

[研究新領域報導]

拓樸光子晶體上的三維馬克斯威爾方程之快速演算法

交通大學應用數學系（所） 林文偉

簡 介

光子晶體是一種實現高校光子集成元件的新型人工光子能隙材料，在科學界和產業界被稱為「光半導體」或「未來的半導體」，並被譽為二十一世紀最具潛力的新型材料。光子晶體從概念被提出的那一天就和它巨大的應用潛力連繫在一起。目前對於光子晶體的研究主要有三個方面：理論研究、實驗研究和應用研發。經過近三十年的研究，相關的理論成果很多，但在結構設計上的進展相對落後。光子晶體的基本特徵就是具有光子能隙，特別是在三維光子晶體中有可能出現全方位的光子能隙，這一特性使其具有廣闊的應用前景。光子能隙的出現主要依賴於以下兩個因素：一是光子晶體的幾何結構，二是材料配比。一般來說，如果光子晶體中兩種介質的介電系數的差異足夠大，入射光被散射地越強烈，出現光子能隙的可能就越大。能隙是光子晶體控制電磁波的核心。因此，尋找具有較寬能隙的光子晶體的結構參數，對光子晶體材料的可控設計具有重要意義。

1. 主要研究內容及成果

基於目前對人工光子能隙材料相關的理論和數值模擬技術研究，本領航計畫「拓樸光子晶體上的三維馬克斯威爾方程之快速演算法」旨在發展高效能的數值方法求解三維馬克斯威爾方程描述下的拓樸光子晶體所具有的特徵頻率及相應特徵電磁場，可面向新型材料的負折射、鎖光等特性提供可控的設計途徑。

1.1 主要研究內容

本計畫基於對三維光子晶體所建立的理論體系和快速計算方法，結合 GPU 高性能計算技術發展高效的數值模擬技術，並將其應用於三維

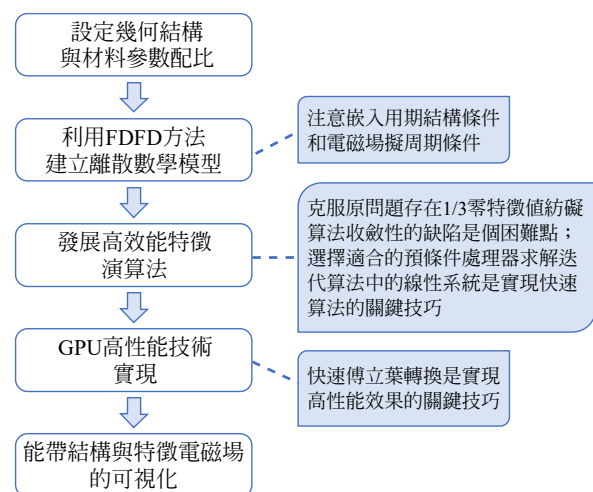
手性複合材料與三維拓樸光子晶體的可控設計。利用該技術發現新材料極具應用潛力的新物理性質，並進一步探索負折射和鎖光現象及在隱形技術上的應用。

數值模擬的程序會面臨馬克斯威爾方程對複合材料所構成的三維晶體結構數學模型的離散建模、對於超大型矩陣特徵值問題的快速計算、GPU 高性能計算平台的設計、計算結果的可視化等環節，我們的設計流程如圖一所示。

