

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»  
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

На правах рукописи

**Кривошеева Юлиана Юрьевна**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ОДНОГО КЛАССА  
ПРОСТРАНСТВЕННО-ВАРИАНТНЫХ СТРУКТУР**

**1.2.2. Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ**

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата технических наук

Научный руководитель:

Головашкин Димитрий Львович

доктор физико-математических наук,

профессор

Самара – 2026

## Оглавление

<b>Введение</b> .....	5
<b>1 Математические модели</b> .....	17
<b>1.1 Математическая модель пространственно-вариантных структур</b> .....	17
<b>1.1.1 Обзор существующих моделей</b> .....	17
<b>1.1.1.1 Решетки Браве</b> .....	17
<b>1.1.1.2 Обратная решетка</b> .....	18
<b>1.1.1.3 Модель, основанная на разложении функции в ряд Фурье</b> .....	19
<b>1.1.2 Уточненная модель одного класса пространственно-вариантной структуры</b> .....	19
<b>1.1.2.1 Линейный дефект в решетке</b> .....	20
<b>1.1.2.2 Локальный дефект в решетке</b> .....	21
<b>1.2 Генетический алгоритм и его математическая модель</b> .....	22
<b>1.2.1 Описание алгоритма</b> .....	23
<b>1.2.2 Математическая модель простого генетического алгоритма</b> .....	25
<b>1.2.3 Существующие модели генетических алгоритмов</b> .....	29
<b>1.2.4 Математические модели определения параметров генетического алгоритма</b> .....	33
<b>1.2.5 Сходимость генетического алгоритма</b> .....	35
<b>1.3 Строгая теория дифракции и математические модели с ней связанные</b> .....	37
<b>1.3.1 Уравнения Максвелла</b> .....	37
<b>1.3.2 Двумерный случай</b> .....	39
<b>1.3.3 Учет дисперсии материала</b> .....	41
<b>1.3.4 Краевые условия, наложение поглощающих слоев</b> .....	42
<b>Выводы по главе 1</b> .....	45
<b>2 Разностный метод решения уравнений Максвелла во временной области (FDTD-метод)</b> .....	46
<b>2.1 Разностные схемы для уравнений Максвелла</b> .....	46
<b>2.1.1 Разностные схемы Yee</b> .....	46
<b>2.1.2 Учёт дисперсии материала</b> .....	48
<b>2.1.3 Наложение поглощающих слоев</b> .....	49
<b>2.1.4 Задание падающей волны</b> .....	49
<b>2.1.5 Неоднородные сеточные области</b> .....	52

<b>2.2 Решение прямой задачи дифракции с помощью пакета Ansys Lumerical</b> .....	54
<b>2.3 Согласование FDTD метода и генетического алгоритма</b> .....	55
<b>2.4 Применение модели пространственно-вариантной структуры с наложением сеточной области Yee</b> .....	57
<b>Выводы по главе 2</b> .....	58
<b>3 Расчёт фотонно-кристаллических элементов «волноводного» типа</b> ....	59
<b>3.1 Модели фотонно-кристаллических элементов</b> .....	59
<b>3.1.1 Нахождение фотонной запрещенной зоны методом разложения плоской волны</b> .....	60
<b>3.1.2 Модели фотонно-кристаллических волноводов с изгибами</b> .....	61
<b>3.1.3 Модель узла пересечения</b> .....	62
<b>3.1.4 Модель узла ввода излучения</b> .....	64
<b>3.2 Применение генетической оптимизации к расчету фотонно-кристаллических элементов</b> .....	65
<b>3.2.1 Выбор параметров генетического алгоритма</b> .....	65
<b>3.2.2 Результаты генетической оптимизации фотонно-кристаллических волноводов с изгибами</b> .....	66
<b>3.2.3 Результаты генетической оптимизации узла пересечения</b> .....	73
<b>3.2.4 Результаты генетической оптимизации узла ввода излучения</b> .....	76
<b>3.3 Применение детерминированных методов оптимизации для расчета фотонно-кристаллических элементов волноводного типа</b> .....	78
<b>3.3.1 Детерминированные методы безградиентной оптимизации</b> .....	79
<b>3.3.1.1 Метод покоординатного спуска</b> .....	79
<b>3.3.1.2 Метод Хука-Дживса</b> .....	80
<b>3.3.2 Результаты детерминированной оптимизации фотонно-кристаллических элементов</b> .....	81
<b>3.3.2.1 Результаты детерминированной оптимизации фотонно-кристаллических волноводов с изгибами</b> .....	81
<b>3.3.2.2 Результаты детерминированной оптимизации для узла пересечения волноводов</b> .....	86
<b>3.3.2.3 Результаты детерминированной оптимизации для узла ввода излучения</b> .....	87
<b>3.3.3 Обсуждение результатов оптимизации</b> .....	89
<b>3.3.4 Метод частичного перебора для оптимизации изгиба волновода на 120°</b> .....	91

<b>Выводы по главе 3</b> .....	94
<b>4 Расчёт фотонно-кристаллических логических элементов</b> .....	96
<b>4.1 Модели фотонно-кристаллические элементов</b> .....	96
<b>4.1.1 Модель логического элемента «НЕ» на кристалле с Y-образным дефектом</b> .....	96
<b>4.1.2 Модель логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией</b> .....	97
<b>4.2 Применение генетической оптимизации к расчету фотонно-кристаллических элементов</b> .....	99
<b>4.2.1 Результаты генетической оптимизации фотонно-кристаллического Y-образного логического элемента «НЕ»</b> .....	99
<b>4.2.2 Результаты генетической оптимизации логического элемента «НЕ» на фотонном кристалле с самоколлимацией</b> .....	103
<b>4.2.3 Исследование модели нахождения числа особей в популяции в случае расчета логических элементов</b> .....	109
<b>4.3 Применение детерминированных методов оптимизации для расчета фотонно-кристаллических логических элементов</b> .....	110
<b>4.3.1 Результаты детерминированной оптимизации Y-образного логического элемента «НЕ»</b> .....	110
<b>4.3.2 Результаты детерминированной оптимизации логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией</b> .....	111
<b>4.3.3 Обсуждение результатов оптимизации</b> .....	112
<b>4.4 Программный комплекс для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантной структуры</b> .....	114
<b>4.4.1 Описание функциональных требований к программному комплексу</b> .....	115
<b>4.4.2 Описание модулей программного комплекса</b> .....	116
<b>Выводы по главе 4</b> .....	119
<b>Заключение</b> .....	121
<b>Список литературы</b> .....	123
<b>Приложение А. Свидетельство о регистрации программного комплекса</b> .....	139
<b>Приложение Б. Акты о внедрении</b> .....	140

## **Введение**

### Актуальность темы

Одним из перспективных направлений в области математического моделирования является использование пространственно-вариантных структур — структур, в которых варьируются конструкционные характеристики (например, геометрические параметры, состав материала и т.п.), что позволяет проектировать сложные конструкции. В отличие от однородных структур, пространственно-вариантные структуры могут изгибаться, направлять или формировать поток энергии, что позволяет использовать их в передовых областях оптики (самоколлимирующийся свет (Raymond C. Rumpf, Javier Pazos, 2015; Volk A, Agha I, 2021-2022) [1-3]), акустики (G.H. Yoon, 2007) [4], машиностроения (градиентное заполнение для аддитивного производства (J. Lee, 2022) [5]), вычислительной морфологии (анализ и манипуляция формой объектов (H. Hedberg, N. Vouaynaya, 2008-2009) [6-7]).

В рамках решения одной задачи могут одновременно использоваться две разнородные математические модели: первая модель описывает какое-либо явление (физическое, химическое, биологическое и др.), вторая - модель численного метода, необходимая для выбора его наилучших параметров. Такой подход с использованием двух разнородных моделей нашел широкое применение. Так, известен ряд работ [8-10], в которых авторы оптимизируют конструкцию моста, ставя перед собой задачу получения такой конструкции, которая меньше подвержена риску разрушения. Для этого используются следующие две модели: математическая модель физического явления описывает прочность конструкции моста и представляет собой набор линейных алгебраических уравнений, а математической моделью численного метода является модель оптимизации - цепи Маркова. Кроме того, известен цикл работ отечественных авторов (В.Г. Алексеев, Ю.Э. Спивак) [11-13], в котором так же используются две разнородных модели. Авторы данных работ исследуют акустическую и магнитную маскировку тел, получая

оптимальные значения параметров среды, обеспечивающие эту маскировку. В качестве математической модели физического явления в вышеупомянутых работах используется дифференциальное уравнение магнитного рассеяния, описывающее рассеивающую маскировочную «оболочку» вокруг тела, а в качестве математической модели численного метода – представление задачи управления в интегральной форме. В работе [14] решается обратная задача для уравнений Баренблатта — Желтова — Кочиной. Авторы применяют две модели: дифференциальное уравнение Баренблатта — Желтова — Кочиной, которое описывает динамику давления жидкости, фильтрующейся в трещиновато-пористой среде как модель физического явления и математическую модель задачи оптимизации в виде конечного связного ориентированного графа.

Очевидно, актуален перенос подхода, заключающегося в одновременном использовании двух математических моделей разнородных объектов (физических и численного метода), для оптимизации пространственно-вариантных структур (в частности решения обратной задачи дифракции при расчете фотонно-кристаллических оптических элементов с помощью генетического алгоритма). В качестве математической модели физического процесса в этом случае будут выступать уравнения Максвелла в дифференциальной форме, а в качестве модели численного метода (модели оптимизации) – модели генетических алгоритмов, известных из работ [15-23].

Выбор уравнений Максвелла обусловлен тем, что они являются общей моделью электродинамики [24] и оптики [25]. Обсуждая метод их решения, будем различать: аналитические подходы [26], метод конечных элементов [27], метод расширения плоской волны [28] и др. Однако основным методом их численного решения является метод конечных разностей во временной области (finite-difference time-domain или FDTD), представленный впервые Кейном Йи (Kane Yee) в 1966 году [29] и развивавшейся в работах Аллена

Тафлова (Allen Taflove) [30]. Метод FDTD до сих пор характеризуется бурным развитием [31-33].

Выбирая программный комплекс, реализующий FDTD-метод, остановим внимание на пакете Ansys Lumerical [34], который хоть и является коммерческим, но позволяет гибко моделировать различные части FDTD-метода (задание падающей волны, наложение поглощающих слоев), задавать неоднородную сеточную область (в отличие от открытого пакета MEEP [35]), имеет возможности для 2D моделирования (в отличии от Tidy3D [36]), а также позволяет делать программные «надстройки», что открывает широкие возможности для решения обратных задач.

Для решения обратных задач дифракции принято использовать различные методы оптимизации: итеративные процедуры расчета [37-38], градиентные [39-40] и генетические [41-42]. Остановим свое внимание на генетической процедуре оптимизации, так как генетический алгоритм является глобальным, в отличие от итерационных и градиентных процедур. Однако генетический алгоритм обладает рядом недостатков: медленной сходимостью и высокой вычислительной сложностью. Преодолевая указанные недостатки, принято проводить предварительный анализ самого алгоритма. Для этих целей служат математические модели генетических алгоритмов [15]. Первая такая модель принадлежит автору генетического алгоритма Джону Холланду (John Holland) (1989) [16] и описывает ожидаемое поведение генетического алгоритма – вероятности возникновения популяции с теми или иными свойствами в следующем поколении. В дальнейшем появлялись все более усовершенствованные модели как продолжающие идеи Холланда [17-19] (2003-2005; Ю. Ю. Петров, А.Ф. Чипига, Р.А. Воронкин), так и основанные на других идеях (цепях Маркова [20] (Nix A. E., Vose M. D.; 1992), матричном представлении генетических операторов [21] (Vose M. D.; 1991)). Также модели генетических алгоритмов используются для предсказания оптимальных параметров работы алгоритма (числа особей в популяции [22] (Ю.Ю. Петров,

А.Ф. Чипига; 2005), вероятностей скрещивания и мутации [23] (J.D. Schaffer; 1989).

В последнее время наблюдается заметное расширение применения FDTD для моделирования искусственных и природных структур на оптических длинах волн [43-45]. Это расширение обусловлено развитием световолновых коммуникаций и вычислений. Элементы цифровой интегральной фотоники имеют ряд преимуществ по сравнению с традиционной электроникой: высокая скорость обработки данных, устойчивость к внешнему электромагнитному воздействию, широкие возможности по аппаратному шифрованию сигнала. Поэтому их разработка представляется актуальной задачей. Так сейчас разрабатываются такие устройства как интерференционные оптические логические элементы [43], оптические переключатели на основе фотонно-кристаллического резонатора [44], оптические фильтры [45] и др.

К сожалению, эффективность (под которой понимается отношение интенсивности на выходе элемента к интенсивности, подаваемой на вход) известных элементов невелика (например, в [43] спроектированный логический элемент «исключающее ИЛИ» характеризуется эффективностью 74% для логик 01 и 10). В литературе можно найти примеры попыток ее повышения. Так, в [46] метод Нелдера — Мида (метод безградиентной оптимизации) применен для синтеза электроотражающих модуляторов на основе фотонных кристаллов. Известны работы по применению метода топологической оптимизации (основанного на градиентном подходе) для повышения эффективности пересечения двух фотонно-кристаллических волноводов [47], изгибов волноводов на кристалле с воздушными кавернами [48], светоделителя [49]. Кроме того, для расчета фотонно-кристаллических элементов хорошо зарекомендовала себя рассмотренная выше генетическая оптимизация. Так, в [50] с помощью генетического алгоритма оптимизирован

изгиб фотонно-кристаллического волновода на  $90^\circ$ , в [51] получена конструкция направленного излучателя, в [52] спроектирован светоделитель.

