покрытиями от угла падения излучения и температуры показано, что использование свойств матриц Теплица позволяет существенно сократить время расчета. Параллельные вычисления также сокращают время вычислений, но при этом используется больше оперативной памяти.

Ключевые слова: дифракционная эффективность, строгий анализ связанных волн, матрица Теплица, коэффициенты Фурье, параллельные вычисления, оперативная память.

Цитирование: Антонов А.И., Грейсх Г.И., Ежов Е.Г. Приемы оптимизации алгоритмов строгого анализа связанных волн. Вычислительные технологии. 2024; 29(5):17–29. DOI:10.25743/ICT.2024.29.5.003.

Введение

Строгий анализ связанных волн (rigorous coupled-wave analysis — RCWA) — широко используемый метод определения дифракционной эффективности (ДЭ) периодических структур [1, 2]. Напомним, что под ДЭ понимают отношение интенсивности излучения, дифрагированного в заданный дифракционный порядок, к интенсивности падающего на микроструктуру излучения. RCWA-метод основан на уравнениях Максвелла, поэтому результаты, полученные с помощью данного метода, могут считаться достоверными. RCWA предполагает, что периодическая структура бесконечна вдоль двух координатных осей и разбивается вдоль третьей координатной оси на однородные вдоль этой же оси тонкие решетчатые плиты, как, например, показано на рис. 1, где Λ_x и Λ_y — периоды структуры вдоль осей x и y , d — полная глубина структуры, \mathbf{k}_{inc} — волновой вектор падающего излучения [3]. Разбиение на решетчатые плиты происходит вдоль оси z . Соседние решетчатые плиты, как правило, отличаются друг от друга распределением диэлектрической проницаемости. В случае одномерной периодичности вдоль оси x следует рассматривать только плоскость $0xz$.

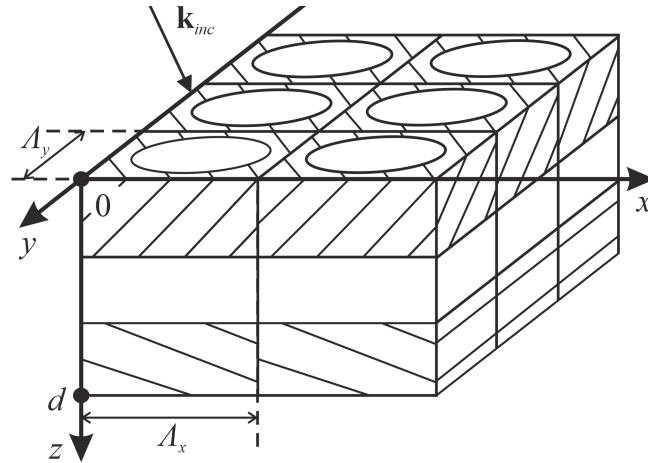


Рис. 1. Пример двумерной периодической микроструктуры [3]

Fig. 1. Example of a 2D periodic microstructure [3]

Само электромагнитное поле внутри каждого такого слоя структуры (включая области, откуда падает излучение и куда оно попадает после прохождения через структуру) представляется в идеале как совокупность бесконечного количества плоских волн (мод). Естественно, что при расчете может быть учтено лишь ограниченное количество таких плоских волн. Большее количество плоских волн обеспечивает в общем случае более точное соответствие математической модели поля реальной картине дифракции. При этом чем на большее количество решетчатых плит разбивается периодическая структура, тем ближе к ней используемая для анализа модель.

Таким образом, для получения достоверных результатов с помощью строгого анализа связанных волн необходимо использовать достаточно большие количества гармоник ряда Фурье (мод) N_m и тонких решетчатых плит, на которые разбивается рассматриваемая структура. В качестве параметра, определяющего количество плит разбиения, целесообразно использовать отношение оптической толщины одной плиты к длине волны падающего излучения $k = L/\lambda$.

При расчете ДЭ двухслойных двухрельефных микроструктур видимого и инфракрасного (ИК) диапазонов [4] оптимальное количество мод N_m в некоторых случаях могло достигать шестисот, а k может опускаться до 0.05. Очевидно, что чем меньше параметр k , тем на большее количество плит N_L разбиваются рельефы микроструктуры. Непосредственная реализация алгоритмов RCWA для большого количества мод и плит может привести к недостатку оперативной памяти или к недопустимо большому времени расчета, тем более что для получения оптимальных значений N_m и N_L требуется многократный пересчет ДЭ. С подобной проблемой сталкивались авторы данной статьи как в вышеупомянутой работе [4], так и в более ранних работах (см., например, [5, 6]).

В связи с вышеизложенным актуальным является уменьшение вычислительной сложности, в частности при решении задач оптимизации конструктивных параметров микроструктур с целью достижения максимальной ДЭ в пределах заданных спектрального диапазона и интервала углов падения излучения на микроструктуру. Аспектами, характеризующими вычислительную сложность, являются время, необходимое для расчета, и количество оперативной памяти, используемой вычислительной машиной. Ниже представлены несколько приемов, направленных на сокращение времени, требуемого для расчета ДЭ, и продемонстрирована их эффективность.

