

Применение нейронных сетей для решения задачи дифракции электромагнитного излучения на группе цилиндрических объектов¹

Е. Е. Читоркин*, Д. Л. Головашкин*,**

* Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королева, Самара, Россия

** Отделение «Институт систем обработки изображений – Самара» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники федерального государственного бюджетного учреждения «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Поступила в редколлегию 15.10.2025 г. Принята 25.11.2025 г.

Аннотация—В данной работе рассмотрено применение графовых нейронных сетей и сверточных нейронных сетей для моделирования явления дифракции электромагнитного излучения на группе цилиндрических объектов. Проведено качественное и количественное сравнение полученных моделей машинного обучения. Также обсуждается вопрос о распространении этого подхода на более сложные оптические элементы, такие как фотонно-кристаллические волноводы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: сверточные нейронные сети, графовые нейронные сети, дифракция.

DOI: 10.53921/18195822_2025_25_3.1_598

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы наблюдается активное развитие нанофотоники, особенно в области различных фотонно-кристаллических структур: волноводов, узлов ввода-вывода излучения, интерференционных логических элементов и т.п. Этот стремительный прогресс обусловлен значительным повышением производительности вычислительных систем, используемых для расчета элементов нанофотоники, что в свою очередь обуславливает интерес к разработке новых алгоритмов решения задач в рамках строгой теории дифракции. Как правило, для этого используются либо аналитические подходы (например, метод Ми [1]), либо численные методы, такие как метод конечных разностей во временной области (FDTD-метод) [2] и RCWA [3]. Однако, несмотря на известные преимущества, эти подходы имеют ряд недостатков. Например, аналитические методы применимы только к ограниченному набору случаев, для которых известны точные решения (например, дифракция на цилиндре или сфере [4]). Использование численных методов, таких как FDTD и RCWA, сталкивается с ограничениями на высокую вычислительную сложность (например, ограниченная память графического процессора требует постоянной передачи данных между оперативной памятью компьютера и памятью графического процессора, что значительно снижает эффективность), которые практически воспрепятствуют изучению протяженных структур в двумерном случае и, тем более, в трехмерном.

Эти недостатки и проблемы мотивируют разработку инновационных подходов и методов для решения задачи дифракции электромагнитных волн на сложных структурах. В последние

¹ Работа выполнена в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

годы различными авторами предложены алгоритмы машинного обучения, в частности, нейронные сети, призванные решить данную проблему. Примечательно, что существует большое разнообразие предлагаемых архитектур и методик обучения для различных типов нейронных сетей. Ниже мы рассмотрим ключевые архитектуры, используемые для решения таких задач.