В рассмотренных работах по генетической оптимизации фотонно-кристаллических элементов (например, [50-52]) не учитывается технология изготовления этих элементов (здесь и далее под технологией будем понимать технологию сфокусированного ионного пучка (ФИП)). Хотя примеры такого учета при решении прямой задачи известны [54]. Поэтому представляется актуальным учет вышеупомянутой технологии изготовления. Кроме того, представляется перспективным учет параметров метода решения прямой задачи дифракции (например, дискретизации вычислительной области в FDTD-методе) при решении обратной задачи. Поэтому представляется также актуальным согласование генетического алгоритма и FDTD метода, который заключается в адаптации сеточной области в зависимости от результатов генетической оптимизации и учитывает технологические особенности изготовления структуры.

Кроме того, как уже отмечалось, решение обратной задачи распространения света при расчете фотонно-кристаллических устройств с помощью генетической оптимизации требует больших вычислительных затрат, подтверждение чему можно найти в литературе [53], поэтому предварительный анализ алгоритма с помощью его математической модели представляется актуальным.

### Степень разработанности

В настоящее время одним из перспективных направлений в области математического моделирования является синтез пространственно-вариантных структур. Так, в работе [1] представлена модель для синтеза таких структур, основанная на разложении какой-либо функции, характеризующей физическое свойство, в ряд Фурье. В данной работе авторы утверждают, что их модель одновременно учитывает пространственную ориентацию, период решётки, степень заполнения и другие свойства

периодической структуры во всем ее объеме. Данный подход нашел широкое применение для синтеза фотонно-кристаллических устройств на кристаллах с самоколлимацией [2, 3]. Аналогичные подходы применяются для синтеза пространственно-вариантных структур в акустике [4], машиностроении [5], вычислительной морфологии [6,7]. Предложенные в [1-7] подходы для синтеза пространственно-вариантных структур хоть и учитывают геометрию и материал структуры, но, к сожалению, не подходят для моделирования структур с дефектами. С другой стороны, модели регулярных периодических структур, такие как, решетки Браве [55-57] описывают лишь положение узлов в структуре и не учитывают геометрию узлов и материал заполнения. Поэтому представляется актуальной разработка математической модели пространственно-вариантных структур, которая будет учитывать как геометрию и материал заполнения структуры, так и иметь возможность учета дефектов в структуре.

Как уже отмечалось, уравнения Максвелла являются общей моделью оптики и электродинамики, а математический аппарат численного метода их решения - FDTD метода - характеризуется высокой степенью разработанности. Заложенные в 1966 Кейном Йи основы метода [29] оказались удачными, что подтверждается актуальностью метода и по сей день [31-33]. Высокой степенью разработанности характеризуются также и программные комплексы реализующие FDTD метод: открытый пакет MEEP [35], в котором можно проводить вычисления на кластерных системах; Ansys Lumerical [34], платный пакет, который предоставляет удобный графический интерфейс для моделирования, большую вариативность в выборе материалов, источников, сеточной области и задании краевых условий; Tidy3D [36], также платный пакет, который имеет встроенный инструментарий для решения обратных задач. Отметим, однако, что обратная задача в Tidy3D решается методом топологической оптимизации [47-49]. Получаемая в итоге данной оптимизации топология является сложной для изготовления по

известным технологиям [54]. Поэтому создание программного комплекса для решения обратной задачи остается актуальной.

В настоящее время активно развивается направление синтеза оптических цифровых устройств на фотонных кристаллах: переключателей [44], оптических фильтров [45], логических элементов [43]. Такие устройства имеют ряд преимуществ по сравнению с традиционной электроникой: высокая скорость обработки данных, устойчивость к внешнему электромагнитному воздействию, широкие возможности по аппаратному шифрованию сигнала, но, к сожалению, они обладают низкой эффективностью. Добиваясь ее повышения, как уже говорилось ранее различные авторы использовали разнообразные методы оптимизации: метод Нелдера — Мида [46], топологическую оптимизацию [47-49], генетическую оптимизацию [50-52]. Наилучшим методом показала себя именно генетическая оптимизация, так как в отличие от других используемых методов она является глобальной. Кроме того, в отличие от топологической оптимизации, которая кардинально меняет топологию элемента, что может сделать его непригодным для изготовления, применение генетической процедуры не сильно меняет изначальную топологию элемента, сохраняя его структуру. Однако, нельзя не обратить внимание на недостатки существующей процедуры генетической оптимизации. Например, в работе [50] с помощью генетического алгоритма оптимизирован изгиб фотонно-кристаллического волновода на  $90^\circ$  на кристалле с квадратной решеткой и кремниевыми стержнями в воздухе. Авторами была получена эффективность в 93%, но при этом можно заметить, что, во-первых, радиусы полученных стержней непригодны для изготовления, а во-вторых, вычисления выполнялись для кристалла, малые геометрические размеры которого допускают влияние падающей (и не проникающей глубоко в структуру) волны на интерференцию в области изгиба. Вероятно, выбор небольшого кристалла связан с высокой вычислительной сложностью решения обратной

задачи дифракции. В [53] авторы с помощью генетического алгоритма оптимизировали топологию фотонного кристалла, чтобы получить как можно большую фотонную запрещенную зону, не зависящую от типа поляризации. В работе было отмечено, что расчет занял 50 часов. Для уменьшения вычислительной сложности генетического алгоритма принято проводить его предварительный анализ с помощью математических моделей генетических алгоритмов [15]. Например, спрогнозировать поведение алгоритма и внести модификации в генетические операторы [17-19], или же рассчитать на основе математической модели оптимальные значения параметров генетического алгоритма [22,23]. Однако, в известной литературе построение и исследование математических моделей генетических алгоритмов сделано для ограниченного круга случаев. Поэтому интерес представляет приложение известных моделей к конкретной предметной области фотонных кристаллов и исследование границ их адекватности в этой области.

Отмечая описанные выше недостатки, укажем на проблемы согласования известной процедуры генетической оптимизации с FDTD-методом для расчета пространственно-вариантных структур (в частности, фотонно-кристаллических оптических элементов), которая позволяла бы с одной стороны получать топологии пригодные для изготовления, с другой - обеспечить необходимую точность моделирования; уменьшения времени решения обратной задачи, например, с помощью предварительного анализа генетического алгоритма с помощью его математической модели или попытки применения более простых методов к простым элементам, применение которых также позволит получить элемент с высокой эффективностью.

Целью работы является моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур, относящегося к описанию кристаллических решеток, с разработкой соответствующего программного

комплекса и его применением для случая фотонно-кристаллических волноведущих структур.

В соответствии с поставленной целью определены основные задачи диссертации:

1. Разработать математическую модель одного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток) с учетом возможности ввода в структуру линейных и локальных дефектов для последующего моделирования фотонно-кристаллических элементов.
2. Для оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур с дефектами согласовать работу генетического алгоритма и FDTD метода решения уравнений Максвелла (для моделирования распространения электромагнитного излучения через фотонно-кристаллические элементы) путем адаптации сеточной области при изменении размеров отдельных элементов пространственно-вариантной структуры в процессе генетической оптимизации, а также при учете технологических особенностей изготовления структур.
3. Разработать комплекс программ для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток).
4. Применить разработанный комплекс программ к расчету фотонно-кристаллических оптических элементов: изгибам волноведущих структур, их пересечению, узлу ввода излучения, фотонно-кристаллическим логическим элементам «НЕ» на кристалле с Y-образным дефектом и на кристалле с самоколлимацией.

Научная новизна работы

1. Разработана математическая модель одного класса пространственно-вариантных структур, относящихся к описанию кристаллических решеток с дефектами.

2. Предложен метод согласования генетической процедуры оптимизации с FDTD методом, заключающийся в адаптации сеточной области  $Y_{ee}$  в зависимости от результатов работы генетического алгоритма.
3. Разработан программный комплекс для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток).
4. Разработанный программный комплекс применен к расчету фотонно-кристаллических волноведущих структур: изгибов волноводов, их пересечению, узлу ввода излучения, логических элементов «НЕ» на кристалле с Y-образным дефектом и на кристалле с самоколлимацией.

#### Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическую значимость в области математического моделирования имеет разработка математической модели одного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток) с дефектами.

Практическое применение упомянутой модели позволяет создать инструмент для расчета таких структур (в частности, фотонно-кристаллических оптических элементов) с помощью совместного использования генетического алгоритма и FDTD метода. Рассчитанные с помощью созданного инструмента элементы характеризуются не только высокой эффективностью, но и технологичностью (рассчитанные элементы можно изготовить).

Результаты диссертации внедрены в ФГАОУ ВО «Самарский университет» на кафедре «Наноинженерии» и в «Передовой инженерной аэрокосмической школе».

#### Методология и методы исследования

Кроме математической модели одного класса пространственно-вариантной структуры, при решении задач диссертации одновременно используется две разнородные математические модели: уравнения Максвелла в дифференциальной форме, которые являются моделью физического явления и применяются для решения прямой задачи дифракции,

и математическая модель генетического алгоритма, которая используется при решении обратной задачи для оценки числа особей в популяции в генетическом алгоритме.

FDTD метод решения уравнений Максвелла (который реализован в программном пакете Ansys Lumerical R1) используется для решения прямой задачи дифракции. Генетический алгоритм используется при решении обратной задачи, которая заключается в получении параметров искомого фотонно-кристаллического оптического элемента, обеспечивающих максимально возможную его эффективность (отношение интенсивности сигнала на выходе элемента к интенсивности сигнала, поданного на вход). Особенностью предлагаемого в диссертации решения является использование авторского метода согласования генетического алгоритма и FDTD метода, который заключается в адаптации сеточной области в зависимости от результатов работы генетической оптимизации.

На защиту выносятся:

1. Математическая модель выбранного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток), основанная на модели решетки Браве и учитывающая физические свойства структуры и дефекты в ней.
2. Способ согласования генетического алгоритма и FDTD метода для оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур с дефектами.
3. Программный комплекс для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур (кристаллических решеток).
4. Результаты применения разработанного программного комплекса для расчета фотонно-кристаллических оптических элементов.

Степень достоверности и апробация результатов

Достоверность результатов подтверждается использованием модели строгой теории дифракции в ходе решения прямой задачи непосредственно.

Решение обратной задачи же сопровождается многократным решением прямой.

Достоверность результатов также подтверждается учетом технологических особенностей изготовления фотонно-кристаллических оптических элементов и особенностей численного метода, которые обеспечивались благодаря согласованию генетического алгоритма и FDTD метода. Такое согласование позволяет получить с одной стороны устойчивое решение, с другой - элемент, который можно изготовить.

Результаты, полученные в диссертации, представлялись на XVII Всероссийской с международным участием научно-технической конференции «Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем» (2023, Пенза), 30th International Conference on Advanced Laser Technologies (2023, Самара), XXI Всероссийской молодежной Самарской конкурс-конференции по оптике, лазерной физике и физике плазмы (2023, Самара), X и XI Международной конференции и молодежной школе «Информационные технологии и нанотехнологии» (2024, Самара; 2025, Самарканд, Узбекистан), XXI Международной конференции по голографии и прикладным оптическим технологиям (ХОЛОЭКСПО 2024) (2024, Казань), 6th International Conference on Emerging Technologies: Micro to Nano (ETMN 2024). (2024, New Delhi, India).

## 1 Математические модели

### 1.1 Математическая модель пространственно-вариантных структур

Одним из перспективных направлений в области математического моделирования является использование пространственно-вариантных структур — математических моделей, в которых варьируются конструктивные характеристики (например, геометрия, материальные свойства, плотность или жесткость). Такие модели активно применяются в теории фотонных кристаллов [1-3], акустики [4], машиностроении [5], и вычислительной морфологии [6-7].

#### 1.1.1 Обзор существующих моделей

##### 1.1.1.1 Решетки Браве

Частным случаем пространственно-вариантных структур являются кристаллические решетки. Для математического моделирования таких периодических структур используются решетки Браве [55-57]. Решёткой или системой трансляций Браве называется набор элементарных трансляций, которыми может быть получена вся бесконечная кристаллическая решётка [55]. Произвольный узел двумерной решетки Браве имеет вид:

$$\mathbf{r}(l) = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2, \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  - базисные векторы решетки,  $l_1, l_2$  - целые числа. Отметим, что модель (1) описывает бесконечную решетку.

Пара чисел  $[[l_1 l_2]]$  называется символом узла [55] и определяет координаты узла в решетке (рисунок 1).

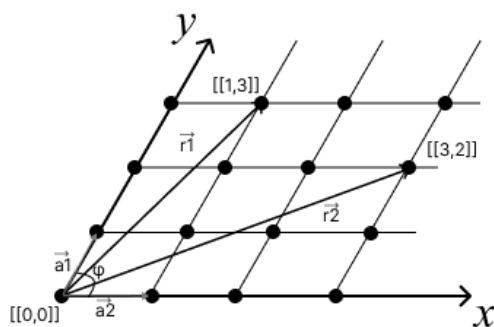


Рисунок 1.1 – Двумерная решетка Браве

Пусть  $\varphi$  - угол между базисными векторами, тогда, выделяют 5 типов решеток Браве в зависимости от угла и соотношения длин базисных векторов [5]:

- квадратная:  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|, \varphi = 90^\circ$ ,
- примитивная и центрированная прямоугольная:  $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|, \varphi = 90^\circ$ ,
- гексагональная:  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a, \varphi = 60^\circ$ ,
- косоугольная:  $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|, \varphi \neq 90^\circ$ .

