



Projeto Inverso de Cristais Fotônicos via Grey Wolf Optimizer

Palavras-Chave: Cristal Fotônico, Otimização, Grey Wolf Optimizer

Gustavo Hikaru Machi Matsumine, FEEC , UNICAMP

Prof. Dr. Gilliard Nardel Malheiros Silveira (orientador) , FEEC, UNICAMP

Esta pesquisa foca na aplicação do algoritmo Grey Wolf Optimizer (GWO) para o design inverso de estruturas cristalinas fotônicas bidimensionais, com o objetivo primordial de maximizar a Banda Fotônica Proibida (PBG) em configurações que utilizam carbeto de silício (SiC) e ar para os modos transversais elétricos e magnéticos de forma independente.

1 INTRODUÇÃO

Cristais fotônicos são materiais com uma estrutura dielétrica organizada periodicamente em escalas comparáveis ao comprimento de onda da luz, o que lhes permite controlar o movimento dos fótons. Uma característica crucial dessas estruturas é a Photonic Band Gap (PBG), uma faixa de frequências na qual a propagação da luz é completamente impedida. Essa propriedade abre caminho para diversas aplicações em dispositivos como guias de onda, filtros ópticos e lasers.

O desafio de projetar cristais fotônicos com propriedades específicas, como uma PBG maximizada, configura-se como um problema complexo de design inverso, devido à necessidade de ajustar múltiplos parâmetros, como a constante dielétrica, a geometria e a periodicidade, e ao alto custo computacional envolvido na resolução das Equações de Maxwell, que regem o comportamento da luz nestes materiais.

Nesse cenário, algoritmos meta-heurísticos emergem como uma solução particularmente interessante, pois são capazes de explorar eficientemente grandes espaços de busca, por não dependerem do cálculo de derivadas (sendo mais econômicos computacionalmente) e por possuírem mecanismos que ajudam a escapar de mínimos locais. Além disso, o Teorema No Free Lunch (NFL) destaca a importância de selecionar algoritmos específicos para cada problema, justificando a exploração de novas aplicações para meta-heurísticas como o GWO.

O Grey Wolf Optimizer (GWO), desenvolvido por Mirjalili em 2014, é uma meta-heurística bioinspirada no comportamento de caça dos lobos cinzentos, emulando suas estratégias de perseguição, cerco e ataque para buscar um ótimo global no espaço de busca. A Figura 1 demonstra o fluxograma do algoritmo GWO implementado, explicitando o critério de parada e atualização dos agentes de busca.

2 OBJETIVOS

O objetivo geral desta pesquisa foi o estudo e o desenvolvimento de códigos robustos e eficientes baseados no GWO. Esses códigos foram aplicados na síntese de estruturas fotônicas

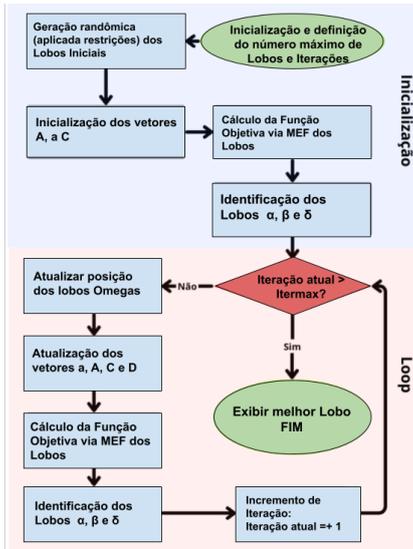


Figura 1: Fluxograma do algoritmo GWO implementado, em fundo azul os processos de inicialização e em fundo rosa os processos de laço.

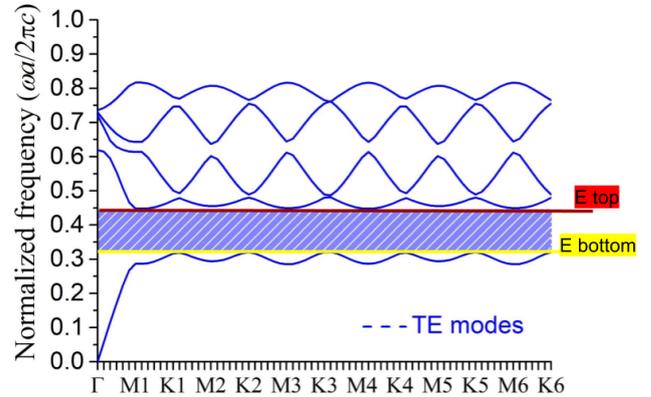


Figura 2: Exemplo de diagrama de banda, em destaque Etop e Ebottom utilizadas no cálculo da função objetiva.

crystalinas com características otimizadas de PBG para os modos transversais elétricos (TE) e magnéticos (TM). Como objetivos específicos, serão realizadas simulações em Python e Matlab com o uso do Método de Elementos Finitos para a solução numérica para os modos TM e TE com diferentes números de agentes de busca e iterações máximas. Por meio dessas, foram coletados os dados de desempenho do algoritmo GWO na resolução desse tipo de problema, bem como as configurações de estruturas fotônicas cristalinas com largura de banda fotônica maximizada proibida para os respectivos modos em cristais constituídos de SiC e ar.