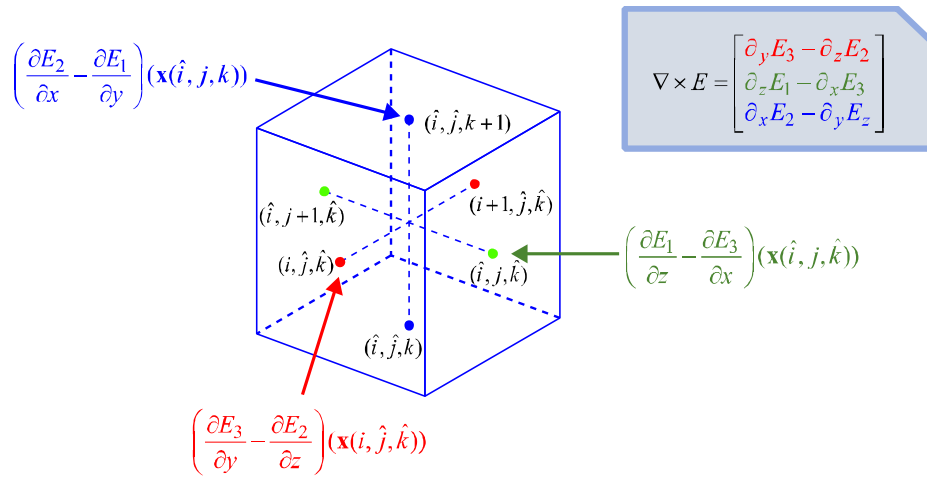
1.2 對於 14 種布拉菲晶格的通用離散矩陣表達式

借鑒以往的研究經驗[9, 10, 11, 12, 13]，我們採用 Yee 氏有限差分方法對馬克斯威爾方程組的空間部分進行網格劃分。對於電場及磁場，我們分別在網格邊與網格面的中心取值。舉例來說，對於旋度算子作用於電場上，採用 Yee 氏離散網格點取值位置如圖二所示。

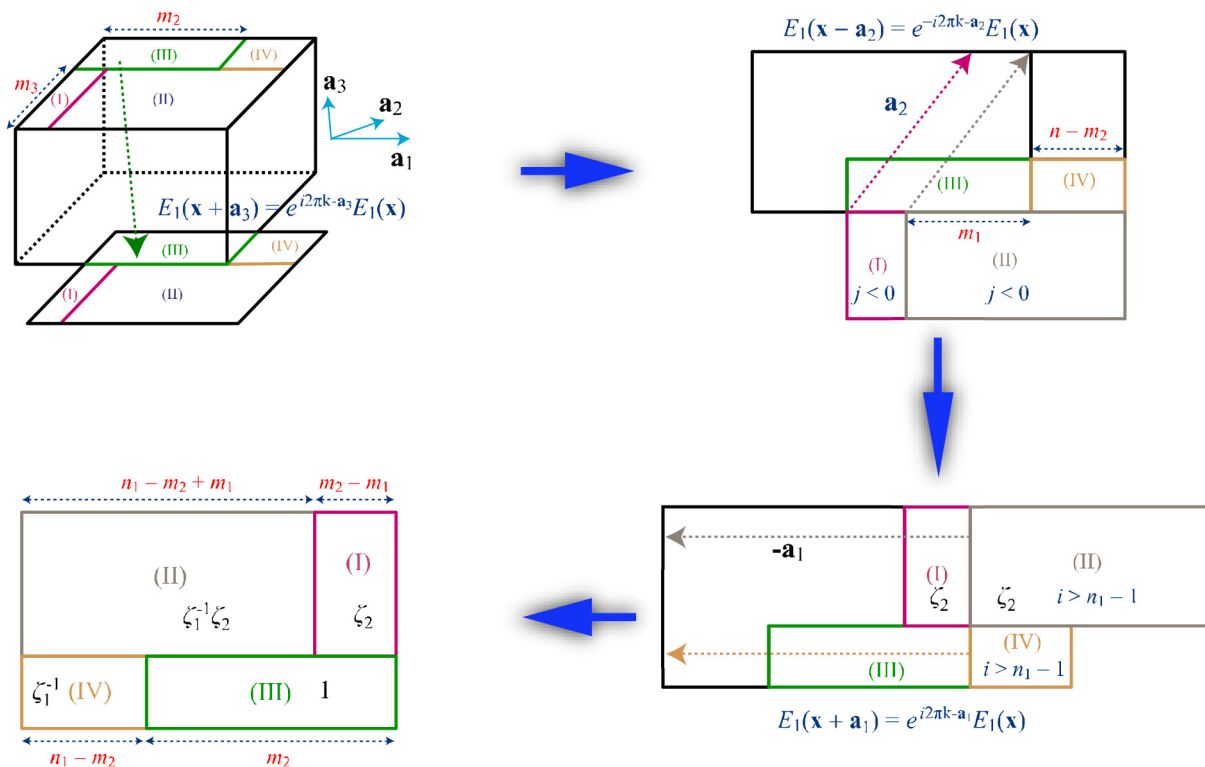
而對於任意 14 種布拉菲晶格，電磁場滿足 Bloch 擬週期條件的描述方式如圖三所示。