Математическая модель решеток Браве применялась в [56-57] для идентификации кристаллических решеток, а в [58-59] для решения задачи о плотной упаковке шаров.

### 1.1.1.2 Обратная решетка

Каждой прямой решетки Браве можно сопоставить решетку в обратном пространстве [60] – пространстве Фурье. Вектор такой решетки в двумерном обратном пространстве имеет вид:

$$\mathbf{G}(h) = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2, \quad (1.2)$$

где  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  - базисные векторы обратной решетки, которые имеют размерность обратной длины,  $h_1, h_2$  - целые числа. Векторы прямой и обратной решетки связаны следующим соотношением:  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера.

Данная математическая модель нашла широкое применение для описания дифракции рентгеновских лучей [61-62] и электронов [63] на кристаллах.

### 1.1.1.3 Модель, основанная на разложении функции в ряд Фурье

Модели, рассмотренные в предыдущих пунктах, описывают лишь положение узлов в решетке, не учитывая физические свойства моделируемого объекта (например, материал заполнения ячейки). Модель пространственно-вариантной структуры, учитывающая физические свойства предложена в [64]. Авторы данной работы вводят понятие функции элементарной ячейки  $\varepsilon(\mathbf{s})$ , которая может быть интерпретирована как некоторое физическое свойство. Так как функция элементарной ячейки периодична, она может быть разложена в комплексный ряд Фурье:

$$\varepsilon(\mathbf{s}) = \sum_{m=1}^M a_m e^{-i\mathbf{K}_m \mathbf{s}}$$

где  $\mathbf{s}$  – положение элементарной ячейки,  $a_m$  – комплексная амплитуда  $m$ -ой пространственной гармоники,  $\mathbf{K}_m$  – вектор обратной решетки (2):  $\mathbf{K}_m = \frac{2\pi}{\Lambda_x} \mathbf{x} + \frac{2\pi}{\Lambda_y} \mathbf{y}$ ,  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  – базисные вектора,  $\Lambda_x$ ,  $\Lambda_y$  – размерность ячейки.

Данный подход нашел широкое применение для синтеза фотонно-кристаллических устройств на кристаллах с самоколлимацией [1-3]. Кроме того, аналогичный подход использовался в [65] для расчета запрещенной зоны фотонного кристалла.

### 1.1.2 Уточненная модель одного класса пространственно-вариантной структуры

Автор настоящего диссертационного исследования считает описанный в [64] подход избыточными для математического описания регулярных кристаллов. Кроме того, предложенная в [64] модель не подходит для описания структур с линейными дефектами. В то же время модель, основанная на решетки Браве (1.1) не учитывает физические свойства

структуры. Так, в настоящей работе представлена математическая модель двумерной пространственно-вариантной структуры, которая учитывает тип решетки, материал заполнения, а также имеет возможность описывать линейные дефекты и варьировать отдельные элементы структуры. Под упомянутым классом будем понимать всевозможные кристаллические решетки, описываемые следующей моделью.

Уточним математическую модель решетки Браве с учетом возможности введения в структуру дополнительных неоднородностей [66]. Далее будем различать линейные и локальные дефекты намериваясь рассчитывать с помощью данной модели фотонные кристаллы. Линейный дефект обусловлен извлечением узлов из решетки вдоль луча, а локальный подразумевает изменение радиусов и положения центров в некотором круге с радиусом значительно меньшим линейных размеров всей решетки.

### 1.1.2.1 Линейный дефект в решетке

Переходя от рассмотрения решетки с бесконечным количеством узлов к конечному случаю примем за  $N_x$  и  $N_y$  количество узлов по осям  $x$  и  $y$  соответственно. Тогда всю структуру можно описать как множество векторов решетки Браве:

$$L = \{r_{ij}: r_{ij} = i\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}.$$

Введем дефект состоящий из  $M$  узлов в решетку  $L$ :  $D = \{r_{ij}: r_{ij} = i_m\mathbf{a}_1 + j_m\mathbf{a}_2: m = \overline{1, M}, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}$ . Тогда новая структура с линейным дефектом [66] (рисунок 2) представляет собой разность множеств  $L$  и  $D$ :

$$\tilde{L} = L \setminus D.$$

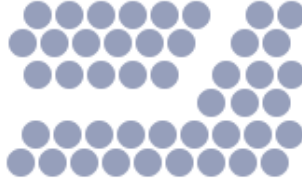


Рисунок 1.2. - Линейный дефект

### 1.1.2.2 Локальный дефект в решетке

Подразумевая далее решение задачи оптимизации для ограниченного фрагмента кристалла, введем понятие локального дефекта [66] (рисунок 1.3). Пусть каждый узел решетки  $\tilde{L}$  представляет собой окружность радиуса  $R$ :

$(x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R^2$ , где  $r_{xi}, r_{yj}$  – координаты вектора  $r_{ij}$ . Тогда определим новое множество  $\tilde{L}_1$ :

$$\tilde{L}_1 = \{\mathbf{r}_{ij} = (r_{xi}, r_{yj}): \mathbf{r}_{ij} = i\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2, (x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R^2, \\ i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}$$

Выберем из множества  $\tilde{L}_1$   $K$  узлов, у которых изменим положение и радиусы:

$$A = \{\mathbf{r}_{ij} = (r_{xi}, r_{yj}): \mathbf{r}_{ij} = i_k\mathbf{a}_1 + j_k\mathbf{a}_2, (x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R^2, \\ k = \overline{1, K}, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}.$$

После изменения получим новое множество

$$\tilde{A} = \{\mathbf{r}_{uv} = (r_{xu}, r_{yv}): \mathbf{r}_{uv} = u_k\mathbf{a}_1 + v_k\mathbf{a}_2 (x - r_{xu})^2 - (y - r_{yv})^2 \leq R_{uv}^2, \\ k = \overline{1, K}\}.$$

Тогда окончательная структура имеет вид:

$$\tilde{L}_2 = \tilde{L}_1 \setminus A \cup \tilde{A}.$$



Рисунок 1.3 - Локальный дефект

## 1.2 Генетический алгоритм и его математическая модель

Генетический алгоритм — это алгоритм эвристического поиска, который отражает процесс естественного отбора, при котором наиболее приспособленные особи отбираются для размножения, чтобы произвести потомство следующего поколения. В начале алгоритма случайными числами задается первая популяция и рассчитывается функция приспособленности для каждой из особей. Далее выполняются стандартные операторы генетического алгоритма: отбор для скрещивания, скрещивание, мутация и формирование нового поколения. Идея генетических алгоритмов предложена Джоном Холландом в 60-х годах [16].

Формально генетический алгоритм можно описать следующим образом:

$$ГА = (P^0, N, L, \mathfrak{S}, \Omega, \mu, T),$$

где  $P^0 = \{A_1^0, A_2^0, \dots, A_N^0\}$  – начальная популяция,  $A_i$  – особи (хромосомы) популяции, которые являются векторами-решениями задачи;  $N$  – размер популяции;  $L$  – длина хромосомы (размерность вектора решений);  $\mathfrak{S}$  – оператор отбора;  $\Omega$  – множество генетических операторов;  $\mu$  – функция пригодности,  $T$  – критерий остановки.

Математические модели генетических алгоритмов [15] строятся для математического исследования и осмысления самого алгоритма. Рассмотренные ниже модели описывают ожидаемое поведение генетического алгоритма – вероятности возникновения той или иной популяции в следующем поколении. Такие формализации позволяют проанализировать

поведение алгоритма и внести в модель изменения для увеличения скорости сходимости алгоритма.

### 1.2.1 Описание алгоритма

Следуя логике построения генетического алгоритма, опишем его этапы:

1) **Отбор для скрещивания.** Состоит в выборе наиболее приспособленных особей для того, чтобы позволить им передать свои гены следующему поколению. Существуют различные методы отбора особей: турнирный отбор [67], метод колеса рулетки [68], метод ранжирования [69] и т.д. В настоящей работе отбор осуществлялся методом колеса рулетки [68], использующий индивидуальные особенности особи (в отличие от случайного выбора особей с равной вероятностью). Такой метод предотвращает нахождение локального экстремума, не гарантируя выбор особи с наилучшими характеристиками и обеспечивая тем самым генетическое разнообразие (в отличие от выбора  $N$  наиболее подходящих особей). Суть метода колеса рулетки заключается в сопоставлении сектора колеса каждой особи. При этом размер сектора  $p_i$  пропорционален значению пригодности особи и находится как  $p_i = \frac{\mu_i}{\sum_{i=1}^N \mu_i}$ , где  $\mu_i$  - значение пригодности  $i$ -ой особи. Таким образом, чем выше значение пригодности, тем больший сектор отведен на колесе особи и, следовательно, тем больше шанс, что она будет выбрана для следующего этапа – скрещивания. Сгенерируем случайное равномерно-распределенных число  $p_s$  от 0 до 1, которое в последствии будет сопоставляться с секторами колеса и задавать результат отбора. Далее рассчитается кумулятивная сумма  $S_i$  для каждого сектора  $S_i = \sum_{j=1}^i p_j$ . Выбор особи производится путем сопоставления кумулятивной суммы и случайного числа: если  $p_s$  лежит в промежутке между  $S_i$  и  $S_{i+1}$ , то особь  $A_{i+1}$  будет выбрана. Таким образом отбираются

$N$  родительских особей. При этом одна особь может быть выбрана в качестве родителя неограниченное число раз.

- 2) **Скращивание.** В результате этого этапа новое потомство создается путем обмена родителей генами между собой. Для получения новой (дочерней) особи  $\tilde{A}_i$  одноточечному скрещиванию [70] подвергаются родительские особи  $A_i$  и  $A_{i+1}$ , отобранные в результате первого этапа. Выбирается случайная дискретная равномерно-распределенная величина  $k$  ( $k \in \overline{1, M-1}$ ,  $M$  – количество генов одной особи), задающая точку скрещивания – точку, относительно которой происходит обмен генами. В результате дочерняя особь  $\tilde{A}_i$  содержит первые  $k$  генов первого родителя и последующие  $M-k$  генов второго родителя. Отметим, что каждый родитель участвует в процессе скрещивания дважды: для следующей итерации родитель  $A_{i+1}$  является уже первым родителем для дочерней особи  $\tilde{A}_{i+1}$ . Последняя дочерняя особь  $\tilde{A}_N$  образуется в результате скрещивания особей  $A_N$  (первый родитель) и  $A_1$  (второй родитель).
- 3) **Мутация.** У некоторых образовавшихся новых потомков некоторые их гены могут подвергаться мутации – замены значение гена на случайное. Данный этап нужен для обеспечения генетического разнообразия и предотвращения сходимости к локальному экстремуму. Для осуществления этого этапа с заданной вероятностью  $p_m$  выбираются гены из всей дочерней популяции и их значения заменяются на случайное из диапазона, установленного для каждого конкретного гена.
- 4) **Формирование следующего поколения.** В результате предыдущих этапов особь, обладающая наилучшими признаками, может «потеряться». Чтобы гарантировать, что новое поколение окажется точно не хуже родительского, предлагается оставлять несколько родительских особей в следующем поколении. Для этого рассчитывается приспособленность дочерних особей. Следующие

поколение формируется из наилучших по критерию приспособленности  $n$  процентов особей потомства и  $100-n$  процентов особей предыдущего поколения.

Данные этапы повторяются итеративно пока не достигается условие остановки. Блок-схема алгоритма представлена на рисунке 1.4. Отметим, что работу алгоритма можно регулировать следующими параметрами: числом поколений (может быть бесконечностью), количеством особей  $N$  в одном поколении, вероятностью мутации  $p_m$ , долей  $n$  особей, формирующих новое поколение и условием остановки.

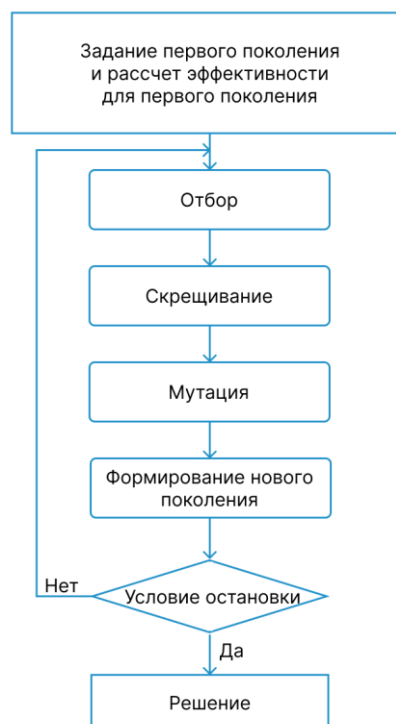


Рисунок 1.4 – Блок-схема генетического алгоритма

### 1.2.2 Математическая модель простого генетического алгоритма

Для построения математической модели простого генетического алгоритма (ПГА) будем использовать понятия, введенные Джоном Холландом в своей работе [16]:

- Шаблон  $H$  – некое представление подмножества строк, имеющих одинаковое значение бит в зафиксированных позициях.