3 METODOLOGIA

Primeiramente foi realizada a validação preliminar do GWO em sua versão contínua utilizando funções de teste (benchmark) para verificar seu funcionamento mais essencial do mesmo, incluindo a exploração aleatória e a convergência em diferentes tipos de funções (unimodais e multimodais, unidimensionais e multidimensionais).

Posteriormente, foi feita a adaptação para problemas discretos gerando o Binary GWO (BGWO), visto que a resolução das Equações de Maxwell para definir a PBG de um cristal fotônico é realizada de forma discreta pelo MEF. Essa adaptação envolveu a utilização da função Sigmoide para converter a posição contínua de um agente de busca em um valor discretizado de bits. E, similarmente ao caso anterior, também foi validado com funções de testes, dessa vez discretas.

Por fim, integramos o BGWO (desenvolvido em Python) com o código responsável por implementar o Método dos Elementos Finitos (codificado em um arquivo Matlab). O MEF é uma técnica numérica eficaz para resolver as equações de Maxwell em domínios complexos, permitindo o cálculo das larguras de banda fotônica proibida. A função objetivo retornada ao GWO pelo cálculo via MEF é a razão entre a largura de banda e a frequência central (gap-to-midgap ratio), obtidos do diagrama de bandas do cristal fotônico, como pode ser observado na Figura 2.

O código de MEF utilizado operava inicialmente com uma grade de 100 bits (10 por 10),

foi posteriormente modificado para uma resolução superior de 400 bits (20 por 20). Cada bit (par de triângulos) corresponde a um elemento finito na célula unitária do cristal fotônico bidimensional, que podia ser preenchido com SiC (bit 1) ou ar (bit 0). A figura 3 mostra um exemplo de malha 3 por 3, com as células escuras sendo preenchidas de SiC, nota-se a conversão da estrutura bidimensional para uma sequência de bits.

Assim, foram conduzidas diversas otimizações para os modos TE e TM modificando-se o número máximo de iterações e o número de lobos (agentes de busca). A primeira geração de lobos de todas as simulações foi gerada aleatoriamente, mas com regras de construção inicial que visavam acelerar a convergência do algoritmo, como evitar material na borda da grade e gerar blocos conectados do mesmo material. A Figura 4 demonstra a integração entre GWO e MEF juntamente com alguns dos melhores resultados obtidos no processo de otimização para o modo TE. Uma vez completa a bateria de simulações para o MEF de 100 bits foi realizado um refinamento da malha para o modo TM, buscando verificar possíveis melhorias na precisão geométrica. Os resultados da malha inicial e refinada, e suas respectivas análises serão discutidos a seguir.

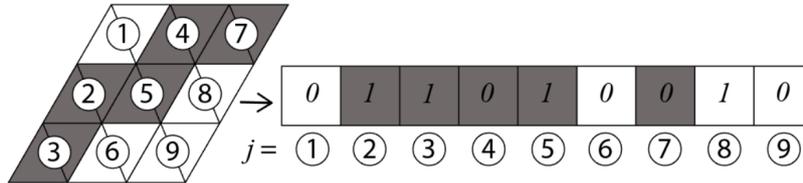


Figura 3: Conversão espacial-binária exemplificada para uma malha de 9 bits. Fonte: Gilliard N.Malheiros Silveira (2023).