圖一 三維光子晶體之數值模擬的流程示意圖



圖二 部分 Yee 氏離散網格點的具體位置

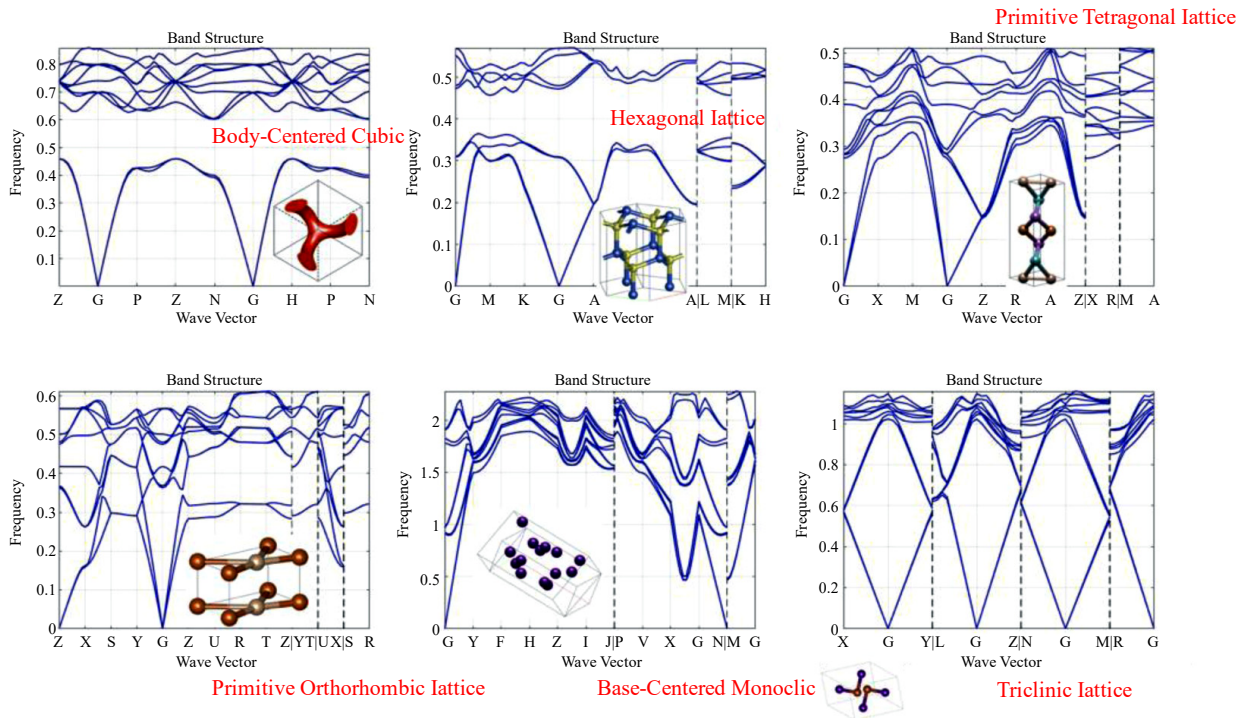


圖三 Bloch 擬週期條件在非正交晶格中的具體實現方式

根據本團隊已有的研究結果[1,5]表明，這樣的離散格式與擬週期條件可使得係數矩陣具有快速傅立葉轉換(FFT)結構，這對我們發展快速計算方法提供了有利條件，並可藉此計算任意布拉菲晶格結構中各向同性光子晶體的能帶結構。部分結果如圖四所示。

1.3 基於 GPU 的高效能數值方法及 FAME 計算函式庫

隨著對電磁規律認識的加深和電磁應用的日益廣泛，人們對於電磁波模擬計算的能力也提高越來越高的要求。現在求解的實際電磁問題的尺寸往往達到幾十個、甚至上百個電波長，需要幾百萬、以致超過千萬個未知數來進行模擬，導