1. Приемы сокращения вычислительной сложности

Прием 1. Рассмотрим случай одномерной периодичности. Как показали наши исследования, при расчете отдельного значения ДЭ с использованием алгоритма, предложенного в [3], от 60 % времени и выше приходится на построение матриц коэффициентов Фурье в разложении диэлектрической проницаемости (ДП) структуры в ряд

$$E = \begin{bmatrix} \tilde{\varepsilon}_0 & \tilde{\varepsilon}_{-1} & \cdots & \tilde{\varepsilon}_{i_{\min}-i_{\max}} \\ \tilde{\varepsilon}_1 & \ddots & \tilde{\varepsilon}_{-1} & \vdots \\ \vdots & \tilde{\varepsilon}_1 & \ddots & \tilde{\varepsilon}_{-1} \\ \tilde{\varepsilon}_{i_{\max}-i_{\min}} & \cdots & \tilde{\varepsilon}_1 & \tilde{\varepsilon}_0 \end{bmatrix},$$

где $\tilde{\varepsilon}_i$ — i -й коэффициент Фурье, i_{\min} и i_{\max} — минимальное и максимальное значения номера учитываемых дифракционных порядков.

Такая большая часть времени на указанную операцию связана с тем, что, во-первых, алгоритм, предложенный в [3], предполагает, что каждый элемент матрицы E (даже повторяющийся) для каждого слоя рассчитывается отдельно, во-вторых, коэффициент Фурье, в общем случае, задается кусочной функцией и содержит экспоненты [2], и, в-третьих, иные сложные вычислительные операции, включенные в алгоритм, такие как матричное обращение и матричное произведение, хорошо оптимизированы в современных расчетных средах. Однако матрица E является матрицей Теплица [7], т. е. имеет повторяющиеся элементы, параллельные главной диагонали. Более того, для структур, не содержащих в себе материалов с комплексной ДП, справедливо, что коэффициенты Фурье, имеющие противоположный номер, являются комплексно-сопряженными [1], т. е. $\tilde{\varepsilon}_{-i} = \tilde{\varepsilon}_i^*$.

В связи с этим предлагается следующий прием для сокращения времени расчета. Непосредственно происходит вычисление только коэффициентов Фурье с положительными номерами (если рассматриваемая структура не имеет внутри себя материала с комплексной ДП). Каждый из коэффициентов рассчитывается один раз по заранее определенной формуле [8] и сохраняется в памяти либо как отдельный элемент, либо как элемент совокупности вычисленных коэффициентов (в данном случае происходит сохранение только такой совокупности целиком). Далее над сохраненными элементами проводится операция комплексного сопряжения; тем самым определяются, а затем аналогично сохраняются коэффициенты с отрицательными номерами.

Для построения матрицы E либо происходит отбор элементов из сохраненного пула с последующим их помещением на определенную позицию матрицы ((i, j) -позиция для коэффициента $\tilde{\varepsilon}_{i-j}$), либо можно воспользоваться готовыми процедурами составления матриц Теплица среды программирования, в которой работает пользователь. В конце реализации предлагаемого приема необходимо удалить из памяти вычислительной машины значения отдельно вычисленных коэффициентов Фурье. Данный прием можно использовать и для двумерной периодичности (рис. 1). В этом случае матрицами Теплица будут сами элементы матрицы E , которая сама уже не будет являться матрицей Теплица.

Прием 2. Вычислительная сложность при определении значения некоторой функции тем больше, чем больше у функции переменных. Каждый коэффициент Фурье в разложении ДП в ряд является функцией таких переменных, как номер коэффициента, номер слоя, период структуры, показатели преломления материалов структуры

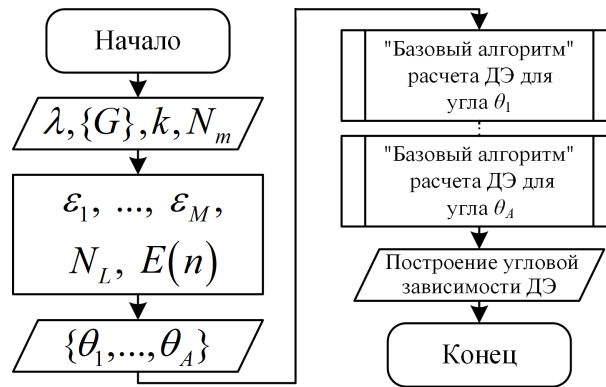


Рис. 2. Блок-схема алгоритма, использующего прием 2

Fig. 2. Flowchart of an algorithm using technique 2

и т. д. в зависимости от задачи. Если некоторые такие параметры не изменяются при определении значений ДЭ, то их можно заменить числами. Тем самым функция коэффициента Фурье будет иметь меньшее количество переменных, что снизит время на определение одного коэффициента и как следствие — время на вычисление каждого значения ДЭ в целом.

На рис. 2 изображена блок-схема алгоритма, где используется прием 2 для задачи построения одной угловой зависимости ДЭ структуры с одномерной периодичностью при заданной длине волны λ . Магнитная проницаемость равна единице. Блок “Базовый алгоритм” символизирует основную расчетную часть алгоритма выбранного подхода в рамках RCWA, например, описанного в статьях [2] или [9]. Здесь предполагается, что дисперсионные формулы для ДП всех M материалов в составе структуры $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_M)$ и формулы для коэффициентов Фурье включены в текст программы и заключены в прямоугольные блоки. Множество геометрических параметров структуры обозначено как $\{G\}$, а множество всех A углов, для которых нужно провести расчет, обозначено как $\theta_1, \dots, \theta_A$. Параметры в скобках после буквенного обозначения физической величины показывают, что данная физическая величина после выполнения операции на данном этапе представляет собой функцию от этих параметров, но не конкретное число или массив чисел.

Прием 3. Когда задачей является не нахождение единственного значения ДЭ при фиксированных параметрах, а определение целого ряда значений ДЭ, для экономии расчетного времени рационально воспользоваться приемом параллельного вычисления, когда одновременно происходит вычисление нескольких значений ДЭ на разных процессорных ядрах вычислительной машины. В этом случае очевидно, что процедура от каждого ядра будет забирать свою долю оперативной памяти. В итоге в среднем для решения всей задачи ее потребуется больше, нежели при задействовании только одного ядра.