- a. **Графовые нейронные сети (GNN).** Например, в работе [5] авторы исследуют использование графовых нейронных сетей для решения задачи дифракции электромагнитных волн на отдельных цилиндрических элементах со сложной геометрией поперечного сечения в двумерном случае. Авторами рассматривается следующая задача: плоская монохроматическая волна с длиной волны $\lambda = 1$ мкм падает на объект, характеризующийся фиксированной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 2,1025$. Расчетная область ограничена тремя длинами волн вдоль каждой пространственной оси. Сеточная область задана таким образом, что на каждую длину волны приходится 60 пространственных узлов. Для обучения этой нейронной сети авторы используют пары изображений, представляющих собой распределение напряженности электрического поля на двух последовательных временных шагах, отстоящих друг от друга на один временной шаг Δt . В результате авторам удалось получить погрешность решения с помощью нейронной сети 3,2% по сравнению с численным решением.
- b. **Рекуррентные нейронные сети (RNN).** В работе [6] авторы рассматривают применение рекуррентных нейронных сетей для решения задачи рассеяния электромагнитных волн идеально проводящими цилиндрическими объектами. Такой подход позволяет предсказать поле на следующем временном шаге, отстоящем на Δt от последнего экземпляра, представленного во входном наборе данных, используя предварительное обучение на нескольких предыдущих шагах (в отличие от предыдущей работы, где для обучения использовался только один временной шаг). Авторы работают в двумерном случае, моделируя дифракцию ТЕ-поляризованного гауссовского импульса с частотой 2 ГГц, падающего на идеально проводящий объект. Обучающий набор данных подготавливается с использованием метода FDTD в небольшой сеточной области с пространственными размерами 128×128 узлов. Исследование ограничено круглыми и квадратными поперечными сечениями, при этом радиус окружности и длина стороны квадрата варьируются в диапазоне $0,4\lambda - 0,6\lambda$. Авторам удалось получить погрешность решения 5%.
- c. **Нейронные сети, основанные на физике (PINN).** В работе [7] авторы исследуют решение задачи дифракции плоской монохроматической электромагнитной волны на цилиндре круглого, квадратного или треугольного сечения с использованием PINN. Ключевой особенностью этого типа сетей является конструкция функции потерь, которая включает в себя не только отклонение решения нейронной сети от истинного значения, но и физический закон, которому должно удовлетворять решение нейронной сети. В результате авторы добились погрешности решения в 6,8%.
- d. **Сверточные нейронные сети (CNN).** В работе [8] авторы применяют нейронные сети для решения задачи дифракции плоской монохроматической волны на диэлектрических цилиндрических объектах с различными поперечными сечениями и показателями преломления. Обучающие данные состояли из решений, полученных с использованием метода конечно-разностной частотной области (FDFD-метод) на небольшой сетке размером 128×128 , с использованием только изображений, показывающих конечную дифракционную картину, что отличает эту работу от предыдущих исследований. С помощью серии вычислительных экспериментов авторы продемонстрировали, что архитектура U-Net обладает преимуществами по сравнению с другими конфигурациями CNN, наиболее заметным из которых является низкая средняя ошибка решения. Для объектов с показателями преломления, не представленными в обучающем наборе данных, ошибка решения составила 8,6%.

Несмотря на преимущества вышеупомянутых архитектур, главным из которых является относительно низкий уровень средних ошибок при решении, эти подходы оставляют достаточно возможностей для дальнейшего развития и модификации. Например, исследования [5, 6] дают решения только на один временной шаг Δt , значение которого обычно очень мало (это ограничение напрямую связано с критерием устойчивости Куранта для сетки Yee [2], используемой в методе FDTD, который используется для генерации обучающих данных). Более того, работа [8] фокусируется исключительно на дифракции на идеально проводящих объектах, что означает отсутствие поля внутри оптического элемента. В работах [7, 8] рассмотрены только случаи, когда длина волны падающей монохроматической электромагнитной волны сопоставима с геометрическими размерами поперечного сечения цилиндрического объекта, в то время как случаи, когда длина волны значительно превышает радиус круглого цилиндра (или наоборот), остаются без внимания.

Таким образом, целью данной работы является разработка нейросетевой модели, способной обеспечить высокоточное решение задачи дифракции плоской монохроматической электромагнитной волны на наборе цилиндрических объектов круглого поперечного сечения.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Прежде чем перейти к обсуждению нейронных сетей, обратимся к постановке задачи. Данный этап критически важен, поскольку он определяет инструменты для подготовки обучающих данных и сужает диапазон потенциальных архитектур нейронных сетей. Для начала определим пространственную конфигурацию диэлектрических цилиндрических объектов с круговым поперечным сечением. Предположим, что два таких объекта расположены относительно друг друга таким образом, что линия, соединяющая их центры, параллельна волновому фронту падающей монохроматической плоской ТЕ-волны. Это означает, что оба цилиндра будут освещены электромагнитной волной, которая не была искажена предварительным рассеянием на диэлектрическом объекте (рис. 1). Второй вариант взаимного расположения является

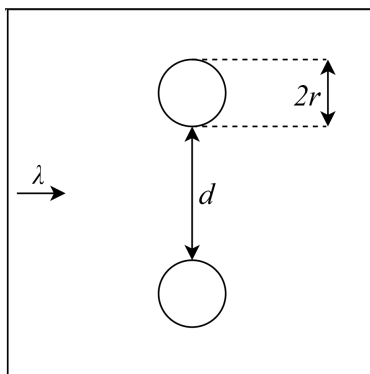


Рис. 1. Первый вариант взаимного расположения двух цилиндров.