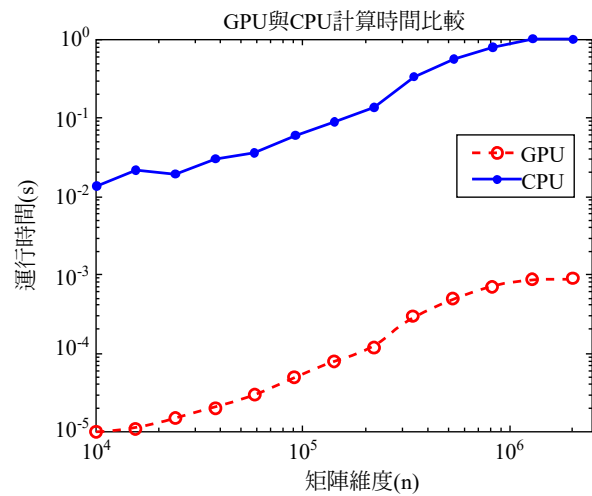


圖四 具有代表性的幾種同性光子晶體的能帶結構

致所相應的矩陣維度達到千萬等級。若以現有 CPU 的計算能力往往需費時數日甚至數週才能得到模擬的結果，這樣的實際計算需求促使我們必須重視對於高效能計算方法的研究。因此，我們以三維光子晶體材料為應用背景，發展了 GPU 高效能計算技術並以此搭建了高效數值模擬平台，用以探索光子晶體在何種幾何結構與材料配比下能具有盡量寬的能隙，為三維光子晶體材料的設計提供有效的結構參數。

在算法的有效實現上，由於本計畫中要求解的矩陣問題規模龐大，一般基於 CPU 計算的電腦軟體或伺服器都需要花費大量的運算時間，這嚴重地制約了我們所發展的數值方法在光子晶體研究中數值模擬的有效發揮。目前，我們已經利用 GPU 的高速計算能力，完成了對三維光子晶體研究中特徵電磁場的計算[5]。在離散模型問題的規模達到數百萬時，其內層迭帶步驟所涉及的 FFT 計算時間的比較如圖五所示。

由圖中可以看出，相比於只使用 CPU 的 MATLAB 軟體，GPU 計算的效率提升了至少 100 倍以上，這使得我們對於 GPU 計算技術的應用充滿信心。因此，本計畫將藉由 GPU 計算、平行計算等技術對所發展的算法進行高效能的實