Для задач по определению ряда значений ДЭ, для которых не меняются ни форма структуры, ни ДП материалов в ее составе (обычно это задачи с неменяющейся λ), можно воспользоваться следующим приемом. Вначале производится вычисление матриц коэффициентов Фурье E для каждого из слоев, на которые разбивается исследуемая структура. Здесь также можно воспользоваться параллельными вычислениями: либо при вычислении E для каждого из слоев (несколько ядер вычисляют одну такую матрицу, затем переходят на другую), либо для вычисления набора E для всех слоев сразу (только одно ядро вычисляет одну матрицу E , другое ядро — другую). Набор

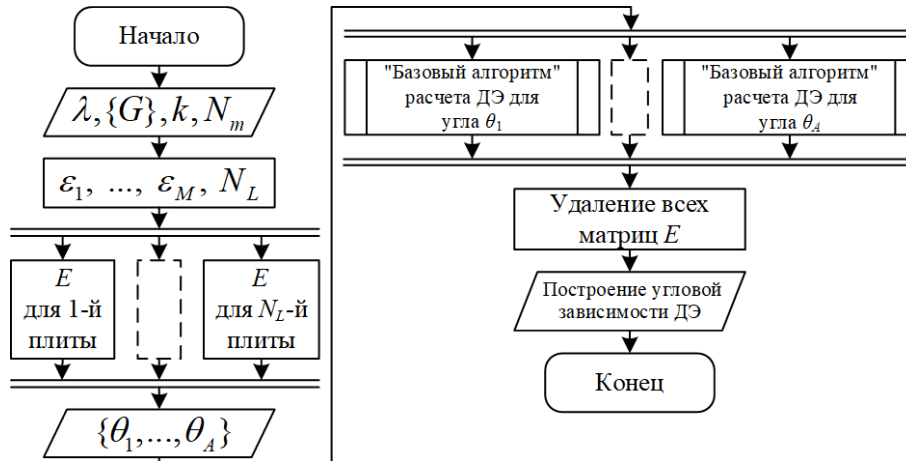


Рис. 3. Блок-схема алгоритма, использующего прием 3

Fig. 3. Flowchart of an algorithm using technique 3

всех E сохраняется в памяти. Далее происходит параллельное вычисление набора ДЭ. В процессе вычисления каждого значения ДЭ полученные матрицы E последовательно берутся из памяти от слоя к слою. После вычисления всех необходимых значений ДЭ набор E удаляется из памяти (см., например, на рис. 3 блок-схему приема 3 для задачи построения угловой зависимости ДЭ).

2. Тестовые задачи и результаты

Эффективность вышеописанных приемов оценивалась путем сравнения времени, затрачиваемого на вычислительные процессы построения угловых зависимостей ДЭ двухслойных двухрельефных микроструктур с просветляющими покрытиями (рис. 4). Сравнивалось время вычислений без использования приемов, с одним из приемов 1 или 2, с их одновременным использованием, а также с одновременным использованием всех трех вышеописанных приемов. Блок-схема алгоритма с тремя приемами приведена на рис. 5.

При использовании приема 1 вычислялась совокупность коэффициентов и применялась внутренняя программная процедура построения матриц Тейлора. В качестве среды программирования мы использовали Wolfram Mathematica 12 [10]. При этом матрицу E одного слоя вычисляло одно ядро.

Расчеты, в частности, выполнялись для двух микроструктур:

- 1) микроструктуры с нижним слоем из кроноподобного оптического пластика E48R, включенного в каталог ZEON программы оптического проектирования Zemax [11], и верхним слоем из флинтоподобного оптического пластика EP7000, выпускаемого фирмой Mitsubishi Gas Chemical под торговой маркой Lupizeta™ EP7000 [12]. Эта микроструктура предназначена для работы в оптическом диапазоне $0.4 \leq \lambda \leq 0.7$ мкм и имеет глубины рельефов $h_1 = 8.792$ мкм и $h_2 = 6.246$ мкм соответственно. Относительный пространственный период микроструктуры $P = \Lambda / (h_1 + h_2) = 10$, где Λ — геометрический период микроструктуры;
- 2) микроструктуры из кристаллических оптических материалов SRF2 и Germanium, включенных в каталог Infrared программы Zemax. Микроструктура предназначена для работы в двойном инфракрасном диапазоне $3.4 \leq \lambda \leq 5.2$ мкм и $7.5 \leq \lambda \leq 11.4$ мкм. Глубины рельефов $h_1 = 53.6$ мкм и $h_2 = 8.71$ мкм, а относительный пространственный период $P = 20$.

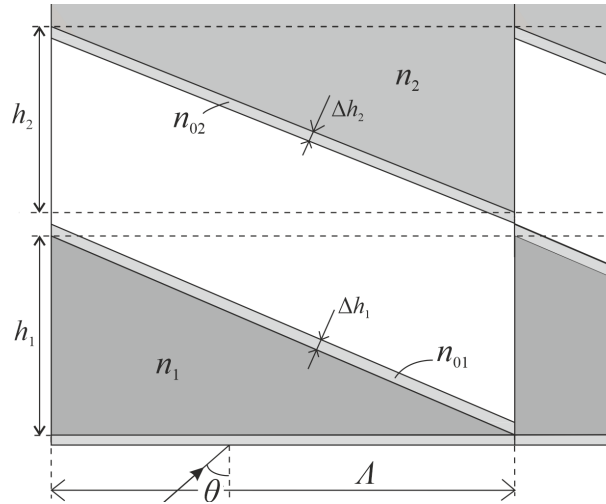


Рис. 4. Профиль двухслойной двухрельефной пилообразной микроструктуры с просветляющими покрытиями