модификацией предыдущей конфигурации. Для этого осуществим поворот вышеупомянутого варианта на 90° в плоскости XOY . В результате прямая, соединяющая центры круговых поперечных сечений, становится перпендикулярной волновому фронту падающей электромагнитной волны. Следовательно, цилиндр, расположенный ближе к источнику излучения, будет подвергаться воздействию неискаженной волны, в то время как второй цилиндр будет освещаться излучением, рассеянным первым цилиндром (рис. 2). Наконец, рассмотрим третью конфигурацию, которая сочетает в себе оба предыдущих случая. Пусть центры круговых поперечных сечений цилиндрических объектов расположены в вершинах квадрата со стороной d .

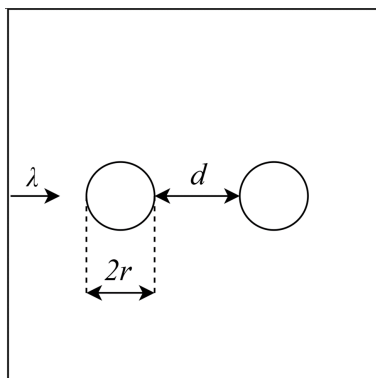


Рис. 2. Второй вариант взаимного расположения двух цилиндров.

Этот квадрат ориентирован в плоскости XOY таким образом, что две его стороны параллельны фронту падающей электромагнитной волны, а две другие перпендикулярны ему. Таким образом, два цилиндра (те, что расположены ближе к источнику излучения) будут освещаться неискаженной плоской волной, тогда как остальные два будут освещаться волнами, рассеянными от первой пары (рис. 3). Последняя конфигурация представляет собой примитивную

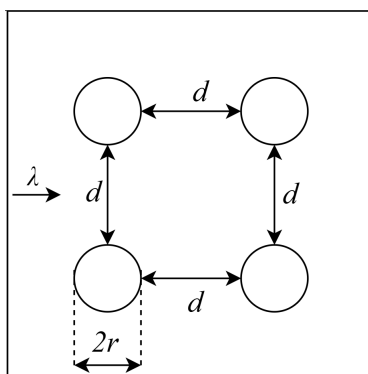


Рис. 3. Взаимное расположение четырех цилиндров

фотонно-кристаллическую структуру с прямоугольной решеткой периода d . Будем считать, что все цилиндры изготовлены из одного и того же материала с показателем преломления n . В качестве падающего излучения выбрана монохроматическая плоская ТЕ-волна длины λ . Кроме того, предположим, что на вход нейронной сети должна поступать двумерная сеточная область в виде матрицы $N \times N$, где значение в каждом пространственном узле соответствует показателю преломления в этой точке пространства [8]. На выходе нейронной сети будем ожидать дифракционную картину, возникающую в результате взаимодействия монохроматической плоской ТЕ-волны с набором из двух или четырех диэлектрических цилиндрических объектов.

3. АРХИТЕКТУРЫ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Рассматриваемая задача является задачей регрессии в терминологии теории нейронных сетей. Рассмотрим следующие архитектуры.

3.1. Сверточная нейронная сеть «кодер-декодер»