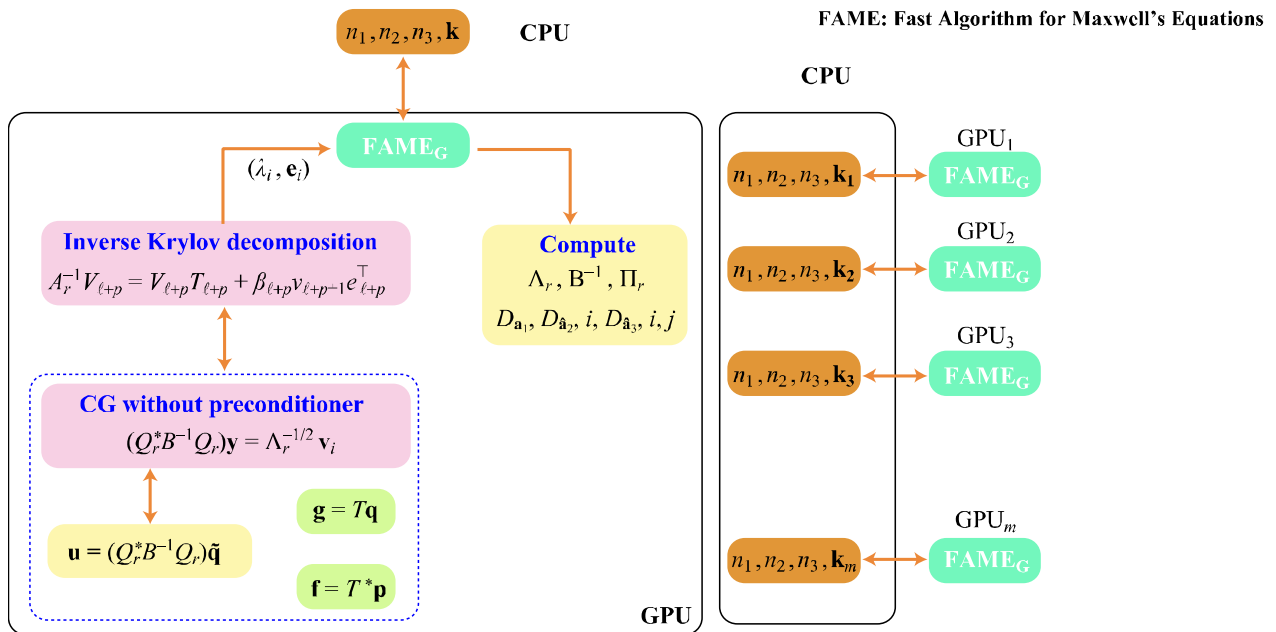


圖五 比較分別使用 GPU 與 CPU 計算 FFT 所耗費的時間

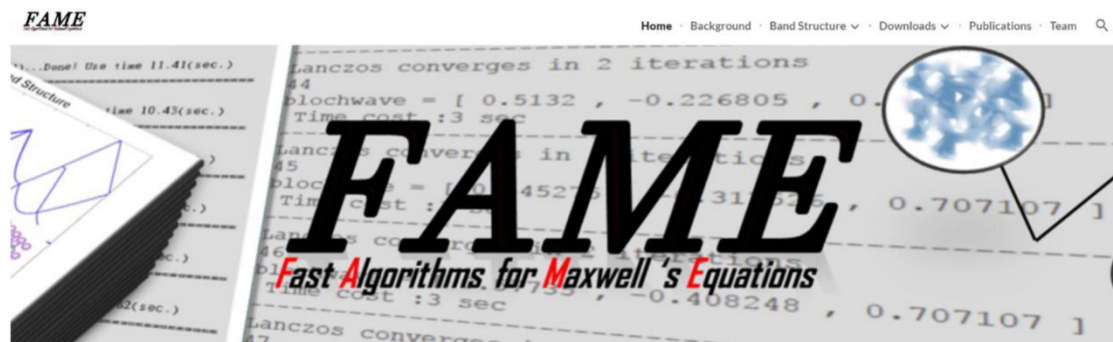
現。對此，我們設計了如下結合 CPU 與 GPU 的計算流程（圖六）。

在給定相同幾何結構與材料參數配比的情況下，我們觀察到上述結合 CPU 與 GPU 的計算流程可比單純使用 CPU 計算的情形快上 20 至 30 倍。

為了面向更多潛在領域的使用者，本計畫已



圖六 結合 CPU 與 GPU 的高效能計算流程圖



Fast Algorithms for Maxwell's Equations (FAME) is a package for solving three-dimensional source-free Maxwell's equations with periodical structures.

圖七 FAME 網站的 Logo

將這些複雜的數學離散模型、高效能演算法及基於 GPU 的高效計算流程整合成方便使用的計算套件，我們將之命名為 FAME (Fast Algorithms for Maxwell's Equations) 函式庫，並發表於網路上 (famepack.info [15]) (圖七)。

網頁中提供了本團隊基於 MATLAB、C++ 及 CUDA 等多種程式語言所發展的計算套件與相關使用教學，對於 MATLAB 更提供了方便使用者操作的圖形化使用介面。將能幫助各個潛在應用領域的使用者快速上手並使用我們的快速算法。

1.4 具有鎖光特性的複合材料研究

本計畫利用馬克斯威爾方程組對於三維手性複合材料所進行的高效能數值模擬，提供了對低頻段電磁波具有負折射現象的最佳結構參數，並預測了發生鎖光現象的臨界閾值。三維手性複合材料是實現負折射材料的一種重要途徑，其負折射效應賦予了它良好的應用前景。目前，對於手性複合材料的研​​究主要集中在二維結構上，其原因是三維手性複合材料的數值模擬複雜度極高。在這部份我們考慮了利用前述 GPU 高效能的數值模擬平台，設計在低頻段電磁波上具有負折射及鎖光現象的三維手性複合材料。

本研究群最近在各向同性手性材料的能帶結構計算研究上取得了重要進展[2,4]。考慮如圖八所示的面心立方晶格 (face-centered cubic lattice) 結構的手性材料。

此手性材料的介電系數 (ϵ)、磁導率 (μ) 及電磁耦合參數 (ζ 、 ξ) 表示如下：

$$\epsilon(x) = \begin{cases} \epsilon_i, & x \in \text{material}, \\ \epsilon_0, & x \notin \text{material}, \end{cases} \quad \mu(x) \equiv 1$$

$$\zeta(x) = \begin{cases} -i\gamma, & x \in \text{material}, \\ 0, & x \notin \text{material}, \end{cases}$$

