

ScaLAPACK을 이용한 Fourier 모달 해석 고유치 계산

Solving the eigenvalue problem in Fourier modal analysis with the ScaLAPACK

박정현*, 김휘, 김세윤, 이병호

서울대학교 전기·컴퓨터공학부

byoungcho@snu.ac.kr

본 연구에서는 병렬 컴퓨팅을 이용하여 Fourier 모달 해석에 필요한 시스템 행렬의 고유치 문제를 수치적으로 계산하는 방법에 대해 논의한다. 최근 미세 광학 구조에서의 근접장에 의한 표면 플라즈몬 공명 현상과 이를 이용한 광 센서, 광 결합기 등에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다. 이와 더불어, 위와 같은 연구를 수행하기 위한 수치 해석적 방법에 대한 관심이 증대되고 있다. Rigorous coupled wave analysis (엄밀한 결합 파동 해석: RCWA)는 임의의 유전율과 투자율 분포를 갖는 매질에서 진행되는 광파를 고유 모드들의 선형 결합으로 모델링하고, 각 고유 모드간의 다이내믹한 에너지 결합 관계를 이용하여 미세 구조에서의 광파를 해석하는 방법이다. 이 방법은 개별적이고 국소적인 공간에서의 전자장 분포뿐만 아니라, 고유 모드 간의 결합 과정에 대한 분석이 가능하기 때문에 물리적인 해석과 직관을 얻을 수 있는 장점이 있다.

매질 내에서 존재하는 고유 모드를 구하기 위해서는 전자장에 대한 Fourier 표현을 Maxwell 방정식에 도입하여 시스템 행렬을 얻고, 이 시스템 행렬의 고유 모드를 구해야 한다. 이는 RCWA계산에서 가장 많은 시간이 소요되는 구간이다. 보다 미세한 구조에 대한 엄밀한 해석을 하기 위해서는 보다 많은 고차 회절 성분을 고려해야 하며, 이에 따라 시스템 행렬의 고유치 문제를 푸는 데 걸리는 시간이 급격히 늘어나게 된다. 이를 해결하기 위해서는 병렬 컴퓨팅 환경에서의 분산 메모리 계산 알고리즘을 사용해야 한다. Scalable Linear Algebra PACKage (확장 가능한 선형 계산 알고리즘 : ScaLAPACK)는 병렬 컴퓨팅을 이용한 선형 시스템 해석에 널리 사용되는 계산 알고리즘이다.

일반적인 32bit 시스템에서는 주소 비트의 길이가 32bit로 제한되므로, 최대 사용할 수 있는 메모리는 4GB이다. 운영체제나 다른 프로그램들이 사용하는 메모리의 양을 고려했을 때, 연속적인 메모리 주소를 갖는 하나의 변수에 할당할 수 있는 최대 메모리 양은 2GB 가량 된다. 한편, 고유치 문제를 풀기 위해서는 고유치와 고유벡터 및 벡터 등의 변수를 고려해야 하므로, 32bit 시스템에서 고유치 문제를 풀 수 있는 행렬의 최대 크기는 500MB가량 된다. 한편, 전자장 해석에서 사용하는 변수는 double precision complex-valued 이므로, 변수 하나당 16byte를 차지한다. 따라서 메모리 500MB에 해당하는 행렬의 크기(차원)는 약 5500이 된다. 이 정도의 크기를 갖는 2차원 RCWA 시스템 행렬은, 25번째의 고차 회절 성분까지 포함할 수 있다.

그림 1(a)는 2차원 금속 슬릿 구조에 빛이 입사되었을 때의 회절 패턴의 예를 보여주며 (b)는 고차 회절 성분 범위에 따른 전달된 에너지 계산값의 수렴 정도를 보여준다. 이 슬릿 구조의 격자 주기는 400nm 이고, 슬릿의 크기는 40nm 이며, 입사파의 파장은 650nm이다. 입사 영역의 굴절률은 1.6이고, 금속 필름은 60nm 두께의 은을 가정하였다. 25번째 회절 성분 이상 포함되었을 때 에너지가 수렴값 근처의

값을 가지는 것을 볼 수 있으며, 50번째 회절 성분 이상 포함되었을 때 정확한 에너지값으로 수렴하는 것을 볼 수 있다. 그러므로 3차원 미세 광학 구조에서도 광파의 진행 방향의 주축에 수직인 평면에 대한 회절 성분을 정확하게 계산하기 위해서는 RCWA 시스템 행렬의 크기가 11000 이상되어야 하며, 이를 위해서는 병렬 컴퓨팅이 필요하다.