Для проектирования сверточной архитектуры будем опираться на работы [8, 9]. В [8] решается задача с аналогичной постановкой, но только для одного цилиндрического объекта. В [9] рассматривается принципиально иная задача: здесь профиль области используется для прогнозирования добротности фотонного кристалла. Эта сеть позволила авторам достичь точности, превышающей 99%, демонстрируя перспективность такого подхода. Хотя эта задача существенно отличается от формулировки, предложенной авторами, она по-прежнему является задачей регрессии, и, таким образом, методология, описанная в этой работе, может быть адаптирована к данной задаче. Пусть нейронная сеть состоит из сверточного кодера и декодера. Они состоят из последовательных блоков, каждый из которых содержит двухмерный сверточный слой (с обратной двумерной сверткой, используемой для декодера), слой усреднения и слой пакетной нормализации. Между кодером и декодером разместим трехслойную полносвязную сеть. Наконец, после декодирования результирующие данные передаются через другую полносвязную сеть, за которой следует слой изменения формы для преобразования линейного вектора данных в требуемый формат (матрица $N \times N$). Таким образом, полученная нейронная сеть представляет собой комбинацию идей из [8, 9], адаптированных для решения поставленной авторами задачи (рис. 4).

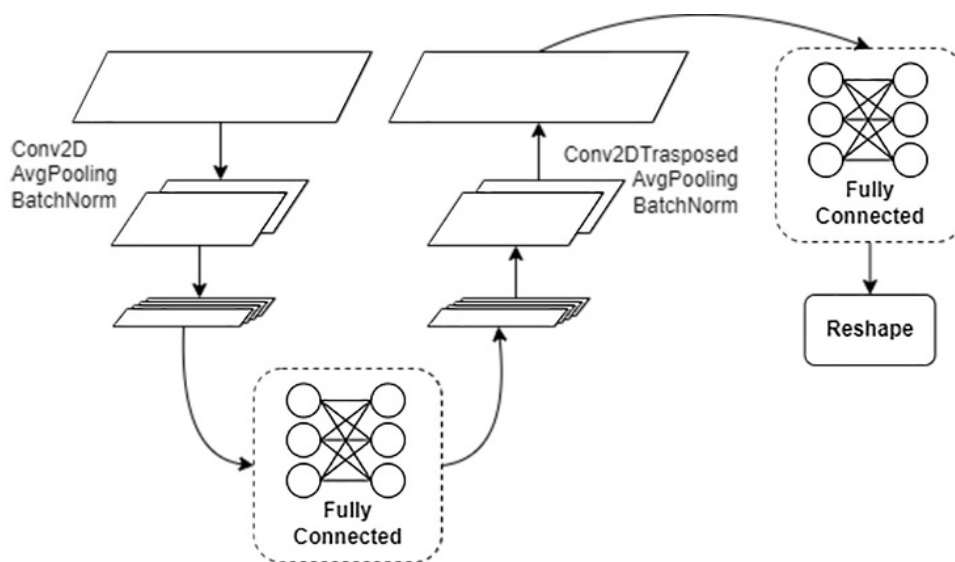


Рис. 4. Архитектура сверточной нейронной сети.

3.2. Графовая нейронная сеть

В отличие от сверточной сети, которая в контексте данной задачи оперирует с сеточной областью, графовая нейронная сеть (GNN) обрабатывает данные, структурированные в виде графа. Принцип работы графовых сетей основан на обмене информацией между соседними вершинами, поэтому для использования этой архитектуры достаточно преобразовать входные данные в графовую структуру. С этой целью предварим описание архитектуры графа алгоритмом преобразования входных данных в требуемый формат. Напомним, что граф определяется как набор вершин (узлов) и соединяющих их ребер. Будем предполагать, что граф неориентирован (это означает, что если вершина А соединена с вершиной В, то вершина В также соединена с вершиной А). Вершины графа определяются набором узлов вместе с описаниями соответствующих значений. Аналогичным образом определяются и ребра графа. Однако

для полного описания графа необходимо также указать связи между вершинами, т.е. матрицу смежности графа. Эта матрица может быть разреженной (если граф имеет мало связей) или плотной (если большинство вершин взаимосвязаны). Это описание может быть сохранено либо в виде матрицы смежности (что интуитивно понятно, но требует больших вычислительных затрат), либо в виде пар вершин, представляющих начало и конец каждого ребра (что очень удобно для разреженных графовых матриц). Для нашей задачи мы предполагаем, что вершины описываются показателем преломления в соответствующей пространственной точке, в то время как ребра характеризуются расстоянием между пространственными точками, связанными со связанными вершинами. Связи между вершинами определяются следующим образом: две вершины считаются соединенными ребром, если они являются соседними в соответствующей прямоугольной сеточной области. Таким образом, матрица, описывающая распределение показателя преломления в области сетки, преобразуется в граф.