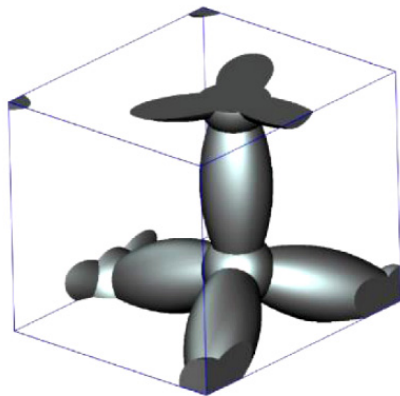
$$\xi(x) = \begin{cases} i\gamma, & x \in \text{material}, \\ 0, & x \notin \text{material}, \end{cases}$$

經由相應的離散化手續，我們將馬克斯威爾方程組轉化成矩陣特徵值問題。並且，通過前述所發展的高效能數值方法發現了當手性參數 γ

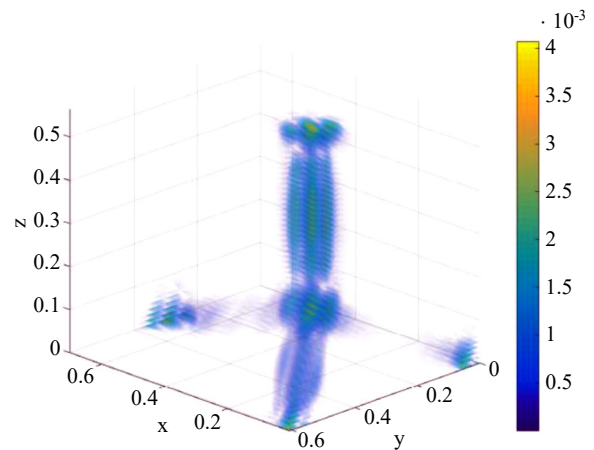
稍微大於臨界閾值 $\epsilon_i^{1/2}$ 時，最小正特徵頻率所對應的特徵電磁場性質產生了急劇的分歧變化，即絕大部分的電磁場分布均被鎖在材料內部，僅有 5% 漏在材料表面上。此奇特的特徵電磁場分部如圖九所示。

而當手性參數 γ 小於臨界閾值 $\epsilon_i^{1/2}$ 時，特徵電磁場則瀰散到整個空間中，如圖十所示。

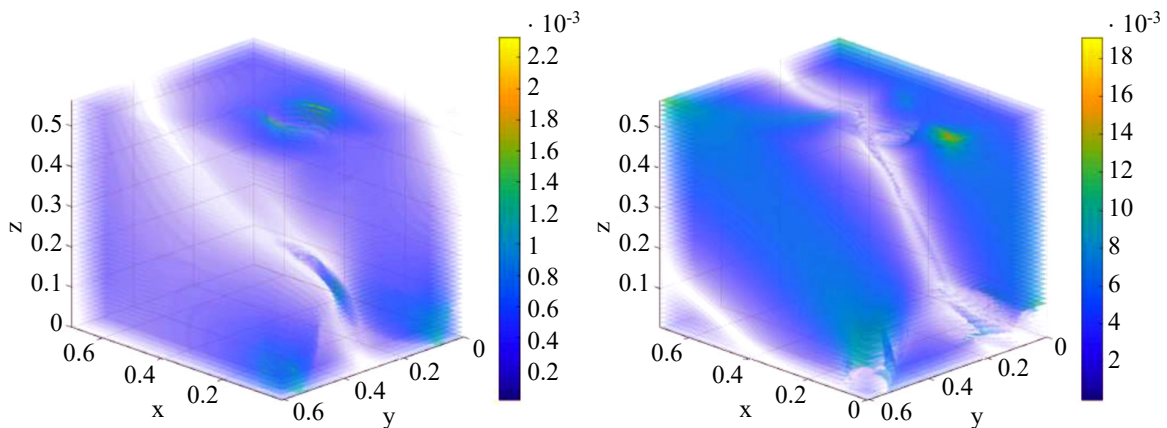
這是一個非常重要的分歧現象。這樣的數值模擬結果直觀地顯示了參數對於控制電磁波分佈方式的重要性。特別是當電磁波在手性參數超越臨界閾值時所具有的重要鎖光特性，可望在能量儲存或隱形材料上提供新的設計參考。除了數值結果，我們也對上述鎖光現象也在數學理論上進行了嚴謹的證明，這對我們下一步研究新型材料提供了非常重要的前期基礎。