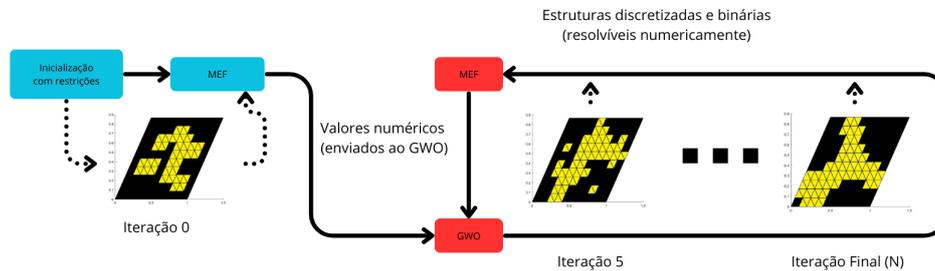


Figura 4: Diagrama de blocos com lobos alfas de algumas iterações, em fundo azul temos o processo de inicialização e em fundo vermelho os lobos referentes ao processo de laço (no modo TE).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foi observado que a relação entre o número de agentes de busca e o tempo de execução é linear. Similarmente, a relação entre o número de iterações máximas e o tempo de execução também é linear, porém 10 vezes menos custosa do que adicionar um agente de busca. A relação do valor de função objetivas para ambos os parâmetros é aparentemente logarítmica, com rápido crescimento inicial seguido de estabilização. Ademais, o formato das curvas de convergência para as funções de benchmark fornece um padrão que nos permite inferir a qualidade da convergência para as simulações realizadas, demonstrando a saturação computacional para a mesma.

Os resultados das simulações foram promissores, particularmente para o modo TM, uma estrutura otimizada (presente na Figura 5) com uma PBG de 34,33% foi obtida, juntamente

com as curvas de convergência para o número máximo de Iterações (Figura 7) e Lobos (Figura 8). O valor de PBG encontrado para este modo supera os resultados anteriores da literatura, que correspondem a 33,94%.

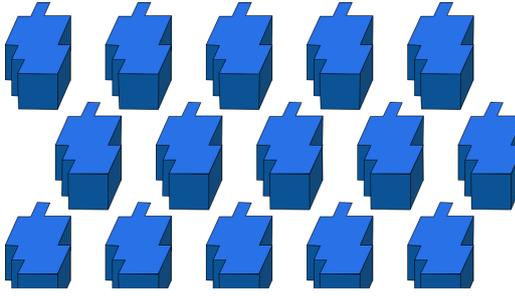


Figura 5: Estrutura otimizada encontrada para o cristal fotônico de SiC (em azul) e ar (em branco) no modo TM.

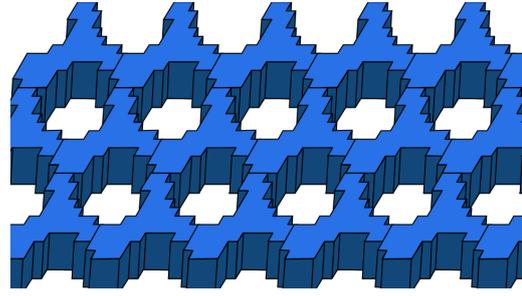


Figura 6: Estrutura otimizada encontrada para o cristal fotônico de SiC (em azul) e ar (em branco) no modo TE.

Para o modo TE, cujas curvas de convergência para número máximo de Iterações e Lobos estão presentes nas Figuras 9 e 10, respectivamente. O cristal fotônico otimizado encontrado para o modo TE, visível na Figura 6, apresentou uma PBG de aproximadamente 33%. Embora não tenha sido encontrado um valor comparativo direto na literatura revisada para este modo, as curvas de convergência (Figuras 9 e 10,) mostraram uma estabilização muito rápida, sugerindo que o valor máximo encontrado pode estar próximo da solução global para a combinação de materiais SiC-ar.

Um refinamento inicial da malha do MEF, passando de 100 bits (10x10) para 400 bits (20x20) no modo TM, resultou em uma melhoria da PBG para 34,79%. Contudo, essa melhoria veio acompanhada de um aumento de 40% no custo computacional, elevando o tempo de execução de 3356 para 4714 minutos no caso mais custoso. A estabilização dos valores com o aumento de iterações e agentes de busca no modo TM refinado indica uma saturação e esgotamento do potencial computacional para essa malha, sugerindo que uma resolução ainda maior da malha do MEF poderia gerar resultados mais precisos, mas com custo computacional ainda maior. Visualmente, o refinamento da malha também levou a um notável arredondamento no formato do cristal fotônico otimizado.

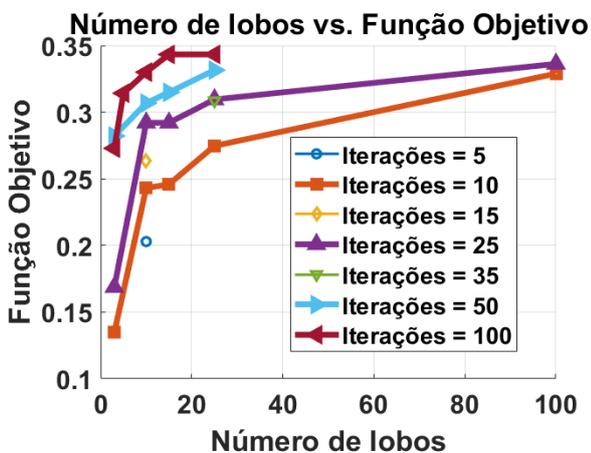


Figura 7: Curva de convergência relacionando o número de iterações máximas e o valor de Função Objetiva atingida no modo TM.