Графовые нейронные сети выполняют вычисления на уровне вершин и ребер, поэтому рассматриваемая задача сводится к регрессии на уровне вершин, поскольку необходимо определить напряженность электрического поля в каждом узле сетки (вершине графа). Согласно [5], рассмотрим следующую архитектуру. Входной граф обрабатывается двумя кодерами (для вершин и ребер соответственно), каждый из которых состоит из трех полносвязанных слоев с функцией активации ReLU. Затем данные последовательно передаются через пять слоев обобщенной графовой свертки (GCN). Подробнее рассмотрим операцию свертки графа: каждый узел объединяет информацию со всех входящих в него ребер и всех связанных с ним узлов (этап передачи сообщений). Затем собранные данные агрегируются, объединяются с текущим состоянием узла и используются для обновления сохраненного значения узла. Таким образом, при выбранном представлении области сетки в виде графа каждый узел может получать информацию от любого другого узла, хотя и в преобразованном, а не исходном виде. Наконец, результирующие наборы признаков вершин переходят к этапу декодирования, так что каждая вершина в конечном итоге содержит одно значение – напряженность электрического поля в пространственной точке, связанной с этой вершиной. Полная архитектура показана на рисунке 5.

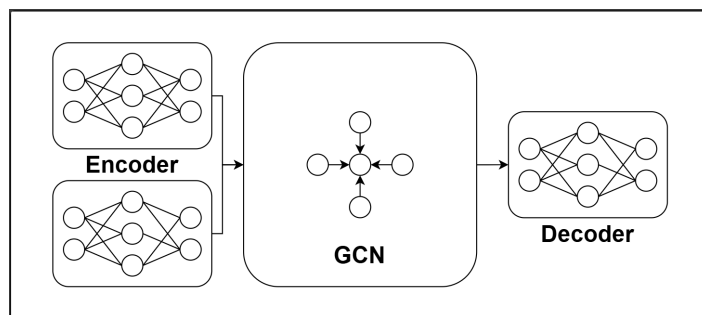


Рис. 5. Архитектура графовой нейронной сети.

4. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Для исследования и сравнения предложенных архитектур было подготовлено несколько обучающих наборов данных. Предполагалось, что плоская монохроматическая ТЕ-волна ($\lambda = 1$ мкм) падает на набор диэлектрических цилиндров круглого сечения. Их взаимное расположение соответствует конфигурациям, описанным в разделе 2 (рис. 1–3). Размер расчетной области составил $10 \text{ мкм} \times 10 \text{ мкм}$. Такие параметры, как радиус цилиндра, расстояние между центрами цилиндров d и показатель преломления материала цилиндра, варьировались для

каждого полученного решения: значения радиуса были взяты в диапазоне от $0,1\lambda$ до 2λ ; расстояние между цилиндрами варьировалось в диапазоне от $0,1\lambda$ до 1λ ; показатель преломления материала цилиндра составлял от 1,46 до 1,9, что соответствует допустимым показателям преломления оптических стекол [10]. В отличие от всех ранее упомянутых работ, исходные решения были получены с использованием аналитического решения задачи дифракции для группы цилиндрических объектов, полученного с использованием теории Ми [1] и реализованного в математическом пакете MieSolver на языке программирования MATLAB [11]. Решения были вычислены в области сетки размером 256×256 узлов вдоль пространственных осей. Две нейронные сети, описанные в предыдущем разделе, были обучены и протестированы на разных непересекающихся подмножествах подготовленного набора данных (обучающий и тестовый наборы). Реализация этих нейронных сетей была осуществлена с использованием Python 3.11, выбранного за его простой синтаксис и удобные интерфейсы для работы с библиотекой TensorFlow, которая позволяет создавать и обучать различные архитектуры нейронных сетей. Функция потерь была определена как среднеквадратичная ошибка между прогнозируемым и истинным значениями, в то время как ошибка для отдельного решения была рассчитана по формуле:

$$Error = \frac{\sum_{(i,j)} |y_{true}(i,j) - y_{pred}(i,j)|}{\sum_{(i,j)} |y_{true}(i,j)|} \times 100\%, \quad (1)$$