Fig. 4. Profile of a two-layer, two-relief sawtooth microstructure with antireflective coatings

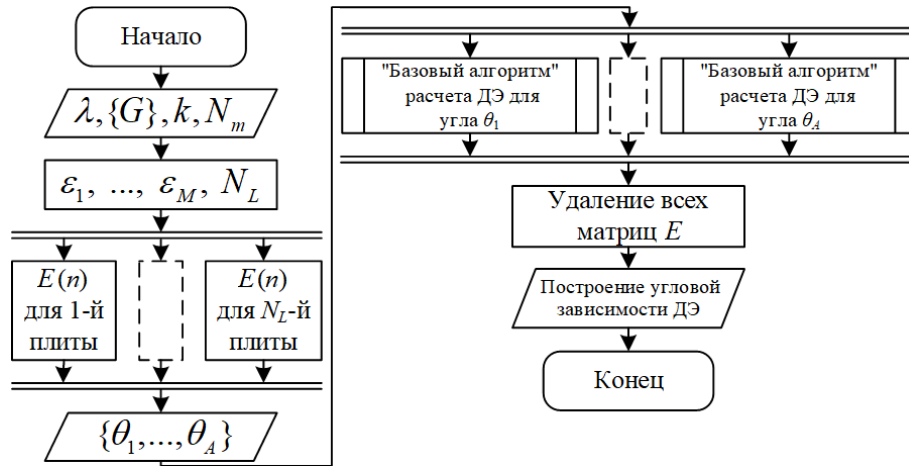


Рис. 5. Блок-схема алгоритма, использующего все три приема оптимизации

Fig. 5. Flowchart of an algorithm using all three optimization techniques

С целью исключения влияния френелевских потерь на ДЭ микроструктуры на каждой длине волны рабочего спектрального диапазона при моделировании просветляющих покрытий их показатели преломления и толщины вычислялись по формулам $n_{0i} = n_i^{1/2}$ и $\Delta h_i = 0.25\lambda/n_{0i}$ соответственно, где n_i — показатель преломления i -го слоя микроструктуры. ТЕ-поляризованное излучение падало на микроструктуру из воздуха со стороны первого слоя под углом θ , как показано на рис. 3. Расчеты производились для интервала углов падающего излучения θ от -14 до 14° с шагом 1° . Поскольку время, затрачиваемое на вычисление ДЭ, не зависит от длины волны, в табл. 1 приведены затраты времени и оперативной памяти на построение угловых зависимостей ДЭ только на одной длине волны ($\lambda = 0.55$ мкм для структуры E48R/EP 7000, $\lambda = 5.2$ мкм для структуры SRF2/GERMANIUM) рабочего спектрального диапазона, т. е. по 29 значениям ДЭ для каждой задачи. Используемый процессор — AMD Ryzen 9 3900XT 12×3.79 ГГц, оперативная память 4×16384 МБ DDR4 3466 МГц. В качестве базового использовался модифицированный алгоритм, представленный в работе [3] (рис. 6).

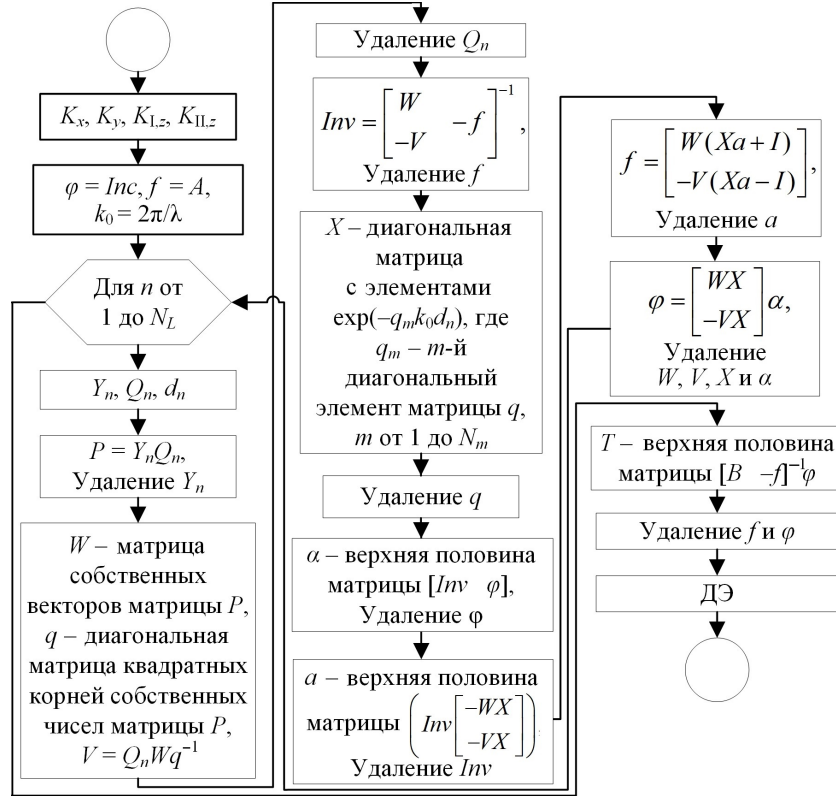


Рис. 6. Блок-схема модифицированного “базового алгоритма” из работы [3]

Fig. 6 Flowchart of the modified “core algorithm” from the work [3]

В блок-схеме на рис. 6, согласно работе [3]: $K_x, K_y, K_{I,z}, K_{II,z}$ — диагональные матрицы с элементами нормированных проекций волновых векторов всех рассматриваемых мод соответственно на оси x, y, z в области, из которой падает излучение на структуру, ось z в области, в которую падает излучение после прохождения через структуру; Inc, A, B — матрицы граничных условий для рассматриваемой структуры, определяемые, в частности, с помощью матриц $K_x, K_y, K_{I,z}, K_{II,z}$; Y_n, Q_n — матрицы-коэффициенты, связывающие соответственно производные по нормированной координате z от проекции амплитуд вектора электрической напряженности с проекциями амплитуд вектора магнитной напряженности и производные от проекций амплитуд вектора магнитной напряженности с проекциями амплитуд вектора электрической напряженности; d_n — толщина n -й плиты; I — единичная матрица.