- Порядок шаблона  $\sigma(H)$  – количество зафиксированных бит в шаблоне.
- Длина шаблона  $\delta(H)$  – общее количество элементов, расположенных между первой и последней зафиксированной позициями шаблона.

Визуальное представление данных понятий приведено на рисунке 1.5.

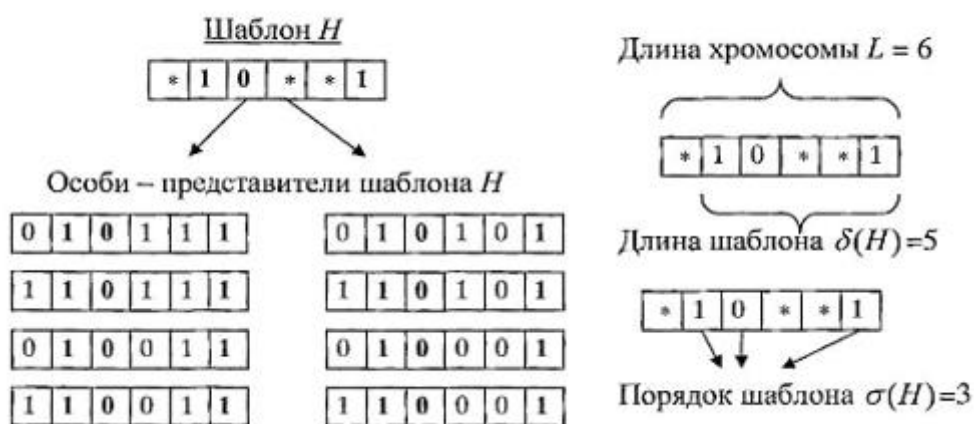


Рисунок 1.5 – Понятия шаблона, его порядка и длины

Пусть определен некий шаблон  $H$ . Особь  $A$  является представителем данного шаблона тогда и только тогда, когда биты в зафиксированных позициях шаблона идентичны соответствующим битам строки  $A$ . Пусть в  $k$ -ой популяции имеются  $m_k(H)$  особей, представляющих шаблон  $H$ . Тогда, вероятность  $P(A_i^{k+1} \in H)$  того, что особи  $A_i^k \in H, i = \overline{1, N}$  (где  $N$  – количество особей в популяции) после применения операторов генетического алгоритма перейдут в новую популяцию с сохранением шаблона  $H$ , определяется как сумма произведений вероятности двух независимых событий (1.3): вероятности быть отобранной для скрещивания и вероятности сохранить шаблон  $H$  после применения остальных генетических операторов (скрещивания и мутации).

$$P(A_i^{k+1} \in H) = \sum_{A_i^k \in H} \frac{\mu(A_i^k)}{\sum_{j=1}^N \mu(A_j^k)} P(S_H), \quad (1.3)$$

где  $\mu(A)$  – значение приспособленности особи  $A$ ,  $P(S_H)$  – вероятность события  $S_H$ , заключающегося в том, что  $A_i^{k+1} \in H$  после воздействия генетических операторов.

С другой стороны, можно определить  $P(A_i^{k+1} \in H)$  через классическое определение вероятности:

$$P(A_i^{k+1} \in H) = \frac{m_{k+1}(H)}{N}, \quad (1.4)$$

где  $m_{k+1}(H)$  - количество особей, принадлежащих шаблону  $H$  в популяции  $k+1$ .

Введем некоторые обозначения:

$\overline{\mu^k(H)} = \frac{\sum_{A_i^k \in H} \mu(A_i^k)}{m_k(H)}$  – средняя приспособленность особей, принадлежащих шаблону  $H$ ;

$\overline{\mu^k} = \frac{\sum_{j=1}^N \mu(A_i^k)}{N}$  – средняя приспособленность популяции.

Приравнявая (1.3), (1.4) и с учитывая введенные обозначения получаем:

$$m_{k+1}(H) = m_k(H) \frac{\overline{\mu^k(H)}}{\overline{\mu^k}} P(S_H). \quad (1.5)$$

Распишем вероятность  $P(S_H)$  – вероятность того, что шаблон  $H$  не будет разрушен ни одним генетическим оператором. Пусть  $S_{cross}$  – событие, состоящее в том, что после выполнения оператора одноточечного скрещивания шаблон  $H$  не будет разрушен. Тогда вероятность противоположного события  $\overline{S_{cross}}$  будет определяться следующим образом:

$$P(\overline{S_{cross}}) = \frac{\delta(H)}{L-1}, \quad (1.6)$$

где  $L$  – длина хромосомы.

Пусть  $S_m$  – событие, состоящее в том, что после выполнения оператора мутации шаблон  $H$  не будет разрушен. Тогда вероятность противоположного события  $\overline{S_m}$  будет определяться следующим образом:

$$P(\overline{S_m}) = \frac{\sigma(H)}{L}. \quad (1.7)$$

Операторы скрещивания и мутации действуют на каждую особь независимо друг от друга с вероятностями  $P_{cross}$  и  $P_m$  соответственно, следовательно вероятность события  $S_H$  будет определяться следующим выражением:

$$P(S_H) = 1 - (P_{cross}P(\overline{S_{cross}}) + P_mP(\overline{S_m})). \quad (1.8)$$

Объединяя выражения (1.5) – (1.8), получаем:

$$m_{k+1}(H) = m_k(H) \frac{\overline{\mu^k(H)}}{\mu^k} \left( 1 - \left( P_{cross} \frac{\delta(H)}{L-1} + P_m \frac{\sigma(H)}{L} \right) \right).$$

### **Теорема (Холланда) [16]:**

*Пусть для некоторого шаблона  $H$  определены длина  $\delta(H)$  и порядок  $\sigma(H)$ ,  $m_k(H)$  – число особей, принадлежащих данному шаблону в момент времени  $k$ ; пусть  $\overline{\mu^k(H)}$  – значение средней выживаемости по шаблону  $H$  в момент времени  $k$ , а  $\overline{\mu^k}$  – значение средней выживаемости в целом среди популяции в момент времени  $k$ ; пусть также известны вероятности выполнения операторов скрещивания  $P_{cross}$  и мутации  $P_m$ . Тогда ожидаемое число особей  $m_{k+1}(H)$ , принадлежащих шаблону  $H$  в следующий момент времени  $k+1$ , может быть получена из следующей формулы:*

$$m_{k+1}(H) \geq m_k(H) \frac{\overline{\mu^k(H)}}{\mu^k} \left( 1 - \left( P_{cross} \frac{\delta(H)}{L-1} + P_m \frac{\sigma(H)}{L} \right) \right).$$

### 1.2.3 Существующие модели генетических алгоритмов

В [17] Чипигой А.Ф. и Петровым Ю.Ю. на основе теоремы Холланда предложена модифицированная модель простого генетического алгоритма. Автор вводит понятие доминирующего шаблона – шаблон с максимальным значением средней приспособленности особей, представленных в популяции в текущий момент времени. Предложенная математическая модель описывает повышение порядка доминирующего шаблона с учетом особей, перешедших в рассматриваемый шаблон из других шаблонов, более низкого порядка, число которых значительно при высоких значениях вероятности мутации. Так же в предложенной модели учтен факт ограниченности популяции, чего нет в классической модели простого генетического алгоритма.

Приведем модель из [17]. Пусть  $H_1$  и  $H_2$  – шаблоны, такие что  $\sigma(H_2) = \sigma(H_1) + 1$  и  $H_2 \subset H_1$ . Тогда число особей  $m$ , принадлежащих шаблону  $H_2$  на  $k+1$  шаге генетического алгоритма, будет определяться следующим выражением:

$$m_{k+1}(H_2) \geq m_k(H_2) \frac{\overline{\mu^k(H_2)}}{\mu^k} \left( 1 - P_{cross} \frac{\delta(H)}{L-1} \left( 1 - \frac{m_k(H_1)}{2N} \right) \right) \times \\ \times (1 - P_m)^{\sigma(H_2)} + m_{k+1}(H_1) \frac{P_m}{L}$$

Данная модель в [71] и [72] для повышения нахождения вероятности глобального экстремума.

В [18,19] А.Ф. Чипигой и Р.А. Воронкиным определено множество генетических операторов  $\Omega$ , состоящее из операторов скрещивания и мутации ( $\Omega = \{\mathfrak{C}, \mathfrak{M}\}$ ) для мажоритарного генетического алгоритма и получена его математическая модель. Мажоритарный генетический алгоритм состоит в кодировании решения задачи тремя строками: двумя равнозначными гомологическими хромосомами  $X$  и  $Y$ , гены которых могут

быть модифицированы генетическими операторами в процессе эволюции, и одной опорной хромосомой  $V$ , содержащей подавляющее значение в фенотипе особей, элементы которой не изменяются. Таким образом получается модель доминирования генов в диплоидном способе кодирования решений, что по мнению автора способствует увеличению эффективности генетического алгоритма по сравнению с его простым вариантом, где решение кодируется гаплоидным способом.

С учетом особенностей модели доминирования генов в [18] разработана математическая модель выполнения оператора скрещивания. Полученная вероятность разрушения шаблона в результате выполнения оператора скрещивания в мажоритарном генетическом алгоритме определяется соотношением:

$$P(\overline{S}_H | \mathfrak{C}) = P_{cross} \left( 1 - \frac{1}{2^{\sigma(H)}} \right) \quad (1.9)$$

Автор утверждает, что семантическое сходство предложенной модели с реальными биологическими процессами позволяет увеличить генетическое разнообразие популяции, а отсутствие зависимости (1.9) от длины хромосомы  $\delta(H)$  снизить возможность сходимости мажоритарного генетического алгоритма к локальным экстремумам целевой функции.

В [19] определены правила мутации в мажоритарном генетическом алгоритме. Установлено, что если ген  $x_{ij}^t$  локуса может быть изменен мутацией с вероятностью  $P_m^x$  а ген  $y_{ij}^t$  с вероятностью  $P_m^y$  причем точечные мутации генов являются независимыми, то вероятность разрушения шаблона оператором мутации:

$$P(\overline{S}_H | \mathfrak{M}) = 1 - \left[ 1 - \frac{P_m^x + P_m^y - P_m^x P_m^y}{2} \right]^{\sigma(H)} \quad (1.10)$$

Поскольку в мажоритарном генетическом алгоритме рассматривается диплоидный набор хромосом, то увеличивается разнообразие мутаций,

которые могут происходить с особью, по сравнению с простым генетическим алгоритмом.

Таким образом, можно записать следующее выражения для математической модели мажоритарного генетического алгоритма:

$$m_{k+1}(H) = m_k(H) \frac{\overline{\mu^k(H)}}{\mu^k} [(1 - P(\overline{S_H}|\mathfrak{E}))(1 - P(\overline{S_H}|\mathfrak{M})],$$

где  $P(\overline{S_H}|\mathfrak{E})$  и  $P(\overline{S_H}|\mathfrak{M})$  определяются выражениями (1.9) и (1.10).

Модель (1.9) – (1.10) применялась в [73] для строго получения расстояния Хэмминга между потомками и доминантой. Также идеи о мажоритарном генетическом алгоритме и диплоидном способе кодирования хромосомы можно найти в современных публикациях [74-76].

Модели, основанные на теореме Холланда, ограничены, так как они могут лишь приблизительно предсказать изменения поколений [77]. Чтобы получить более полное представление о генетических алгоритмах, исследователи [20,78] работали над цепями Маркова генетических алгоритмов. В отличии от моделей, основанных на теореме Холланда, модели генетических алгоритмов, основанные на цепях Маркова, являются точными.

Приведем основополагающую модель алгоритма на основе цепей Маркова представленную в [20] Никсом (Nix) и Возом (Vose). Каждая возможная популяция – состояние марковской цепи. Пусть  $\Omega$  - множество двоичных строк длиной  $l$ , а  $n$  – мощность этого множества. Тогда число популяций  $K$  размером  $N$ , которые можно выбрать из множества  $\Omega$ , можно найти как:

$$K = C_{n+N-1}^N,$$

$$\text{где } C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

Множество всех популяций (состояний марковской цепи) представляется матрицей  $\mathcal{P}$  размерами  $[N \times n]$ , в которой каждый элемент

$p_{si}$  – число строк  $s$  из  $\Omega$  в популяции  $P_i$ . Пусть  $\Phi_i(s)$  – вероятность генерации строки  $s$  ( $s \in \Omega$ ) из популяции  $P_i$  после применения генетических операторов. Если следующая популяция  $P_j$ , то в неё будет входить  $p_{sj}$  строк  $s$  с вероятностью  $\Phi_i(s)^{p_{sj}}$ . Тогда вероятность  $Q_{ij}$  перехода популяции  $P_i$  в  $P_j$  будет задаваться выражением:

$$Q_{ij} = N! \prod_{s \in \Omega} \frac{\Phi_i(s)^{p_{sj}}}{p_{sj}!}$$

Модели, основанные на цепях Маркова, получили широкое применение. Так, в [79] данная модель применялась для оценки влияния мутации на сходимость генетического алгоритма, в [80] – для решения транспортной задачи, в [81] – для решения проблемы распределения избыточности для системы с ремонтпригодными компонентами горячего резерва, авторы [9] – для прогнозирующего управления ресурс моста.