圖八 具有面心立方晶格的手性材料示意圖，其中空白部分為空氣



圖九 特徵電磁場的奇特空間分布圖，可以見在材料外幾乎無電磁場



圖十 特徵電磁場於整個空間無規則分布的示意圖

2. 計畫前瞻性與未來展望

我們將開展針對陳數和超晶胞能帶結構的快速計算研究，並將數值結果應用於拓樸態分類計算，達到研究三維拓樸光子晶體的可控設計，以實現具有寬頻的新型拓樸光學材料的結構設計。

拓樸光子晶體是光子晶體的進一步發展，二者的區別是前者具有內部絕緣而表面可以單向和無損地傳輸電磁能量的獨特屬性，這賦予了它非常廣闊的應用前景。理論證明，降低光子晶體結構的對稱性，光子晶體會表現出不同尋常的寬光子能隙特性，從而提高光子晶體的光功能特性。這些以降低光子晶體結構對稱性有效增大光子晶體的能帶寬度的方法主要包括兩類，一類是在原有光子晶體晶格結構引入附加格點，一類是在均勻光子晶體結構中嵌入形狀或大小不同的另一套格點，形成雙模結構光子晶體。目前人們通過量子限制法、參雜法和對稱性破缺等方法，在光子晶體中引入能隙或者製造更大更小的能隙，以滿足不同的應用需求。近來，隨著拓樸光學材料的研究進展，人們提出兩種破壞對稱性的方法：一種是通過移除單個晶胞中的部分材料來實現對材料空間反演對稱性的破壞，此時數值模擬的研究對象便是一個超晶胞；另一種是通過增加一個外部磁場來實現對時間反演對稱性的擾動。

目前三維拓樸光子晶體相關的數值模擬尚屬探索階段。對三維拓樸光子晶體的數值模擬特別需要解決超晶胞能帶結構和陳數的計算問題：

2.1 對超晶胞結構建立相應的離散數學模型

超晶胞是由多個相同或不同的單位晶胞組合而成，其中單位晶胞的各數大於 5，這意味著離散模型的矩陣維度將非常龐大（至少上千萬），這對我們所發展的數值方法的有效性提出了很大的挑戰。目前的困難在於如何將合理的電磁場邊界條件嵌入到超晶胞結構對應的離散問題中，以及從矩陣計算的角度研究如何利用單晶胞的週期性降低超晶胞能帶結構的計算成本。

2.2 超大型矩陣特徵值問題

針對光子晶體數值模擬的問題其相應的矩陣規模已經非常大，係數矩陣維度至少在 500 萬

以上，而對於超晶胞結構更是達到至少 3000 萬以上；該類問題同樣面臨著大量零特徵值，這對於我們所感興趣的正特徵值計算將會造成巨大的干擾；該類問題的迭帶算法中需要求解一系列大型對稱不定線性系統，如何找到有效的預條件處理器來加速收斂是個十分關鍵的環節。除了這些數值難點外，在給定材料的結構和相應邊界條件的情形下，要完成能帶結構計算需耗費十分可觀的時間和硬體資源，非常不利於新型材料的高速模擬。而現有的硬體和一般的電磁模擬軟體並不能滿足這樣的大規模計算需求，因此，結合 GPU 高效能計算、平行計算等手段來發展快速的數值計算方法，對新型拓樸光學材料的研究具有重要的意義。

2.3 拓樸態識別與陳數計算

判斷一個系統處於何種拓樸態是識別和構造三維拓樸光子晶體的核心步驟，而拓樸不變量尤其是陳數的具體數值是其中主要的判斷標準，因此發展陳數的高效能計算方法是一個研究重點。目前陳數的有效計算方法較少，我們將在能帶結構高效計算的基礎上進一步對陳數發展快速有效的數值計算方法，這對當今物理界拓樸光學材料的研究具有非常重要的理論和應用價值。

未來我們考慮把光子晶體的結構設計從單純能隙調控拓展到能帶對稱性拓樸調控、從純介質材料拓展到雙向各異性介質材料、從完美光子晶體拓展到缺陷態光子晶體、從低維拓展到三維甚至時變四維系統。