где $y_{true}(i,j)$ - истинное значение напряженности электрического поля в узле с координатами (i,j) , а $y_{pred}(i,j)$ - значение, предсказанное нейронной сетью. Средняя ошибка была определена как среднее значение ошибок, вычисленных по формуле 1 для всех экземпляров в тестовом наборе данных. Во время обучения использовался оптимизатор Adam [12] со значением скорости обучения 10^{-4} . Меньшие значения этого параметра приводили к тому, что функция потерь не достигала минимума. И наоборот, использование значений на порядок больших препятствовало полному обучению нейронной сети. Чтобы избежать переобучения, был использован механизм ранней остановки. Сверточная сеть обучалась в течение 100 эпох, в то время как графовой нейронной сети потребовалось 75 эпох. На рисунке представлено поведение функции потерь во время обучения нейронных сетей (рис. 6). 5. Этот график показывает успешное обучение сверточной нейронной сети из-за уменьшения значений функции потерь, которые в процессе обучения стали ближе к нулю. Средняя ошибка решения составляет 18% для сверточной сети и более высокое значение для графовой нейронной сети. Следует отметить, что, несмотря на очевидный процесс обучения, графовая нейронная сеть не дала удовлетворительных результатов. Это можно объяснить следующим образом: обработка на основе графов по своей сути является локальной на уровне узлов, что делает ее непригодной для решения задачи дифракции в формулировке, предложенной авторами этой работы. В работе [5] эта архитектура использовалась для моделирования распространения электромагнитного поля на малом временном шаге, тогда как в данном случае задача формулируется без учета начальных значений электрического поля (предполагается, что в начальный момент поле равно нулю). В текущей постановке понятие временного шага отсутствует. Отдельно отметим временную эффективность предложенного подхода: время вычислений и получаемое ускорение приведены в таблице.

Таблица 1. Время вычислений и ускорение по сравнению с аналитическим методом

Количество цилиндров	Время, аналитическому методу	Время, нейронная сеть	Ускорение
2	62 мс	1,9 мс	32,5
4	114 мс	1,9 мс	59,8