Еще один подход к построению математической модели генетического алгоритма был предложен Возем (Vose) в [21]. Данный подход основан на сопоставление операторам генетического алгоритма матриц. Пусть на  $k$ -ом шаге алгоритма популяция представлена вектором  $s^k$ , каждая компонента которого равна удельной приспособленности особи. Пусть  $F$  – диагональная матрица, отображающая процесс отбора, такая, что  $f_{ii} = \mu(i)$  ( $\mu(i)$  – приспособленность  $i$ -ой особи), а  $M$  – матрица, отображающая действия операторов генетического алгоритма, такая, что  $m_{ij}$  – вероятности, что в результате рекомбинаций особей  $s_i$  и  $s_j$  получится особь  $s^*$ . Тогда ожидаемое поведение генетического алгоритма задается следующим соотношением:

$$E(s^{k+1}) \sim FM(s^k), \quad (1.11)$$

где  $\mathcal{M}(s) = \langle \sigma_0^T M \sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}^T M \sigma_{N-1} \rangle^T$ ,  $N = 2^L$  ( $L$  – размер особи (длина хромосомы)),  $\sigma_j(s) = \langle s_{j \oplus 0}, \dots, s_{j \oplus N-1} \rangle^T$ ,  $\oplus$  – операция исключающего или,  $E$  – математическое ожидание.

В своей работе авторы приводят доказательство соотношения (1.11) и утверждают, что данная математическая модель является строгой в отличии от модели Холланда.

Данный результат был получен для случая бинарных строк. Опираясь в своих исследованиях на работу [21], П.М. Осипов и др. [82] показали, что отношение (1.9) может так же быть применено для случая небинарных строк. Приведем доказательство из [82]:

$$\begin{aligned}
 E(s_t^{k+1}) &= \sum_{s,s'} \sigma_s^k \sigma_{s'}^k \rho_{ss'}(t) = \sum_{s,s'} \sigma_s^k \sigma_{s'}^k \rho_{s \oplus I_t, s' \oplus I_t}(s^0) \\
 &= \sum_{s \oplus t, s' \oplus t} \sigma_{s \oplus t}^k \sigma_{s' \oplus t}^k \rho_{s \oplus t \oplus I_t, s' \oplus t \oplus I_t}(s^0) = \\
 &= \sum_{s \oplus t, s' \oplus t} \sigma_{s \oplus t}^k \sigma_{s' \oplus t}^k \rho_{s, s'}(s^0) = (S_t \sigma^k) M S_t \sigma^k
 \end{aligned}$$

Математическая модель (1.9) использовалась в [83] для более строго описания алгебры генетического алгоритма, а в [84] для повышения эффективности алгоритма.

#### 1.2.4 Математические модели определения параметров генетического алгоритма

К параметрам генетического алгоритма относятся [15]: способ отбора особей для скрещивания, вероятность скрещивания  $p_c$ , вероятность мутации  $p_m$  и число особей в одном поколении  $N$ .

В [22] А.Ф. Чипигой и Ю.Ю. Петровым предложен метод оценки оптимального размера популяции  $N$  в генетическом алгоритме. Приведем идею получения и само соотношение для этой оценки:

Пусть  $N$  – размер популяции,  $L$  – длина хромосомы,  $P(S_L^N)$  – вероятность события, когда после инициализации генетического алгоритма любого  $1 \leq k \leq L$ , выполняется неравенство:  $0 < \sum_{j=1}^N b_k^j < N$ ,  $b_k^j$  –  $j$ -ый бит  $k$ -ой хромосомы.

Для случая  $L=1$  можно записать:

$$P(S_L^N) = 1 - P(\overline{S_L^N}) = 1 - (P(\Psi_1^N) + P(\Psi_0^N)),$$

где  $\Psi_1^N$  – событие, когда все особи в популяции имеют в своей хромосоме 1,  $\Psi_0^N$  – событие, когда все особи в популяции имеют в своей хромосоме 0.

Очевидно, что  $P(\Psi_1^N) = P(\Psi_0^N) = \left(\frac{1}{2}\right)^N$  в силу независимости особей друг от друга. Тогда:

$$P(S_L^N) = 1 - 2\left(\frac{1}{2}\right)^N.$$

Так как каждый ген хромосомы инициализируется независимо от других генов, то для общего случая получаем:

$$P(S_L^N) = \left[1 - 2\left(\frac{1}{2}\right)^N\right]^L.$$

Из последнего соотношения выразим размер популяции  $N$ :

$$N > \log_{0,5} \left( \frac{1 - \sqrt[L]{P(S_L^N)}}{2} \right) \quad (1.12)$$

В [85] Хессером (Hesser) и Маннером (Männer) построена математическая модель для определения оптимальной вероятности мутации  $p_m$ . Чтобы определить  $p_m$  авторы используют идею о том, что настройка параметров генетического алгоритма является оптимальной, если среднее время поиска оптимального решения  $T^*$  минимально. Пусть  $T_l$  — дополнительное время из-за мутационных потерь, а  $T_w$  — дополнительное время из-за поглощения (время ожидания). Тогда  $T^*$  можно определить как:  $T^* = 1 + T_w + T_l$ , где  $T_l$  и  $T_w$  определяются следующим образом:

$$T_w = \frac{\alpha e^{-\lambda T}}{p_m N}, \quad T_l = \beta L N p_m,$$

где  $\alpha, \beta, \lambda = const$ .

Таким образом,

$$T^* = 1 + \frac{\alpha e^{-\lambda T}}{p_m N} + \beta L N p_m.$$

Чтобы минимизировать  $T^*$  продифференцируем последнее выражение по  $p_m$  и приравняем результат к 0:

$$-\frac{\alpha e^{-\lambda T}}{p_m^2 N} + \beta L N = 0.$$

Выражая  $p_m$ , получаем:

$$p_m = \sqrt{\frac{\alpha e^{-\lambda T/2}}{\beta l N}} \quad (1.13)$$

Этот результат можно сравнить с результатом, полученным экспериментально Шаффером (Schaffer) [23]:

$$p_m = \frac{1,76}{N\sqrt{l}} \quad (1.14)$$

Результаты оценки вероятности скрещивания  $p_c$  Шаффером (Schaffer) [23] по тестовому набору задач показывают, что  $p_c$  не является чувствительным параметром и не зависит от числа особей в популяции, от размера хромосом и т.д.

### 1.2.5 Сходимость генетического алгоритма

Не существует строгого доказательства сходимости генетического алгоритма к глобальному оптимуму для любого класса задач [15]. Вероятность нахождения глобального экстремума зависит от вида функции-пригодности: для некоторых задач существует четкое направление к глобальному экстремуму, в других случаях же направление указывает лишь на локальный оптимум. Эту проблему можно решить, вводя иную функцию пригодности, повышая вероятность мутации или используя разнообразные методы отбора. Однако, по теореме «бесплатных завтраков не бывает» (No free lunch in search and optimization) [86] общего решения проблемы сходимости к локальному экстремуму не существует.

В [87] на основе цепей Маркова генетических алгоритмов было доказано, что классический генетический алгоритм не обладает глобальной сходимостью.

***Теорема [87]:***

Простой генетический алгоритм с вероятностью мутации  $p_m \in (0,1)$ , вероятностью скрещивания  $p_c \in (0,1)$  и пропорциональным отбором не сходится к глобальному оптимуму.

Однако, известны примеры работ, в которых ставились и доказывались теоремы о сходимости модифицированных версий генетических алгоритмов и алгоритмов применительных к определенному классу задач.

В [88] авторы модифицируют классический генетический алгоритм, называя его абстрактным генетическим алгоритмом (АГА). В начале авторы вводят функций выбора – выбор родительского набора из популяции, воспроизводства – выбор детей из популяции родителей, отбора – отбор особей для следующего поколения, и случайные параметры для «рандомизации данных функций. Таким образом, в отличие от ПГА данная модификация оперирует понятием набора, а не строки для определения особи, тем самым, не завися от кодировок. Кроме того, в АГА пересмотрены понятия скрещивания и мутации: в данных генетических операциях могут участвовать неограниченное число особей в отличие от классического варианта алгоритма (две родительские особи для скрещивания и одна для мутации). На основании таких «рандомизированных» функций авторы ставят и доказывают теорему о том, что АГА находит оптимум с вероятностью 1 для любой начальной популяции.

В серии работ [89-90] авторы используют генетический алгоритм для решения задачи оптимизации программируемой логической интегральной схемы. Работа [89] посвящена разработке модифицированного генетического алгоритма – двухуровневого генетического алгоритма. Авторы показывают, что классический алгоритм неприменим к их классу задач и предлагают его

модификацию, заключающуюся в промежуточном представлении особи в виде двудольного графа. Этот способ позволил использовать стандартные генетические операторы при соблюдении ограничений задачи, решаемой авторами. Работа [90] продолжает [89]: в ней ставится и доказывается теорема о сходимости авторской модификации генетического алгоритма к точному решению задачи реконфигурации программируемой логической интегральной схемы.

### 1.3 Строгая теория дифракции и математические модели с ней связанные

#### 1.3.1 Уравнения Максвелла

Известны следующие модели строгой теории дифракции [91]: волновое уравнение, уравнение Гельмгольца, интегралы Киргофа, Френеля, Фурье и т.д. Однако, основной математической моделью оптики [25] и электродинамики [24] являются уравнения Максвелла, так как модели, перечисленные выше, выводятся из системы Максвелла.

Приведем систему уравнений Максвелла в дифференциальной форме в системе СИ (1.15) [24].

$$\begin{aligned} \mathit{rot}\mathbf{H} &= \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\ \mathit{rot}\mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \mathit{div}\mathbf{D} &= \rho, \\ \mathit{div}\mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \tag{1.15}$$

Здесь  $\mathbf{H}$  – напряженность магнитного поля [А/м],  $\mathbf{E}$  – напряженность электрического поля [В/м],  $\mathbf{D}$  – электрическая индукция [Кл/м<sup>2</sup>],  $\mathbf{B}$  – магнитная индукция [Т],  $\mathbf{j}$  – плотность тока [А/м<sup>2</sup>],  $\rho$  – плотность заряда [Кл/м<sup>3</sup>],  $t$  – время. Векторные величины выделяются жирным шрифтом.

Дополним систему (1.15) материальными уравнениями, связывающими  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{H}$ . В общем случае, когда присутствует дисперсия и анизотропия, данные уравнения имеют вид [92]:

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}); \\ \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \int_0^{\infty} d\tau \int e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}-\omega\tau)} \hat{\varepsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R}) d\mathbf{R}; \\ \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) &= \mu_{ij}(\omega, \mathbf{k})\mathbf{H}(\omega, \mathbf{k}); \\ \mu_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \int_0^{\infty} d\tau \int e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}-\omega\tau)} \hat{\mu}_{ij}(\tau, \mathbf{R}) d\mathbf{R};\end{aligned}\tag{1.16}$$

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E},$$

где  $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$  – тензор диэлектрической проницаемости,  $\mu_{ij}(\omega, \mathbf{k})$  – тензор магнитной проницаемости,  $\hat{\varepsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$  и  $\hat{\mu}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$  – ядра преобразований, которые можно интерпретировать как индукцию, возникающую в качестве «отклика» на дельтафункциональное поле  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  соответственно,  $\tau = t - t'$ ,  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ,  $\omega$  – частота [ $\text{с}^{-1}$ ],  $\mathbf{k}$  – волновой вектор [ $\text{м}^{-1}$ ],  $\sigma$  – удельная электрическая проводимость [ $\text{См/м}$ ].

Зависимость тензора  $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$  от частоты соответствует частотной дисперсии, а зависимость от волнового вектора – пространственной. В оптике пространственная дисперсия играет меньшую роль, чем частотная [92].

Для линейных, изотропных, недисперсионных материалах систему (1.16) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\mathbf{D} &= \varepsilon\varepsilon_0\mathbf{E}; \\ \mathbf{B} &= \mu\mu_0\mathbf{H}; \\ \mathbf{j} &= \sigma\mathbf{E};\end{aligned}\tag{1.17}$$

где  $\varepsilon$  и  $\mu$  – относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости,  $\varepsilon_0$  и  $\mu_0$  – электрическая [ $\text{Ф/м}$ ] и магнитная [ $\text{Гн/м}$ ] постоянные.

### 1.3.2 Двумерный случай

Предположим, что моделируемая структура простирается до бесконечности в направлении  $z$  без изменения формы или положения ее поперечного сечения. Если падающая волна однородна в направлении  $z$ , то в декартовой системе координат можно свести уравнения (1.15) и (1.17) к следующему виду:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial y}; \quad (1.18a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial x}; \quad (1.18б)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu\mu_0} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right); \quad (1.18в)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial x}; \quad (1.18г)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial y}; \quad (1.18д)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (1.18e)$$

В зависимости от ориентации линий электрического и магнитных полей относительно моделируемой структуры можно разбить систему (1.18) на две части. В англоязычной литературе [30,50,93] используются обозначения ТМ-поляризация (transverse-magnetic mode with respect to  $z$ ) и ТЕ-поляризация (transverse-electric mode with respect to  $z$ ), где под ТМ понимается такая ориентацию полей, при которой линии магнитного поля располагаются параллельно моделируемой структуре (рисунок 1.6б), а под ТЕ ситуацию, когда линии электрического поля располагаются параллельно структуре (рисунок 1.6а). В русскоязычной литературе [91,94,95] можно встретить термины Н-волна и Е-волна, которые являются противоположными к ТМ и ТЕ: для Н-волны компонента  $H_z \neq 0$ , а для Е-волны  $E_z \neq 0$ . Различие заключается в разном выборе направления,

относительно которого наблюдают поперечную ориентацию векторов напряженностей электрического или магнитного полей: в [30,50,93] ориентация определяется направлением, вдоль которого в двумерном случае не меняются свойства среды; в [91,94,95] - направление, вдоль которого происходит распространение излучения.