Полученные каждым из пяти способов значения ДЭ идентичны друг другу и результатам нашей работы [4] (см. рис. 2 и 3 работы [4]).

Как видно из результатов, представленных в табл. 1, использование свойств матрицы Тейлора значительно ускоряет получение результатов RCWA-методом (сравним столбцы “без приемов” и “прием 2” со столбцами “прием 1”, “приемы 1 и 2” и “приемы 1, 2 и 3”).

В случае если мы не используем указанные свойства, вычислительная машина последовательно производит расчет N_m^2 элементов для каждой из N_L тонких решетчатых плит, на которые разбивается исследуемая структура [3]. Когда используем прием 1, в общем случае отдельно рассчитываются только $2N_m$ элементов или N_m элементов в случае структуры с действительными значениями ДП (тогда некоторое дополнитель-

Т а б л и ц а 1. Время на расчет и требуемая оперативная память для построения угловых зависимостей ДЭ для двух задач пятью разными способами

Table 1. Calculation time and required RAM for constructing angular dependences of DE for two tasks in five different ways

Задача		Время вычисления, с (первая строка) Оперативная память, МБ (вторая строка)				
		Без приемов	Прием 1	Прием 2	Совместно приемы 1 и 2	Совместно приемы 1, 2 и 3
E48R/EP7000 $h_1 = 8.792$ мкм $h_2 = 6.246$ мкм $P = 10$	$N_m = 300$	$78.29 \cdot 10^3$	$1.91 \cdot 10^3$	$26.79 \cdot 10^3$	$1.76 \cdot 10^3$	$0.67 \cdot 10^3$
	$N_L = 367$	51.42	58.98	52.09	59.52	512.52
	$N_m = 300$	$115.75 \cdot 10^3$	$28.90 \cdot 10^3$	$41.61 \cdot 10^3$	$2.76 \cdot 10^3$	$1.01 \cdot 10^3$
	$N_L = 549$	51.42	58.90	49.06	58.92	754.38
	$N_m = 400$	$140.93 \cdot 10^3$	$3.63 \cdot 10^3$	$48.73 \cdot 10^3$	$3.47 \cdot 10^3$	$1.56 \cdot 10^3$
	$N_L = 367$	92.06	104.61	91.43	104.64	896.40
	$N_m = 400$	$207.81 \cdot 10^3$	$5.34 \cdot 10^3$	$70.73 \cdot 10^3$	$5.14 \cdot 10^3$	$2.29 \cdot 10^3$
	$N_L = 549$	92.06	104.61	91.43	105.98	1341.40
SRF2/ GERMANIUM $h_1 = 53.4$ мкм $h_2 = 8.7$ мкм $P = 20$	$N_m = 200$	$21.61 \cdot 10^3$	$0.52 \cdot 10^3$	$6.80 \cdot 10^3$	$0.44 \cdot 10^3$	$0.12 \cdot 10^3$
	$N_L = 219$	23.05	26.32	26.95	26.94	133.85
	$N_m = 200$	$44.11 \cdot 10^3$	$1.03 \cdot 10^3$	$14.12 \cdot 10^3$	$0.86 \cdot 10^3$	$0.24 \cdot 10^3$
	$N_L = 438$	23.45	26.33	27.01	26.28	267.54
	$N_m = 400$	$84.95 \cdot 10^3$	$2.11 \cdot 10^3$	$27.32 \cdot 10^3$	$0.20 \cdot 10^3$	$1.84 \cdot 10^3$
	$N_L = 219$	91.41	104.61	104.61	104.61	534.93
	$N_m = 400$	$160.89 \cdot 10^3$	$4.20 \cdot 10^3$	$57.38 \cdot 10^3$	$0.41 \cdot 10^3$	$0.94 \cdot 10^3$
	$N_L = 438$	91.41	103.49	104.62	104.61	1069.82

ное время расходуется на вычисление комплексно-сопряженных элементов). Более того, в данной работе мы применяли параллельные вычисления, когда использовали прием 1, что помогло сократить время расчета. Совместное использование приемов 1 и 2 не дало существенного выигрыша во времени, однако позволило снизить процент времени на расчет матриц коэффициентов Фурье E до значения 12 %. Когда используем прием 3, предварительное вычисление матриц E всех тонких плит является основным фактором, снижающим вычислительное время. Конечно, время вычисления зависит от процессора вычислительной машины, количества его ядер и тактовой частоты. Параллельное вычисление дает существенный выигрыш во времени только на машинах с большим количеством процессорных ядер. Однако в то время как в приемах 1 и 2 на каждом шаге вычислений используется одна матрица E (для одной плиты), после чего она заменяется следующей или удаляется из памяти, в приеме 3 одновременно в памяти хранятся все матрицы E , которые будут использоваться процессорными ядрами, а это $N_L \times N_m^2$ элементов. Более того, каждое ядро использует для своих собственных вычислений часть оперативной памяти. Таким образом, расход оперативной памяти, когда мы используем прием 3, существенно возрастает (см. табл. 1). Это следует учитывать при решении тех задач, где для получения достоверных результатов необходимо использовать большие значения параметров N_m и N_L . Также необходимо учитывать, что требуемое количество оперативной памяти может зависеть от программной среды и типа оперативной памяти. Количество приведенной в табл. 1 оперативной памяти не

учитывает память компьютера, расходуемую на другие процессы или на поддержание самой среды программирования.