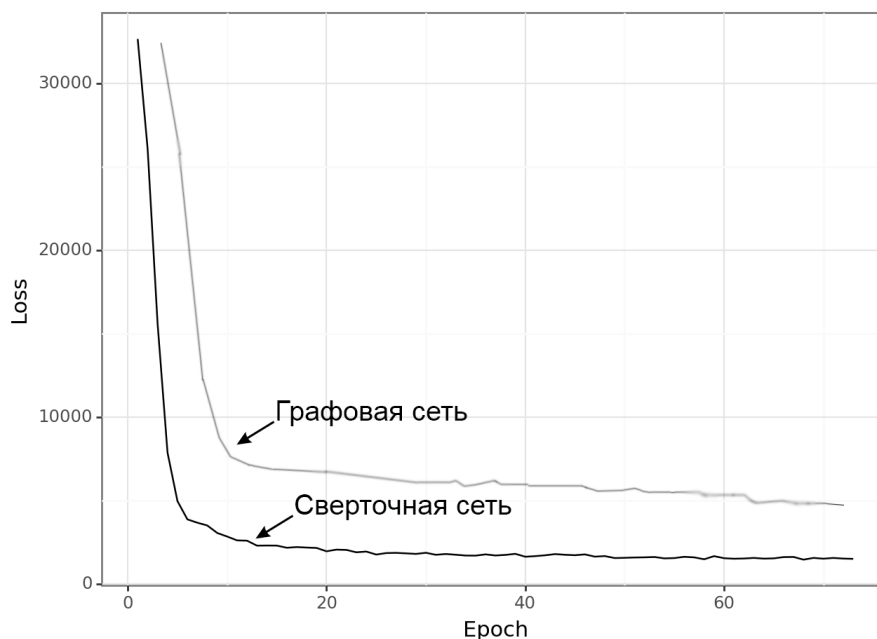


Рис. 6. Функция потерь.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, применение сверточных нейронных сетей позволяет на порядок сократить время вычислений при решении задачи дифракции электромагнитных волн на группе цилиндрических объектов. Более того, нейронная сеть демонстрирует способность составления прогноза для различных значений параметров, включая радиус цилиндра, расстояние между цилиндрами и показатель преломления материала. Этот подход может быть распространен на случаи, связанные с большим количеством цилиндрических объектов и более сложными фотонно-кристаллическими структурами, такими как фотонно-кристаллические волноводы. Математический пакет, используемый для получения аналитических решений задач дифракции, позволяет моделировать и такие структуры. Например, на рисунке 7 показано распределение поля в фотонно-кристаллическом волноводе с параметрами $\lambda = 1,55$ мкм, $n = 3,4757$, $r = 0,1656$ мкм, $d = 0,345$ мкм, которое соответствует решению, полученному в [13] с использованием метода FDTD, реализованного в программном обеспечении Ansys Lumerical. Это подтверждает, что такие данные действительно могут быть использованы для обучения нейронной сети. В этом случае мы также можем использовать графовую нейронную сеть, однако каждая вершина графа может представлять не отдельный узел сеточной области, а весь цилиндр целиком. Тогда мы сможем предсказать различные интегральные характеристики оптического элемента, а не полное распределение поля. Предложенная методология возможно окажется перспективной при моделировании периодических фотонных структур, где классические численные методы сталкиваются со значительными ограничениями на системные ресурсы ЭВМ. Нейросетевой подход обеспечивает приемлемую точность при значительном сокращении требуемых вычислительных ресурсов, особенно когда необходимо учитывать множество вариаций параметров. Это преимущество становится еще более очевидным при решении задач оптимизации (в рамках обратной задачи дифракции), требующих многочисленных итераций одного и того же базового расчета дифракции с различными геометрическими параметрами или параметрами материала. Полученные результаты свидетельствуют о том, что методы машинного обучения могут служить мощным дополнением к традиционным методам вычислительной