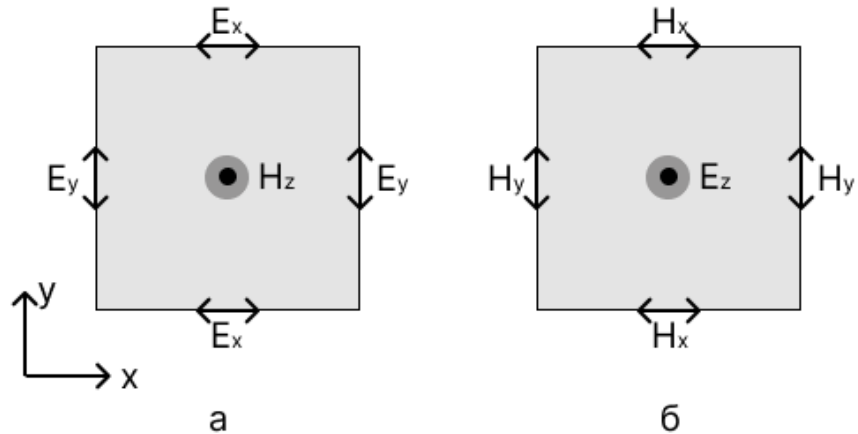


Рисунок 1.6 - Ориентация полей в двумерном случае: (а) ТЕ-поляризация (Н-волна), (б) ТМ-поляризация (Е-волна)

Русскоязычная классификация не слишком удобна для случаев, где свет не распространяется строго в одном заданном направлении. Поэтому далее будем придерживаться терминов ТМ-поляризация и ТЕ-поляризация.

Тогда для ТМ-поляризации справедливо:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial y};$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial x};$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right),$$

а для ТЕ-поляризации:

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial x};$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial y};$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu\mu_0} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right).$$

### 1.3.3 Учет дисперсии материала

Для многих задач можно получить приемлемо точные результаты, предположив, что параметры материала являются константами. Однако постоянные параметры материала по своей сути являются приближением. Как было сказано выше, когда диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  является функцией частоты, материал является дисперсионным. Для моделирования изотропных материалов используются три основных класса материалов с частотной дисперсией [30]: модель Друде, модель Дебая и модель Лоренца.

Классическая модель Лоренца диэлектрической дисперсии, обусловленной резонансной поляризацией, имеет фундаментальное значение в оптике, поскольку она обеспечивает физически привлекательное, точное описание как нормальных, так и аномальных явлений дисперсии в расширенной оптической области электромагнитного спектра от дальнего инфракрасного до ближнего ультрафиолетового [96]. Поэтому далее будет рассматриваться именно данная модель.

Модель Лоренца описывает взаимодействие между электромагнитной волной и атомами, основываясь на механической модели движения заряда второго порядка. Для такой модели предполагается, что заряды движутся под воздействием электрического поля и испытывают силу сопротивления, но также существует и возвращающая сила. Для модели Лоренца, имеющей  $P$ -полюсов, относительную диэлектрическую проницаемость можно записать следующим образом [96]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{p=1}^P \frac{\Delta\varepsilon_p \omega_p^2}{\omega_p^2 + 2i\omega\delta_p - \omega^2},$$

где  $\omega_p$  – частота в полюсе,  $\varepsilon_\infty$  – относительная диэлектрическая проницаемость на бесконечной частоте  $\delta_p$  – коэффициент сопротивления,

$\Delta\varepsilon_p = \varepsilon_{sp} - \varepsilon_{\infty p}$  – изменение относительной диэлектрической проницаемости между нулевой и бесконечной частотой.

Для дисперсионной модели Лоренца имеющей  $P$ -поллюсов закон Ампера (первое уравнение системы 1.15) может быть записано в следующем виде [30]:

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \varepsilon_0\varepsilon_\infty \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} + \sigma\mathbf{E} + \sum_{p=1}^P \mathbf{J}_p(t), \quad (1.19)$$

где  $\mathbf{J}_p$  – ток поляризации, связанный с  $p$ -поллюсом среды Лоренца. В частотной области  $\mathbf{J}_p$  можно определить как:

$$\mathbf{J}_p(\omega) = \varepsilon_0\Delta\varepsilon_p\omega_p^2 \left( \frac{i\omega}{\omega_p^2 + 2i\omega\delta_p - \omega^2} \right) \mathbf{E}(\omega).$$

Домножим последнее соотношение на  $\omega_p^2 + 2i\omega\delta_p - \omega^2$ :

$$\omega_p^2\mathbf{J}_p(\omega) + 2i\omega\delta_p\mathbf{J}_p(\omega) - \omega^2\mathbf{J}_p(\omega) = \varepsilon_0\Delta\varepsilon_p\omega_p^2 i\omega\mathbf{E}(\omega).$$

Используя теорему дифференцирования для преобразования Фурье, выполним обратное преобразование Фурье каждого члена [97]:

$$\omega_p^2\mathbf{J}_p(t) + 2\delta_p \frac{\partial\mathbf{J}_p(t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\mathbf{J}_p(t)}{\partial t^2} = \varepsilon_0\Delta\varepsilon_p\omega_p^2 \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}. \quad (1.20)$$

Соотношение (1.20) - вспомогательные дифференциальные уравнение (auxiliary differential equation, ADE) для  $\mathbf{J}_p(t)$ .

### 1.3.4 Краевые условия, наложение поглощающих слоев

В электродинамике под граничными условиями понимают соотношения, связывающие характеристики полей на границе раздела двух сред [24]. Однако, такие условия, во-первых, являются следствием уравнений Максвелла, а, во-вторых, не позволяют поставить граничные условия с точки зрения математики. Поэтому в этой работе под граничными условиями понимаются именно математические условия.

Если заключить область моделирования  $D$  в границу  $\Gamma$ , то можно выделить три подхода к постановке граничных условий [91]: граничные

условия Дирихле и Неймана, периодические граничные условия и поглощающие слои. Остановимся подробнее на последнем.

Пусть существует среда, которая полностью поглощает падающее излучение. Одну из таких сред предложил Беренджер (Berenger) в 1994 году [98]. Свою сформулированную концепцию искусственного поглощающего слоя он назвал идеально подобранным слоем (perfectly matched layer, PML). Особенностью, которая отличает PML от обычных поглощающих материалов, является их конструкция, которая не отражает волны, падающие на PML на границах раздела (рисунок 1.7).

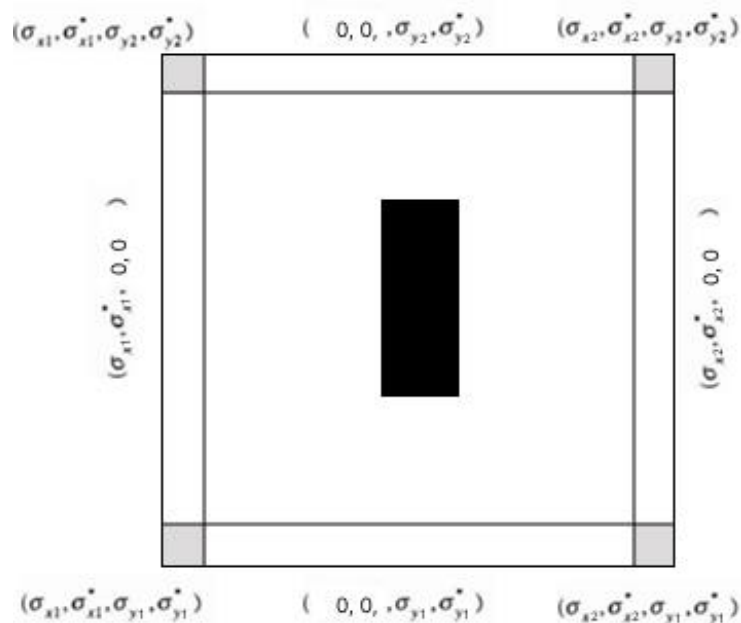


Рисунок 1.7 – PML, предложенные Беренджером

Со временем методика наложения поглощающих слоев уточнялась и совершенствовалась [99,100]. В данной работе будет использоваться именно концепция PML из [100] - Auxiliary Differential Equation Complex-Frequency Shifted PML (ADE-CPML), продолжающая идеи из [99]. В отличие от обычных PML, CPML не должны быть размещены достаточно далеко от препятствия, чтобы затухающие волны в достаточной степени затухли. Также реализация CPML позволяет поглощать волны не только в изотропных и однородных средах, но и в неоднородных, дисперсионных, анизотропных

или нелинейных средах без какого-либо дальнейшего обобщения. ADE-CPML [100] это реализация CPML более высокого порядка точности.

Рассмотрим уравнения Максвелла в среде без потерь и источников. В области PML уравнения можно выразить в комплексных растянутых координатах. Приведем z-проекции законов Ампера (первое уравнение системы 1.15) и Фарадея (второе уравнение системы 1.15).

$$i\omega\varepsilon\varepsilon_0 E_z = \frac{1}{s_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{s_y} \frac{\partial H_x}{\partial y}; \quad (1.21a)$$

$$-i\omega\mu\mu_0 H_z = \frac{1}{s_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{1}{s_y} \frac{\partial E_x}{\partial y}, \quad (1.21б)$$

где  $s_j = k_j + \frac{\sigma_j}{a_j + i\omega\varepsilon_0}$ ,  $j = x, y, z$  – метрики растянутых координат,  $k_j, \sigma_j, a_j$  – действительные, положительные константы. Введем вспомогательную переменную  $B_j$  такую, что  $\frac{1}{B_j} = \frac{\sigma_j}{k_j} \frac{1}{k_j(i\omega\varepsilon_0 + a_j) + \sigma_j}$  и  $\frac{1}{s_j} = \frac{1}{k_j} - \frac{1}{B_j}$ . Тогда уравнения 1.21 можно переписать:

$$\varepsilon\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{k_x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{k_x} \frac{\partial H_x}{\partial y} + Q_{xy}^H - Q_{yx}^H; \quad (1.22a)$$

$$-\mu\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{k_x} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{1}{k_y} \frac{\partial E_x}{\partial y} + Q_{xy}^E - Q_{yx}^E, \quad (1.22б)$$

где  $Q_{xy}^E = -\frac{1}{B_x} \frac{\partial E_y}{\partial x}$  (аналогично  $Q_{yx}^E, Q_{yx}^H, Q_{xy}^H$ ).

Объединив все координаты, уравнения Максвелла в общем виде для ADE-CPML можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon(\omega) \mathbf{E} = \tilde{\mathbf{V}} \times \mathbf{H} + \mathbf{Q}^H; \quad (1.23a)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \mu(\omega) \mathbf{H} = \tilde{\mathbf{V}} \times \mathbf{E} + \mathbf{Q}^E, \quad (1.23б)$$

где  $\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{x} \frac{1}{k_x} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{y} \frac{1}{k_y} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{z} \frac{1}{k_z} \frac{\partial}{\partial z}$ , а  $\mathbf{Q}^E, \mathbf{Q}^H$  удовлетворяют следующему ADE:

$$k_j \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Q}^E + (k_j a_j + \sigma_j) \mathbf{Q}^E = -\frac{\sigma_j}{k_j} \frac{\partial}{\partial j} [\mathbf{j} \times \mathbf{E}], \quad (1.24)$$

где  $\mathbf{j}$  – единичная нормаль к PML.

## Выводы по главе 1

1. Разработана математическая модель одного-класса пространственно-вариантной структуры. Предложенная модель основана на модели решетки Браве и учитывает размер узлов, материал заполнения структуры, а также линейные и локальные дефекты в структуре, что делает возможным ее применение для последующего расчета фотонно-кристаллических элементов.
2. Для решения обратной задачи выбрана генетическая процедура оптимизации, так как генетический алгоритм является глобальным, в отличие от итерационных и градиентных процедур. Для преодоления недостатков генетического алгоритма (медленная сходимость и высокая вычислительная сложность) принято проводить предварительный анализ самого алгоритма. Так, в настоящем исследовании будут исследоваться границы адекватности математической модели Чипиги и Петрова (1.12) для оценки оптимального числа особей в популяции.
3. Для решения прямой задачи дифракции выбраны уравнения Максвелла, так как они являются общей моделью для оптики и электродинамики. Особое внимание в главе уделяется учету дисперсии материала и наложению поглощающих PML (Perfectly Matched Layer) слоев.

## 2 Разностный метод решения уравнений Максвелла во временной области (FDTD-метод)

### 2.1 Разностные схемы для уравнений Максвелла

Метод конечных разностей во временной области (finite-difference time-domain или FDTD), представленный Кейном Йи (Kane Yee) в 1966 году [29], заключается в применении центрированных конечно-разностных операторов на разностных сетках в пространстве и времени для каждой компоненты электрического и магнитного векторного поля в уравнениях Максвелла. Название «конечно-разностная временная область» и соответствующая ему аббревиатура «FDTD» были предложены Алленом Тафловым (Allen Taflove) в 1980 году [30].