參考文獻

- [1] T.-M. Huang, W.-W. Lin, H. Tsai and W. Wang, Highly Efficient GPU Eigensolver for Three-Dimensional Photonic Crystal Band Structures with Any Bravais Lattice, *Comp. Phys. Commun.*, Vol. 245, (2019), 106841 .
- [2] T.-M. Huang, T. Li, R.-L. Chern and W.-W. Lin, *Electromagnetic Field Behavior of 3D Maxwell's Equation for Chiral Media*, *J. Comp. Phys.* Vol 379, (2019), 118-131.
- [3] S.-H. Chou, T.-M. Huang, T. Li, J.-W. Lin and W.-W. Lin, *A Finite Element Based Fast Eigensolver for Three Dimensional Anisotropic*

- Photonic Crystals*, J. Comp. Phys. Vol 386, (2019), 611-631.
- [4] T. Li, T.-M. Huang, W.-W. Lin and J.-N. Wang, On the transmission eigenvalue problem for the acoustic equation with a negative index of refraction and a practical numerical reconstruction method, *Inverse Problems and Imaging*, Vol 12, No. 4 (2018), 1033-1054.
- [5] T.-M. Huang, T. Li, W.-D. Li, J.-W. Lin, W.-W. Lin and H. Tian, *Solving three dimensional Maxwell eigenvalue problem with fourteen Bravais lattices*, arXiv preprint arXiv: 1806.10782, (2018).
- [6] T.-M. Huang, W.-W. Lin and W. Wang, A Hybrid Jacobi-Davidson Method for Interior Cluster Eigenvalues with Large Null-Space in Three Dimensional Lossless Drude Dispersive Metallic Photonic Crystals, *Comp. Phys. Commun.*, Vol. 207, (2016), 221-231.
- [7] T.-M. Huang, W.-W. Lin and V. Mehrmann, A Newton-Type Method with Non-equivalence Deflation for Nonlinear Eigenvalue Problems Arising in Photonic Crystal Modeling, *SIAM Sci. Comp.* Vol. 38, No. 2, (2016), B191-B218.
- [8] T.-M. Huang, W.-Q. Huang and W.-W. Lin, *A Robust Numerical Algorithm for Computing Maxwell's Transmission Eigenvalue Problems*, *SIAM Sci. Comp.*, Vol. 37, No. 5, (2015), A2403-2423.
- [9] T. Li, W.-Q. Huang, W.-W. Lin and J. Liu, *On Spectral Analysis and a Novel Algorithm for Transmission Eigenvalue Problems*, *J. Sci. Comput.*, Vol. 64, No. 1, (2015), 83-108.
- [10] R.-L. Chern, H.-E. Hsieh, T.-M. Huang, W.-W. Lin and W. Wang, *Singular Value Decompositions for Single-Curl Operators in Three-Dimensional Maxwell's Equations for Complex Media*, *SIAM Matrix Anal. Appl.*, Vol. 36, No. 1, (2015), 203-224.
- [11] Y.-L. Huang, T.-M. Huang, W.-W. Lin and W.-C. Wang, *A Null Space Free Jacobi-Davidson Iteration for Maxwell's Operator*, *SIAM Sci. Comp.*, Vol. 37, No. 1, (2015), A1-A29.
- [12] T.-M. Huang, H.-E. Hsieh, W.-W. Lin and W. Wang, *Eigenvalue Solvers for Three Dimensional Photonic Crystals with Face-Centered Cubic Lattices*, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 272, No. 2, (2014), 350-361.
- [13] T.-M. Huang, H.-E. Hsieh, W.-W. Lin and W. Wang, Eigendecomposition of the Discrete Double-Curl Operator with Application to Fast Eigensolver for Three Dimensional Photonic Crystals, *SIAM Matrix Anal. Appl.*, Vol. 34, No. 2, (2013), 369-391.
- [14] T.-M. Huang, H.-E. Hsieh, W.-W. Lin and W. Wang, *Matrix Representation of the Double-Curl Operator for Simulating Three Dimensional Photonic Crystals*, *Math. Comp. Modelling*, Vol. 58, No. 1-2, (2013), 379-392.
- [15] <https://sites.google.com/g2.nctu.edu.tw/fame/home>