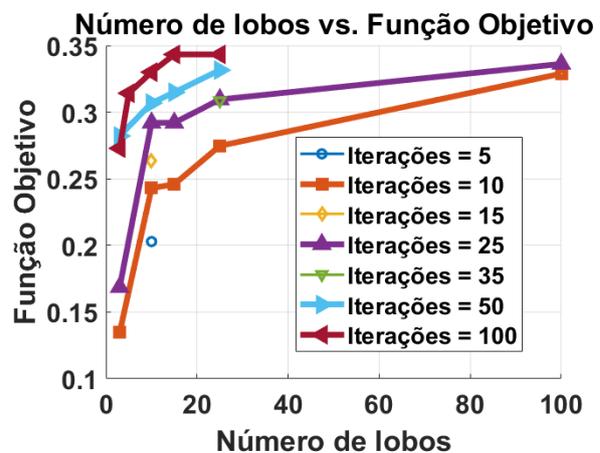


Figura 8: Curva de convergência relacionando o número de agentes de busca (lobos) e o valor de Função Objetiva atingida no modo TM.

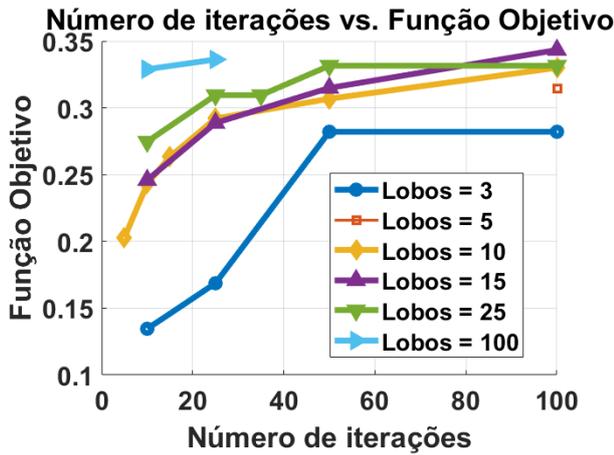


Figura 9: Curva de convergência relacionando o número de iterações máximas e o valor de Função Objetiva atingida no modo TE.

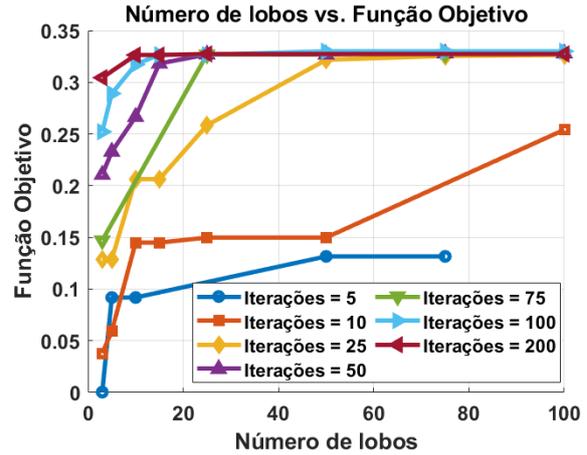


Figura 10: Curva de convergência relacionando o número de agentes de busca (lobos) e o valor de Função Objetiva atingido no modo TE.

5 CONCLUSÃO

Dessa forma, foi realizado um estudo envolvendo a implementação do algoritmo GWO para o design inverso de cristais fotônicos de largura de PBG otimizada. Os resultados obtidos indicam uma relação inversa entre o número de iterações necessárias e o número de lobos para atingir um dado valor da função objetivo, pois mais lobos permitem uma exploração mais intensa do espaço e, conseqüentemente, a saturação mais rápida da função objetivo.

As simulações para o modo TM geraram estruturas cujas propriedades fotônicas desejadas são melhores que as encontradas na literatura atual.

Quanto ao modo TE, mesmo havendo poucas informações numéricas na literatura trabalhada, é esperado que o resultado encontrado esteja próximo ao limite para a combinação de materiais SiC-ar, visto que apresenta uma curva de convergência mais veloz que a do modo TM.

Por fim, possíveis melhorias no método atualmente implementado são: o aumento da resolução do número de bits no código do código de MEF, podendo gerar resultados mais precisos para ambos os modos, embora com maior custo computacional.

6 AGRADECIMENTOS

Esse estudo foi financiado com auxílio da FAEPEX (Processo: 2527/24)