#### 2.1.1 Разностные схемы Yee

Определим точку в двумерной области  $D^2$  ( $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 < t \leq T$ ) на регулярной равномерной сеточной области  $D_h^2$  как  $\{(x_i, y_j, t_n) = (i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t): i = \overline{0, I}; j = \overline{0, J}, n = \overline{0, N}\}$ , где  $\Delta x, \Delta y, \Delta t$  соответственно пространственные и временной шаг сетки,  $i, j, n$  – узлы сетки по пространству и времени.

В схеме Yee [29] центрируются компоненты  $E$  и  $H$  в пространстве таким образом, что каждый компонент  $E$  окружен четырьмя циркулирующими компонентами  $H$ , а каждый компонент  $H$  окружен четырьмя циркулирующими компонентами  $E$  (рисунок 2.1), а также центрирует компоненты  $E$  и  $H$  во времени, в так называемом расположении с перескоком. Иначе говоря, для ТМ-поляризации на сеточной области  $D_h^2$  определена сеточная проекция электрического поля  $E_z|_{i,j}^n$  на ось  $Z$ , а сеточная проекция магнитного поля  $H_y|_{i+0,5,j}^{n+0,5}$  на ось  $Y$  и  $H_x|_{i,j+0,5}^{n+0,5}$  на ось  $X$  в узлах  $\{(x_{i+0,5}, y_j, t_{n+0,5}) = ((i + 0,5)\Delta x, j\Delta y, (n + 0,5)\Delta t): i = \overline{0, I - 1}; j = \overline{0, J}, n = \overline{0, N - 1}\}$  и  $\{(x_i, y_{j+0,5}, t_{n+0,5}) = (i\Delta x, (j + 0,5)\Delta y, (n + 0,5)\Delta t): i = \overline{0, I}; j = \overline{0, J - 1}, n = \overline{0, N - 1}\}$  соответственно. Аналогично для ТЕ-

поляризации: на сеточной области  $D_h^2$  определена сеточная проекция магнитного поля  $H_z|_{i,j}^n$  на ось  $Z$ , а сеточная проекция электрического поля  $E_y|_{i+0,5,j}^{n+0,5}$  на ось  $Y$  и  $E_x|_{i,j+0,5}^{n+0,5}$  на ось  $X$  в узлах  $\{(x_{i+0,5}, y_j, t_{n+0,5}) = ((i+0,5)\Delta x, j\Delta y, (n+0,5)\Delta t): i = \overline{0, I-1}; j = \overline{0, J}, n = \overline{0, N-1}\}$  и  $\{(x_i, y_{j+0,5}, t_{n+0,5}) = (i\Delta x, (j+0,5)\Delta y, (n+0,5)\Delta t): i = \overline{0, I}; j = \overline{0, J-1}, n = \overline{0, N-1}\}$  соответственно.

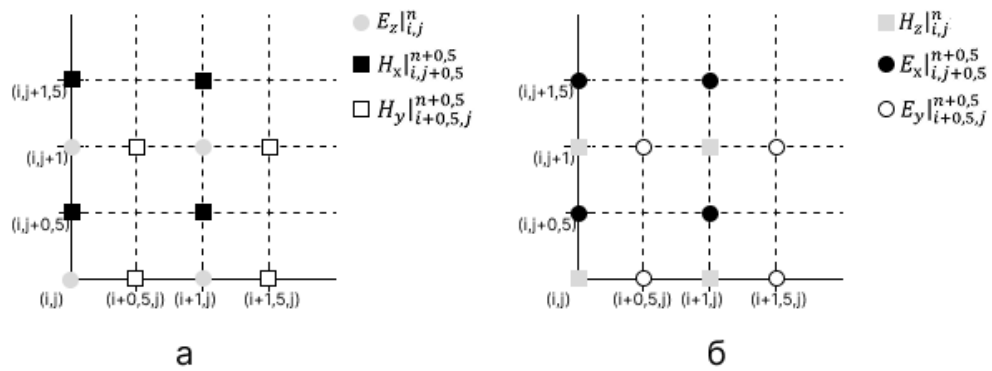


Рисунок 2.1 - Сеточная область  $D_h^2$  без учета дискретизации по времени: (а) ТМ-поляризация, (б) ТЕ-поляризация

Перепишем систему (1.18), используя конечные разности [101], и получим разностную схему FDTD метода для двумерного случая [29]. Для ТМ-поляризации имеем:

$$\frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_{i,j}} \times \left( \frac{H_y|_{i+0,5,j}^{n+0,5} - H_y|_{i-0,5,j}^{n+0,5}}{\Delta x} + \frac{H_x|_{i,j+0,5}^{n+0,5} - H_x|_{i,j-0,5}^{n+0,5}}{\Delta y} \right); \quad (2.1a)$$

$$\frac{H_x|_{i,j+0,5}^{n+0,5} - H_x|_{i,j+0,5}^{n-0,5}}{\Delta t} = \frac{E_z|_{i,j+1}^n - E_z|_{i,j}^n}{\mu_0 \mu_{i,j+0,5} \Delta y}; \quad (2.1б)$$

$$\frac{H_y|_{i+0,5,j}^{n+0,5} - H_y|_{i+0,5,j}^{n-0,5}}{\Delta t} = \frac{E_z|_{i,j+1}^n - E_z|_{i,j}^n}{\mu_0 \mu_{i+0,5,j} \Delta x}; \quad (2.1в)$$

Для ТЕ-поляризации:

$$\frac{H_z|_{i,j}^{n+1} - H_z|_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\mu_0 \mu_{i,j}} \times$$

$$\times \left( \frac{E_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - E_y|_{i-0.5,j}^{n+0.5}}{\Delta x} + \frac{E_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - E_x|_{i,j-0.5}^{n+0.5}}{\Delta y} \right); \quad (2.1\Gamma)$$

$$\frac{E_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - E_x|_{i,j+0.5}^{n-0.5}}{\Delta t} = \frac{H_z|_{i,j+1}^n - H_z|_{ij}^n}{\varepsilon_0 \varepsilon_{i,j+0.5} \Delta y}; \quad (2.1\Delta)$$

$$\frac{E_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - E_y|_{i+0.5,j}^{n-0.5}}{\Delta t} = \frac{H_z|_{i,j+1}^n - H_z|_{ij}^n}{\varepsilon_0 \varepsilon_{i+0.5,j} \Delta x}; \quad (2.1\text{e})$$

Далее ограничимся рассмотрением только ТМ-поляризации, результаты для ТЕ-поляризации получаются аналогично.

### 2.1.2 Учёт дисперсии материала

Получим разностную схему FDTD метода для случая дисперсионной среды [30]. Для этого перепишем вспомогательное дифференциальное уравнение (2.6) с помощью конечных разностей:

$$\omega_p^2 J_p + 2\delta_p \frac{J_p^{n+1} - J_p^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{J_p^{n+1} - 2J_p^n + J_p^{n-1}}{(\Delta t)^2} = \varepsilon_0 \Delta \varepsilon_p \omega_p^2 \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2\Delta t}.$$

Выразим  $J_p^{n+1}$  из последнего соотношения:

$$J_p^{n+1} = \alpha_p J_p^n + \xi_p J_p^{n-1} + \gamma_p \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2\Delta t},$$

где  $\alpha_p = \frac{2 - \omega_p^2 (\Delta t)^2}{1 + \delta_p \Delta t}$ ,  $\xi_p = \frac{-1 + \delta_p \Delta t}{1 + \delta_p \Delta t}$ ,  $\gamma_p = \frac{\varepsilon_0 \Delta \varepsilon_p \omega_p^2 (\Delta t)^2}{1 + \delta_p \Delta t}$ .

Для дискретизации (1.19) необходимо получить соотношение для временного слоя  $n+0,5$ :

$$J_p^{n+0.5} = \frac{J_p^{n+1} + J_p^n}{2} = \frac{1}{2} \left( (1 + \alpha_p) J_p^n + \xi_p J_p^{n-1} + \gamma_p \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2\Delta t} \right).$$

Тогда, закон Ампера (1.19) во временной области на слое  $n+0,5$  имеет вид:

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{H}^{n+0.5} &= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{E^{n+1} - E^n}{\Delta t} + \sigma \frac{E^{n+1} - E^n}{2} + \\ &+ \sum_{p=1}^P \left( (1 + \alpha_p) J_p^n + \xi_p J_p^{n-1} + \gamma_p \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2\Delta t} \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Проецируя соотношение (2.2), в двумерной области  $D_h^2$  получаем:

$$\begin{aligned}
& \frac{H_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - H_y|_{i-0.5,j}^{n+0.5}}{\Delta x} + \frac{H_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - H_x|_{i,j-0.5}^{n+0.5}}{\Delta y} = \\
& = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^n}{\Delta t} + \sigma \frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^n}{2} + \\
& + \sum_{p=1}^P (1 + \alpha_p) J_{pz}|_{i,j}^n + \xi_p J_{pz}|_{i,j}^{n-1} + \gamma_p \frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t}.
\end{aligned}$$

### 2.2.3 Наложение поглощающих слоев

Проведем дискретизацию уравнений для ADE-CPML из пункта 1.3.4. Дискретизация по времени вспомогательного дифференциального уравнения (1.24) для магнитного поля и его проекция на ось  $z$  дает [100]:

$$k_x \varepsilon_0 \frac{Q_{xy}^{H(n+1)} - Q_{xy}^{H(n)}}{\Delta t} + (k_x \alpha_x + \sigma_x) Q_{xy}^{H(n)} = -\frac{\sigma_x}{k_x} \frac{\partial H_y^n}{\partial x}.$$

Выразим из последнего соотношения  $Q_{xy}^{H(n+1)}$ :

$$Q_{xy}^{H(n+1)} = b_x Q_{xy}^{H(n)} - c_x \frac{\partial H_y^n}{\partial x}, \quad (2.3)$$

$$\text{где } b_x = \frac{k_x \varepsilon_0}{k_x \varepsilon_0 + \Delta t (k_x \alpha_x + \sigma_x)}, \quad c_x = \frac{\Delta t \sigma_x}{k_x (k_x \varepsilon_0 + \Delta t (k_x \alpha_x + \sigma_x))}.$$

На сеточной области  $D_h^2$  уравнение (1.22a) имеет вид:

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_0 \varepsilon_{i,j} \frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^n}{\Delta t} = \\
& = \frac{H_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - H_y|_{i-0.5,j}^{n+0.5}}{k_x \Delta x} + \frac{H_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - H_x|_{i,j-0.5}^{n+0.5}}{k_y \Delta y} + Q_{xy}^{H(n+1)} - Q_{yx}^{H(n+1)},
\end{aligned}$$

где  $Q_{xy}^{H(n+1)}$  и  $Q_{yx}^{H(n+1)}$  определяются по формуле (2.3). Авторы [65] отмечают, что  $Q_{xy}^{H(n)}$  не центрируется по времени, так как это приводит к нестабильности схемы.

### 2.1.4 Задание падающей волны

Рассмотрим два класса источников электромагнитных волн и выделим их особенности [30].

Первый класс источников – это жесткие источники. Они устанавливаются путем назначения желаемой временной функции определенным компонентам  $E$  или  $H$  в пространственной решетке FDTD. Эта временная функция не зависит от чего-либо еще в модели. Например, на одномерной сетке в точке  $i$  может быть установлен жесткий источник генерации синусоидальных волн с частотой  $\nu_0$ :

$$E_z|_i^n = E_0 \sin(2\pi\nu_0 n\Delta t).$$

Еще одним жестким источником может служить точечный источник, обеспечивающий низкочастотный Гауссов импульс:

$$E_z|_i^n = E_0 e^{-\left[\frac{n-n_0}{n_{\text{затухания}}}\right]^2}.$$

Третий вид жесткого источника обеспечивает полосовой Гауссов импульс:

$$E_z|_i^n = E_0 e^{-\left[\frac{n-n_0}{n_{\text{затухания}}}\right]^2} \sin(2\pi\nu_0(n - n_0)\Delta t).$$

Основной проблемой жестких источников в том, что они излучают симметрично в разных направлениях. Однако, при моделировании различных процессов может понадобиться задание плоской волны, излучающей только в одном направлении. Такой источник можно промоделировать с помощью технологии total-field/scattered-field (TF/SF) [30]. Данная технология основана на линейности уравнений Максвелла: расчетная область делится на два поля - total-field, в котором есть и отраженное поле и поле источника, и scattered-field, которое определяется только полем источника. Граница между этими областями и есть «источник» плоской волны (рисунок 2.2).