Прием 3, описанный выше, предполагает, что каждое значение ДП рассчитывается для структуры с одинаковыми параметрами. Однако на практике возможны случаи, когда требуется рассчитать набор значений ДП для структуры с изменяющимися геометрическими или электродинамическими параметрами. К последним относятся значения диэлектрической и магнитной проницаемостей. Такой задачей может быть определение зависимости ДП от температуры, когда проявляются, например, эффекты температурного расширения материалов микроструктуры и влияния температуры на показатели преломления.

Пример блок-схемы алгоритма, использующего все три вышеописанных приема для решения данной задачи, приведен на рис. 7. Здесь также предполагается, что магнитные проницаемости всех материалов микроструктуры равны единице. Геометрические параметры $\{G\}$, число плит N_L и ДП ε_i рассчитываются на каждом шаге цикла "Для" с изменяющейся температурой t от t_{\min} до t_{\max} . На каждом шаге осуществляется параллельный расчет матриц E каждой плиты.

Алгоритм, приведенный на рис. 7, использован при построении температурных зависимостей ДЭ для пилообразной двухслойной двухрельефной микроструктуры, составленной из материалов PBF2 [11] и HWS4 [13] с нанесенными на них просветляющими покрытиями (см. рис. 3), смоделированными по описанному выше принципу. Расчетные параметры микроструктуры для температуры 20 °С: глубина рельефа PBF2 $h_1 = 84.4$ мкм; глубина рельефа HWS4 $h_2 = 42.8$ мкм; период структуры $\Lambda = 2544$ мкм; длина волны и угол падения ТЕ-поляризованного излучения $\lambda = 5.2$ мкм и $\theta = 10^\circ$; интервал температур от -40 до 60 °С. Период Λ предполагался не зависящим от температуры и оставался постоянным для каждого единичного расчета. Показатели преломления просветляющих покрытий также не изменялись и соответствовали температуре 20 °С. От температуры зависели параметры h_1 , h_2 и показатели преломления

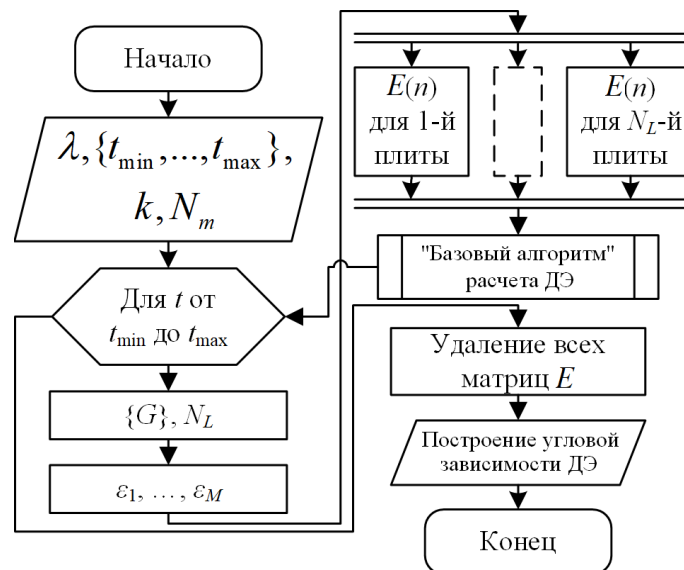


Рис. 7. Блок-схема алгоритма для определения температурной зависимости ДЭ

Fig. 7. Flowchart of the algorithm for determining the temperature dependence of diffraction efficiency

Т а б л и ц а 2. Время на расчет и требуемая оперативная память для построения температурных зависимостей ДЭ микроструктуры PBF2/HWS4

Table 2. Calculation time and required RAM for representing the temperature dependences of the DE of the PBF2/HWS4 microstructure

PBF2/HWS4	Время вычисления, с (первая строка) Оперативная память, МБ (вторая строка)	
	$N_m = 365$	$N_m = 400$
$N_L = 409$	$5.41 \cdot 10^3$ 1723.05	$6.61 \cdot 10^3$ 1931.03
$N_L = 490$	$6.23 \cdot 10^3$ 2099.96	$7.62 \cdot 10^3$ 2321.3

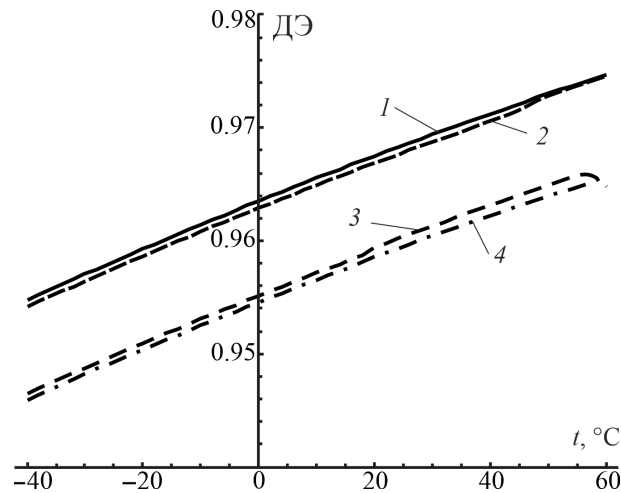


Рис. 8. Температурные зависимости ДЭ микроструктуры PBF2/HWS4: 1 — $N_L = 490$, $N_m = 365$; 2 — $N_L = 490$, $N_m = 400$; 3 — $N_L = 409$, $N_m = 365$; 4 — $N_L = 409$, $N_m = 400$