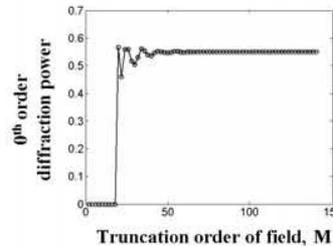
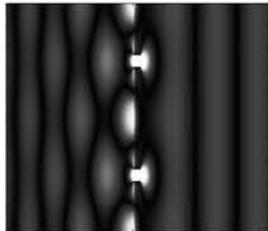


그림 1. (a) 금속 슬릿 구조에서의 회절 패턴 (b) 고차 회절 성분에 따른 에너지의 수렴 정도

병렬 컴퓨팅에서는, 가상의 프로세스 격자(grid)를 생성하고 각 노드들의 CPU가 개별 프로세스를 담당하며, CPU별로 분배된 행렬의 일부분만을 메모리에 저장한다⁽¹⁾. 전체 문제를 풀기 위해 필요한 정보는 프로세스 간의 통신을 이용한다. 따라서 프로세스 격자를 잘게 나누면 각 노드별로 메모리에 저장하고 계산을 담당하는 분배된 행렬의 크기가 작아지게 된다. 예를 들어 프로세스 격자를 16개(4x4)로 설정하여 블록 순환 분배를 할 경우, 각 노드별로 기억해야 하는 행렬의 크기를 최대값인 5500으로 설정하면, 전체 RCWA 시스템 행렬의 크기는 22000까지 가능하며, 이를 이용하면 약 50번째의 고차 회절 성분까지 고려한 전자장 해석이 가능하다. 그림 2는 LAPACK과 ScaLAPACK을 이용하여 정방 행렬의 고유치 문제를 푸는데 걸리는 시간을 보여준다. 행렬의 크기는 100부터 1600까지로 설정하였으며, 프로세스 격자를 16개(4x4)로 설정하여 블록 순환 분배를 하였다. 행렬의 크기가 1000 이하일 때는 고유치 문제를 푸는데 걸리는 시간이 크게 차이가 나지 않지만, 그 이상에서부터는 LAPACK을 사용했을 때보다, ScaLAPACK을 사용했을 때 더 짧은 시간에 문제 해결이 가능한 것을 볼 수 있다.

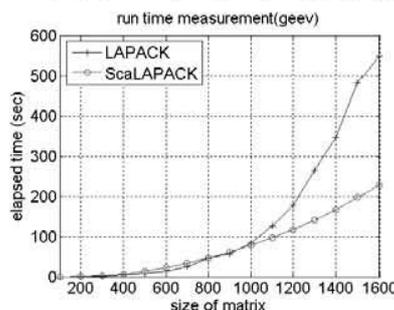


그림 2. LAPACK, ScaLAPACK을 이용했을 때의 고유치 계산 시간

본 연구에서는 병렬 컴퓨팅을 이용한 Fourier 모달 해석의 고유치 풀이 방법을 제안하였으며, 그것을 이용했을 때 일반적인 32bit 계산 시스템에서 더욱 많은 고차 회절 성분을 고려할 수 있음을 알 수 있었다. 또한 다수의 프로세스를 이용하여 고유치 문제를 풀었을 때, 계산 시간 또한 크게 단축될 수 있음을 보였다. 이와 같은 방법을 이용하면, 앞으로 더욱 미세한 광학 구조에서의 엄밀한 전자장 해석이 가능할 것이다.

1. L. S. Blackford, J. Choi, A. Cleary, E. D’Azevedo, J. Demmel, I. Dhillon, J. Dongarra, S. Hammarling, G. Henry, A. Petitet, K. Stanley, D. Walker, and R. C. Whaley, ScaLAPACK Users’ Guide, SIAM Publications, Philadelphia, PA, ISBN 0-89871-397-8 (1997).