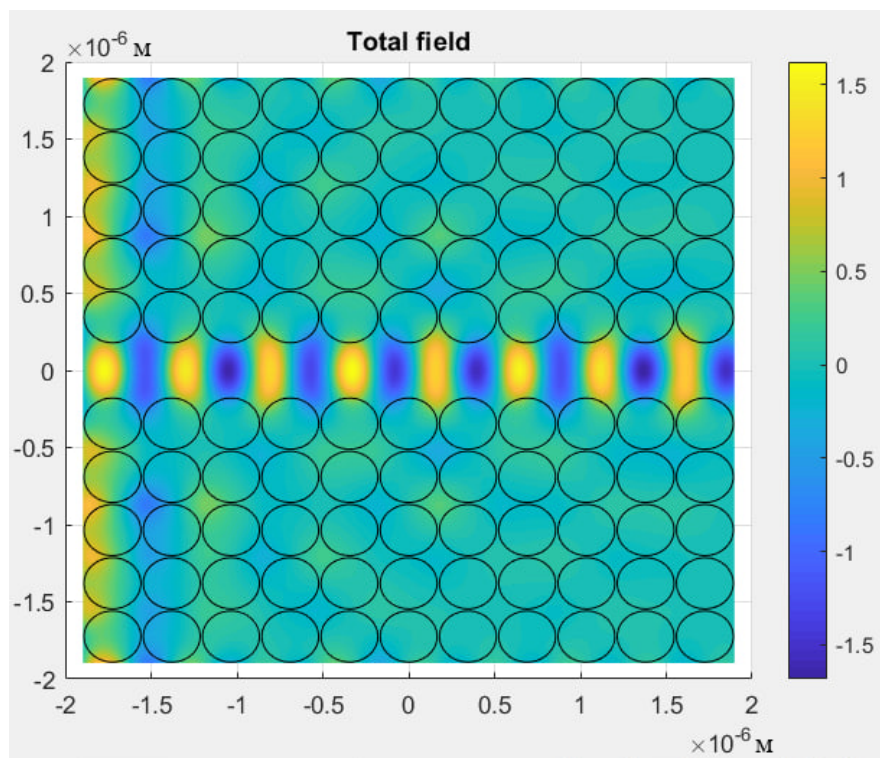


Рис. 7. Пример фотонно-кристаллического волновода.

электродинамики, особенно в случаях, требующих быстрой оценки множества конфигураций или оптимизации параметров в режиме реального времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mie G. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, 1908, pp. 377–445.
2. Taflov A. *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Norwood: Artech House, 2005.
3. Moharam M., Gaylord T. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, vol. 71, no. 7, pp. 811–818.
4. Born M., Wolf E. *Principles of Optics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2019.
5. Kuhn L., Repan T., Rockstuhl C. Exploiting Graph Neural Networks to Perform Finite-Difference Time-Domain Based Optical Simulations. *APL Photonics*, 2023, vol.8, no. 3, 036109.
6. Noakoasteen O., Wang S., Peng Z., Christodoulou C. Physics-Informed Deep Neural Networks for Transient Electromagnetic Analysis. *IEEE Open Journal of Antennas and Propagation*, 2020, vol. 1, no. 1, pp. 404–412.
7. Liu H., Fan Y., Du L., Zhao J., Sun Ch., Zhou H. Physics-Informed Deep Model for Fast Time-Domain Electromagnetic Simulation and Inversion. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2024, vol. 72, no. 10, pp. 7807–7820.
8. Qi S., Wang Y., Li Y., Wu X., Ren Q., Ren Y. Two-Dimensional Electromagnetic Solver Based on Deep Learning Technique. *IEEE Journal on Multiscale and Multiphysics Computational Techniques*, 2020, vol. 5, pp. 83–88.
9. Li R., Gu X., Li K., Huang Y., Li Zh., Zhang Zh. Deep learning-based modeling of photonic crystal nanocavities. *Optical Materials Express*, 2021, vol. 11, no. 7, pp. 2122–2133.

10. ГОСТ 13659-78. Стекло оптическое бесцветное. Физико-химические характеристики. Основные параметры. Издание официальное. М.: Издательство стандартов, 1980.
11. Hawkins S. Algorithm 1009: MieSolver – An Object-Oriented Mie Series Software for Wave Scattering by Cylinders. *ACM Trans. Math. Softw.*, 2020, vol. 46, no. 2, pp. 1–28.
12. Kingma D. P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization. *3rd International Conference on Learning Representations (ICLR)*. San Diego, CA, USA, 2015, pp. 1-15.
13. Сошников Д.В., Головашкин Д.Л., Павельев В.С. Оценка влияния технологических погрешностей изготовления на работу фотонно-кристаллических волноводов. *Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем : сб. ст. по материалам XVII Всерос. с междунар. участием науч.-техн. конф.*. Пенза: Издательство ПГУ, 2022, стр. 128–133.

The application of neural networks to solve the problem of electromagnetic radiation diffraction on a group of cylindrical objects

E. E. Chitorkin, D. L. Golovashkin

In this paper, the application of graph neural networks and convolutional neural networks for modeling the phenomenon of electromagnetic radiation diffraction on a group of cylindrical elements is considered. A qualitative and quantitative comparison of the obtained models is carried out. The issue of extending this approach to more complex optical elements, such as photonic crystal waveguides, is also being discussed.

KEYWORDS: convolutional neural networks, graph neural networks, diffraction.