

MATLAB 기반 푸리에 모달 방법 자동 미분 프로그래밍을 통한 역설계

Inverse design through auto-differential programming of Fourier modal method based on MATLAB

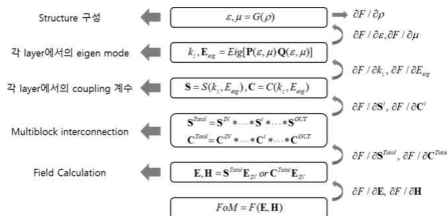
김용섭, 전영진, 김휘*
고려대학교 세종캠퍼스 전자·정보공학과
*hwikim@korea.ac.kr

Abstract— 본 연구에서는 자동 미분을 MATLAB에서 구현하기 위해 그래디언트의 고유값 분해 수식을 정립하고 본 이론을 통해 구현한 푸리에 모달 방법 기반의 역설계 시뮬레이션을 소개한다.

I. 서론 및 배경

메타표면은 진폭, 위상 및 진동 방향과 같은 광 특성을 고효율로 변조할 수 있는 광학 소자로 다양한 광학 분야에 적용할 수 있다. 이러한 메타표면은 forward design과 inverse design을 통해 설계할 수 있는데, forward design의 경우 설계에 있어 효율과 노이즈에 대한 제어가 어려워 대부분의 메타표면은 높은 성능과 설계 자유도를 가질 수 있는 inverse design을 통해 설계한다. Inverse design에는 대표적으로 brute force, 딥러닝 그리고 gradient 기반의 설계가 사용된다. 이 중 brute force의 경우 많은 계산량을 필요로 하고, 딥러닝 기반 설계의 경우 학습을 위한 데이터가 필요하다는 단점이 있다. 반면에 gradient 기반 설계의 경우 chain rule을 이용해 reverse 방향에 대한 auto differentiation을 이용할 수 있어 연산 속도가 빠르다는 장점이 있다. 본 연구에서는 이러한 auto differentiation을 수식적으로 정립하고 이를 MATLAB에서 프로그래밍하여 FMM 기반 inverse design에 적용하고자 한다.

II. 연구 내용 및 결과



[그림 1] FMM 코드의 구성과 reverse gradient 수식 도표 flowchart.

그림 1은 FMM(Fourier Modal Method) 기반의 전자장 해석 코드의 flowchart를 나타낸다. 그림 1에서 보듯이 먼저 물질의 투자율, 유전율과 구조의 형태를 설계하고, 이에 따라 얻은 구조 내부 각각의 layer eigen mode, 설계한 구조의 layer

coupling 계수, multi block interconnection과 같은 수치들을 이용해 전자장을 해석하는 과정을 거치게 된다.

이때 FMM의 과정을 여러 종류의 도함수 조합으로 나타낼 수 있고, 전자장 해석의 결과가 미분 가능하다고 하면, 이를 그림 1의 우측 역방향 화살표인 chain rule을 통해 auto differentiation이 가능한 물질의 투자율, 유전율, 구조를 매개변수로 하는 함수로 나타내어 역설계가 가능하다.

$$\mathbf{AX} = \mathbf{XA}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{X}^{-1} \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{A}} + \mathbf{F} \circ (\mathbf{X}^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}}) \right] \mathbf{X}^T$$

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{cases} 0, & i = j \\ \frac{\lambda_j - \lambda_i}{|\lambda_j - \lambda_i|^2 + \epsilon}, & i \neq j \end{cases}$$

[그림 2] Eigen decomposition의 gradient 계산 수식

그림 2는 auto differentiation의 과정 중 eigen decomposition의 gradient 계산을 위한 수식이다. $\mathbf{A}$ 는 eigen decomposition이 되는 행렬이고 $\mathbf{X}$ 는 eigen vector, $\mathbf{\Lambda}$ 는 eigen value로, 첫 번째 수식과 같이 나타낼 수 있고, 이때 함수 L 에 대해 역방향 eigen decomposition을 계산할 수 있다.

결론적으로, 본 연구에서는 MATLAB을 사용하여 개발한 FMM 기반 inverse design 알고리즘에 auto differentiation을 적용하기 위한 eigen decomposition의 gradient를 수식적으로 해석한 결과와 자동 미분 프로그래밍 방법을 소개한다. 이를 통하여 메타표면 설계를 위한 inverse design 기법의 처리속도를 높일 수 있을 것이다.

사사

This work was supported by Alchemist Project grant funded by Korea Evaluation Institute of Industrial Technology (KEIT) & the Korea Government (MOTIE) (Project Number: 1415179744, 20019169).

참고문헌

[1] C. Kim, et. al., "TORCWA: GPU-accelerated Fourier modal method and gradient-based optimization for metasurface design." Computer Physics Communications 282, 108552 (2023).