Fig. 8. Temperature dependences of the DE of the PBF2/HWS4 microstructure: 1 — $N_L = 490$, $N_m = 365$; 2 — $N_L = 490$, $N_m = 400$; 3 — $N_L = 409$, $N_m = 365$; 4 — $N_L = 409$, $N_m = 400$

материалов PBF2 и HWS4. Дифракционная эффективность рассчитывалась с шагом температур 2°C ; таким образом, количество рассчитываемых ДЭ для каждой задачи составило 51. Построенные зависимости представлены на рис. 7, расчетное время и затрачиваемая оперативная память для различных комбинаций параметров N_L и N_m — в табл. 2.

Результаты, приведенные на рис. 8, показывают, что варьирование параметров существенно влияет на величину ДЭ. Увеличение количества плит разбиения N_L в данном случае привело к повышению ДЭ при остальных совпадающих параметрах, однако увеличение количества мод N_m вызвало незначительное падение ДЭ. Как было отмечено выше, более высокие значения N_m приводят к более достоверным результатам. В связи с этим получение высоких значений ДЭ при небольших N_m не является причиной прекращения поиска более высоких параметров расчета N_m и N_L , при которых достигаются сходимость энергетического баланса [1] и стабилизация значений ДЭ [4], что обеспечивает достоверность полученных результатов. Высокие значения параметра N_m обеспечивают более точное соответствие RCWA-моделирования реальной ситуации в отношении как электромагнитного поля, так и формы микроструктуры.

Заключение

Как показали результаты, полученные в рамках данной работы, предложенные приемы позволяют значительно повысить эффективность алгоритма, описанного в работах [3, 9]. Также данные приемы могут применяться для оптимизации программных продуктов, созданных на основе оригинальных методов RCWA-анализа [14, 15], дающих полное решение, т. е. определяющих ДЭ как прошедших, так и отраженных дифракционных порядков. Комбинируя предложенные приемы, можно настроить рабочий алгоритм так, чтобы он удовлетворял требованиям пользователя к расчетному времени и доступной оперативной памяти вычислительной машины. Существенный выигрыш в расчетном времени может быть получен, если мы будем рассчитывать только различающиеся между собой элементы матриц коэффициентов Фурье E . Очевидно, что данное обстоятельство можно будет использовать, если исследуемая структура имеет в своей композиции полностью одинаковые тонкие плиты, на которые разбивается данная структура. Параллельные вычисления также могут существенно ускорить получение результатов, однако при этом увеличивается требование к доступной оперативной памяти вычислительной машины.

Благодарности. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00081).

Список литературы

- [1] **Moharam M.G., Gaylord T.K.** Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings. *Journal of the Optical Society of America*. 1982; 72(10):1385–1392.
- [2] **Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K.** Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *Journal of the Optical Society of America*. 1995; 12(5):1068–1076.
- [3] **Antonov A.I., Greisukh G.I.** Approach for finding amplitudes of the transmitted diffraction orders in the framework of a rigorous coupled-wave analysis and its application in the study of three-layer sawtooth microstructures. *Proc. SPIE, Holography, Diffractive Optics, and Applications X*. 2020; 11551:115511C. DOI:10.1117/12.2572287.
- [4] **Greisukh G.I., Antonov A.I., Ezhov E.G., Danilov V.A., Usievich B.A.** Conditions for minimizing the computational complexity of the RCWA calculation of the diffraction efficiency of sawtooth two-layer double-relief microstructures. *Photonics*. 2023; 10(7):794. DOI:10.3390/photonics10070794.
- [5] **Greisukh G.I., Ezhov E.G., Antonov A.I., Danilov V.A., Usievich B.A.** Comparative analysis estimates for two-relief microstructure diffraction efficiency in the visible and dualinfrared ranges in the framework of scalar and rigorous diffraction theories. *Journal of Optical Technology*. 2023; 90(5):119–124. DOI:10.1364/JOT.90.000119.
- [6] **Greisukh G.I., Ezhov E.G., Antonov A.I., Danilov V.A., Usievich B.A.** Potential opportunities of sawtooth diffraction microstructure with two layers and single relief. *Journal of Optics*. 2020; 22(8):085604. DOI:10.1088/2040-8986/ab90ce.
- [7] **Gray R.M.** Toeplitz and circulant matrices: A review. Stanford: Department of Electrical Engineering Stanford University; 2000: 90.

- [8] **Антонов А.И., Грейсух Г.И., Казин С.В.** PSUAC-DE. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022681578, 15 ноября 2022 г. 2022.
- [9] **Антонов А.И.** Определение коэффициентов Фурье разложения диэлектрической проницаемости тонких слоев пилообразных микроструктур в рамках RCWA-метода. VIII международная конференция по фотонике и информационной оптике. Сборник научных трудов. М.; 2019: 663–664.
- [10] Wolfram mathematica. Available at: <https://www.wolfram.com/mathematica> (accessed November 6, 2023).
- [11] Zemax source. Available at: <http://www.zemax.com/pages/opticstudio> (accessed November 6, 2023).
- [12] Mitsubishi gas chemical. Available at: http://www.mgc.co.jp/eng/products/kc/iupizeta_ep.html (accessed November 6, 2023).
- [13] CDGM source. Available at: http://www.cdgmgd.com/go.htm?url=goods&k=HWS_Infrared_Glass (accessed November 6, 2023).
- [14] **Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K.** Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach. Journal of the Optical Society of America. 1995; 12(5):1077–1086.
- [15] **Li L.** Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. Journal of the Optical Society of America. 1996; 13(6):1024–1035.

Techniques for optimizing algorithms for rigorous coupled-wave analysis

A. I. ANTONOV, G. I. GREISUKH*, E. G. EZHOV

Penza State University of Architecture and Construction, 440028, Penza, Russia

*Corresponding author: Grigoriy I. Greisukh, e-mail: subscribing_2002@mail.ru

Received November 21, 2023, revised March 05, 2024, accepted April 10, 2024.

Abstract

Rigorous coupled-wave analysis is a widely used method to determine the diffraction efficiency of periodic structures. The computational complexity that arises when implementing algorithms for rigorous coupled-wave analysis is characterized by the time required for the calculation and the amount of RAM used by the computer. The calculated time, in turn, depends on the selected parameters of the number of plane waves (modes), the sum of which determines the electromagnetic field, and the number of lattice plates into which the periodic structure is divided. This paper proposes three techniques for reducing the time required to calculate a single value or series of diffraction efficiency values obtained using rigorous algorithms for coupled wave analysis. The first technique uses the properties of Toeplitz matrices, which are the matrices of Fourier coefficients when expanding the dielectric constant of each lattice plate into a series. The second technique reduces computational complexity by reducing the number of variables in the Fourier coefficient function. The third technique uses parallel computing to calculate a set of Fourier coefficient matrices and a set of diffraction efficiency values. Using examples of problems of constructing the dependences of the diffraction efficiency of two-layer double-relief sawtooth microstructures with antireflection

coatings on the angle of incidence of radiation and temperature, it is shown that the use of the properties of Toeplitz matrices can significantly reduce the calculation time. The second technique insignificantly reduces the calculation time. Parallel computing significantly reduces computation time, while using more RAM. By combining the proposed techniques, a working algorithm that meets the user's requirements for the estimated time and available RAM of the computer is proposed.

Keywords: diffraction efficiency, rigorous coupled-wave analysis, Toeplitz matrix, Fourier coefficients, parallel computing, RAM.

Citation: Antonov A.I., Greisukh G.I., Ezhov E.G. Techniques for optimizing algorithms for rigorous coupled-wave analysis. Computational Technologies. 2024; 29(5):17–29. DOI:10.25743/ICT.2024.29.5.003. (In Russ.)

Acknowledgements. This research was funded by the Russian Science Foundation (project No. 20-19-00081).

References

1. **Moharam M.G., Gaylord T.K.** Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings. Journal of the Optical Society of America. 1982; 72(10):1385–1392.
2. **Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K.** Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. Journal of the Optical Society of America. 1995; 12(5):1068–1076.
3. **Antonov A.I., Greisukh G.I.** Approach for finding amplitudes of the transmitted diffraction orders in the framework of a rigorous coupled-wave analysis and its application in the study of three-layer sawtooth microstructures. Proc. SPIE, Holography, Diffractive Optics, and Applications X. 2020; 11551:115511C. DOI:10.1117/12.2572287.
4. **Greisukh G.I., Antonov A.I., Ezhov E.G., Danilov V.A., Usievich B.A.** Conditions for minimizing the computational complexity of the RCWA calculation of the diffraction efficiency of sawtooth two-layer double-relief microstructures. Photonics. 2023; 10(7):794. DOI:10.3390/photonics10070794.
5. **Greisukh G.I., Ezhov E.G., Antonov A.I., Danilov V.A., Usievich B.A.** Comparative analysis estimates for two-relief microstructure diffraction efficiency in the visible and dualinfrared ranges in the framework of scalar and rigorous diffraction theories. Journal of Optical Technology. 2023; 90(5):119–124. DOI:10.1364/JOT.90.000119.
6. **Greisukh G.I., Ezhov E.G., Antonov A.I., Danilov V.A., Usievich B.A.** Potential opportunities of sawtooth diffraction microstructure with two layers and single relief. Journal of Optics. 2020; 22(8):085604. DOI:10.1088/2040-8986/ab90ce.
7. **Gray R.M.** Toeplitz and circulant matrices: A review. Stanford: Department of Electrical Engineering Stanford University; 2000: 90.
8. **Antonov A.I., Greisukh G.I., Kazin S.V.** PSUAC-DE. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM No. 2022681578 [Russian Federation certificate of state registration of the computer program. Russian Patent No. 2022681578, 15 November 2022]. 2022. (In Russ.)
9. **Antonov A.I.** Definition of the Fourier coefficients of the decomposition of the dielectric permeability of thin layers of sawtooth microstructures within the framework of the RCWA. VIII International Conference Photonics and Information Optics. Collection of Works. Moscow; 2019: 663–664. (In Russ.)
10. Wolfram mathematica. Available at: <https://www.wolfram.com/mathematica> (accessed November 6, 2023).
11. Zemax source. Available at: <http://www.zemax.com/pages/opticstudio> (accessed November 6, 2023).
12. Mitsubishi gas chemical. Available at: http://www.mgc.co.jp/eng/products/kc/iupizeta_ep.html (accessed November 6, 2023).
13. CDGM source. Available at: http://www.cdgm.com/go.htm?url=goods&k=HWS_Infrared_Glass (accessed November 6, 2023).
14. **Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K.** Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach. Journal of the Optical Society of America. 1995; 12(5):1077–1086.
15. **Li L.** Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. Journal of the Optical Society of America. 1996; 13(6):1024–1035.