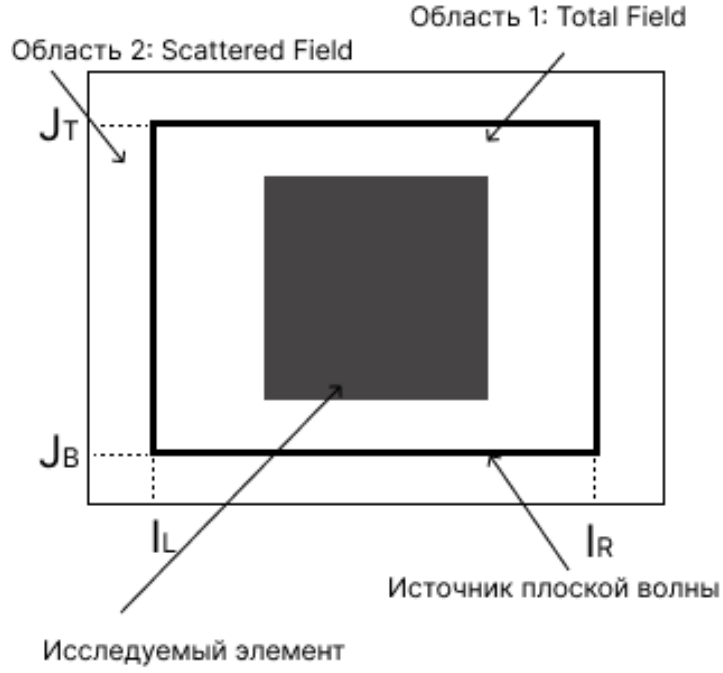


Рисунок 2.2 – Технология TF/SF

Таким образом, электрическое и магнитное поле могут быть разложены как:

$$E_{total} = E_{inc} + E_{scat}, \quad H_{total} = H_{inc} + H_{scat},$$

где  $E_{inc}$  и  $H_{inc}$  – значения полей падающей волны, которые считаются известными во всех точках сетки.

Пусть результирующее поле заключено в границах  $I_L \leq i \leq I_R, J_B \leq j \leq J_T$  (рисунок 2.2). Тогда для разделения результирующего и рассеянного поля необходимо добавить к системе (2.1) следующие соотношения [30]:

$$\begin{aligned} \frac{E_z|_{i,J_B}^{n+1} - E_z|_{i,J_B}^n}{\Delta t} &= \frac{-H_y^{inc}|_{i,J_B-0,5}^{n+0,5}}{\varepsilon_0 \varepsilon_{i,J_B} \Delta x}; \\ \frac{E_z|_{i,J_T}^{n+1} - E_z|_{i,J_T}^n}{\Delta t} &= \frac{H_y^{inc}|_{i,J_T+0,5}^{n+0,5}}{\varepsilon_0 \varepsilon_{i,J_T} \Delta x}; \\ \frac{H_x|_{i,J_B-0,5}^{n+0,5} - H_x|_{i,J_B-0,5}^{n-0,5}}{\Delta t} &= \frac{-E_z^{inc}|_{i,J_B}^n}{\mu_0 \mu_{i,J_B-0,5} \Delta y}; \\ \frac{H_x|_{i,J_T+0,5}^{n+0,5} - H_x|_{i,J_T+0,5}^{n-0,5}}{\Delta t} &= \frac{E_z^{inc}|_{i,J_T}^n}{\mu_0 \mu_{i,J_T+0,5} \Delta y}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{E_z|_{I_L,j}^{n+1} - E_z|_{I_L,j}^n}{\Delta t} &= \frac{H_y^{inc}|_{I_L-0,5,j}^{n+0,5}}{\varepsilon_0 \varepsilon_{I_L,j} \Delta x}; \\ \frac{E_z|_{I_R,j}^{n+1} - E_z|_{I_R,j}^n}{\Delta t} &= \frac{-H_y^{inc}|_{I_R+0,5,j}^{n+0,5}}{\varepsilon_0 \varepsilon_{I_R,j} \Delta x}; \\ \frac{H_y|_{I_L-0,5,j}^{n+0,5} - H_y|_{I_L-0,5,j}^{n-0,5}}{\Delta t} &= \frac{E_z^{inc}|_{I_L,j}^n}{\mu_0 \mu_{I_L-0,5,j} \Delta x}; \\ \frac{H_y|_{I_R+0,5,j}^{n+0,5} - H_y|_{I_R+0,5,j}^{n-0,5}}{\Delta t} &= \frac{-E_z^{inc}|_{I_R,j}^n}{\mu_0 \mu_{I_R+0,5,j} \Delta x}.\end{aligned}$$

## 2.1.5 Неоднородные сеточные области

Все изложенные ранее схемы FDTD метода строились на однородной сеточной области. Однако, данные схемы не могут быть использованы для моделирования изогнутых диэлектрических поверхностей, так как даже при очень мелкой сетке классический алгоритм FDTD вносит ошибки. Чтобы решить эту проблему, принято накладывать неоднородные сетки [102-104]. Такие сетки позволяют учитывать точное геометрическое расположения объекта моделирования, делая ячейки меньше на границах раздела среды и объекта, а также уменьшают численную дисперсию.

Широко используются два подхода к построению схемы FDTD на неоднородных сеточных областях: метод средневзвешенного объема [102, 103] и метод Ю-Миттры (Yu, W., and R. Mittra) [105].

Пусть в ячейке  $Y_{ee}$  проходит граница объекта моделирования (с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$ ) и среды (с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$ ). В общем случае разностная схема FDTD (на примере закона Ампера) для неравномерной сеточной области имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{E_z|_{i,j}^{n+1} - E_z|_{i,j}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \times \\ &\times \left( \frac{H_y|_{i+0,5,j}^{n+0,5} - H_y|_{i-0,5,j}^{n+0,5}}{\varepsilon_x^{eff}|_{i,j} \Delta x} + \frac{H_x|_{i,j+0,5}^{n+0,5} - H_x|_{i,j-0,5}^{n+0,5}}{\varepsilon_y^{eff}|_{i,j} \Delta y} \right),\end{aligned}$$

где  $\varepsilon^{eff}$  – эффективная диэлектрическая проницаемость (диэлектрическая проницаемость, учитывающая  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ ).

Для метода средневзвешенного объема для  $\varepsilon^{eff}$  можно записать следующие соотношения:

$$\varepsilon_v^{eff} = \left[ \frac{1}{\Delta v} \int_v^{v+\Delta v} \frac{1}{\varepsilon_1 \alpha(v) + \varepsilon_2 (1 - \alpha(v))} dv \right]^{-1};$$

$$\varepsilon^{eff} = \frac{V_1(i,j)\varepsilon_1 + (1 - V_1(i,j))\varepsilon_2}{V(i,j)},$$

где  $\Delta v$  – размер ячейки в направлении  $v$  ( $v = x, y, z$ ),  $\alpha(v)$  - параметр диэлектрической поверхности внутри ячеек, заполненных разнородными материалами [102],  $V_1(i,j)$  – частичный объем ячейки  $(i,j)$ , содержащей материал с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$  [103],  $V(i,j)$  - общий объем ячейки  $(i,j)$ .

Подходы [102,103], использующие концепцию средневзвешенного объема, хорошо подходят для моделирования случаев, когда пространственное изменение диэлектрической проницаемости (разница между  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ ) не сильно велика. Однако данные подходы не могут различать ячейки, имеющие разные геометрические свойства. Метод Ю-Миттры [104] основан на обработке криволинейных диэлектрических поверхностей, что обеспечивает большую точность при моделировании диэлектриков. Приведем соотношение для  $\varepsilon^{eff}$  метода Ю-Миттры:

$$\varepsilon_v^{eff} = \frac{\Delta v_1(i,j)\varepsilon_1 + (\Delta v(i,j) - \Delta v_1(i,j))\varepsilon_2}{\Delta v(i,j)},$$

где  $\Delta v_1(i,j)$  – частичный размер ячейки  $(i,j)$  в направлении  $v$  ( $v = x, y, z$ ), заполненной материалом с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$ ,  $\Delta v(i,j)$  - размер ячейки  $(i,j)$  в направлении  $v$ .

## 2.2 Решение прямой задачи дифракции с помощью пакета

### Ansys Lumerical

В данной работе для решения прямой задачи дифракции использовался программный пакет Ansys Lumerical R1 [34], который реализует FDTD-метод решения уравнений Максвелла. Выбор данного программного обеспечения обусловлен его преимуществами по сравнению с другими известными аналогами такими, как, например, Meep [35] и Tidy3D [36].

Популярное программное обеспечение с открытым исходным кодом Meep [35] хоть и является бесплатным (в отличие от используемого здесь Ansys Lumerical), ограничено аппаратным обеспечением центрального процессора, что делает его слишком медленным для крупномасштабных проектов [105]. Еще одним недостатком Meep является возможность в данном пакете наложения только однородной сеточной области, что накладывает ограничения на моделирование сложной геометрии. Кроме того, отсутствие в Meep графического интерфейса усложняет процесс моделирования. Другое часто используемое коммерческое программное обеспечение, Tidy3D [36], предлагает быструю производительность, однако его фирменная модель ценообразования per-simulation создает значительный барьер для более широкого исследовательского сообщества. Кроме того, Tidy3D предназначен для моделирования только трехмерных устройств, что не подходит для исследований в настоящей работе, так как здесь рассматривается двумерное моделирование.

Ansys Lumerical хоть и является коммерческим, но предполагает приобретение одной лицензии для последующего неограниченного использования, обладает удобным графическим интерфейсом (рисунок 2.3), а также является быстрым за счет автоматического распараллеливания вычислений и поддержкой GPU. Кроме того, Ansys Lumerical поддерживает все описанные выше концепции (учет дисперсии материала, наложение PML, задание падающей волны различными способами, в том числе и по

технологии TF/SF, наложение неоднородной сеточной области), которые легко можно настроить с помощью графического интерфейса. В современной литературе можно найти много примеров, когда авторы выбирают именно этот пакет для своих исследований [106-108].

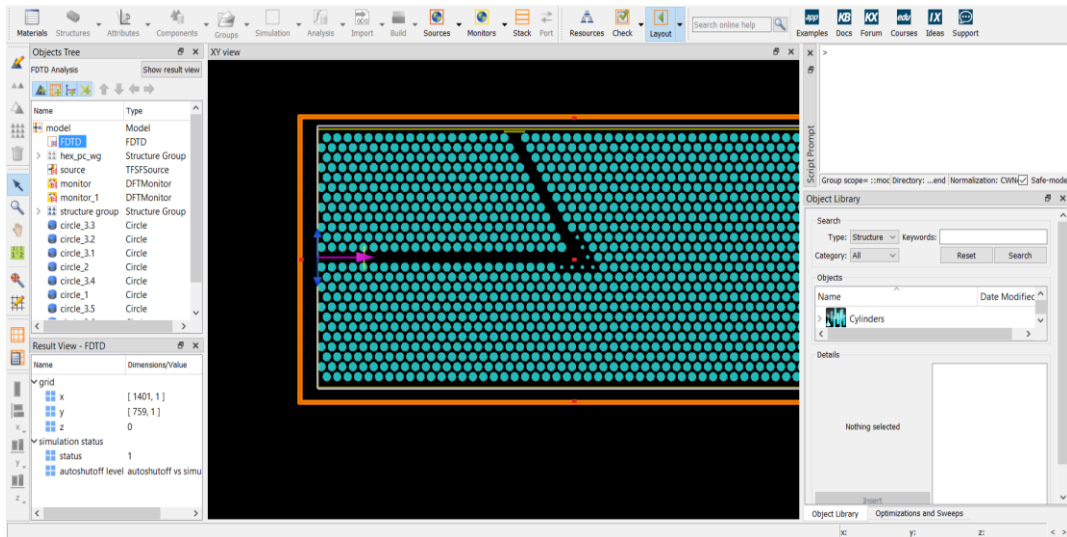


Рисунок 2.3 – Интерфейс программного пакета Ansys Lumerical

Отметим здесь также, что в дальнейшем при расчете эффективности элементов – отношению интенсивности выходного излучения, к интенсивности излучения, поданного на вход – используется такой объект в Ansys Lumerical, как монитор (Frequency-domain monitor). Под интенсивностью  $I$  в настоящей работе понимается квадрат интегрированной мощности по поверхности монитора:  $I = \left( \frac{1}{2} \int_{monitor} Re(P) dS \right)^2$ , где  $P$  – вектор Пойтинга,  $dS$  – вектор нормали к поверхности монитора [109].

### 2.3 Согласование FDTD метода и генетического алгоритма

При моделировании объектов, к которым около границ раздела материалов возникают большие градиенты физических величин, кроме наложения изложенных ранее (пункт 2.1.5 настоящей работы) неоднородных сеточных областей применяются также адаптивные сеточные области [110]. Данный подход нашел широкое применение при численном решении задач

гидродинамики [111,112], газодинамики [113], электродинамики [114,115]. Авторы данных работ «дробят» ячейку сеточной области в зависимости от значения сеточной функции в узлах, окружающих эту ячейку.

В настоящем диссертационном исследовании предлагается совместное использование метода FDTD и генетического алгоритма (пункт 1.2 настоящей работы), особенностью, которого является наложение дополнительного условия на выбор дискретизации сеточной области в FDTD методе (пункт 2.1) с учетом результатов работы генетического алгоритма, чем обуславливается согласование обоих методов [66]. Будем считать, что сеточная область хорошо описывает узел решетки, если на него приходится не менее 10 узлов сетки (рисунок 2.4). Тогда после формирования очередного нового поколения (этап 4 генетического алгоритма из пункта 1.2.1) и перед расчетом функции пригодности для каждой особи в этом поколении проверим минимальное значение генов, которые отвечают за радиус узла решетки. Если для узла кристаллической решетки с этим радиусом текущая сеточная область оказывается слишком грубой (рисунок 2.4а), то происходит сгущение сеточной области (рисунок 2.4б). Размер новой сеточной области выбирается из заранее составленной таблицы соответствия размера сеточной области и диапазона радиусов, которые она хорошо описывает.

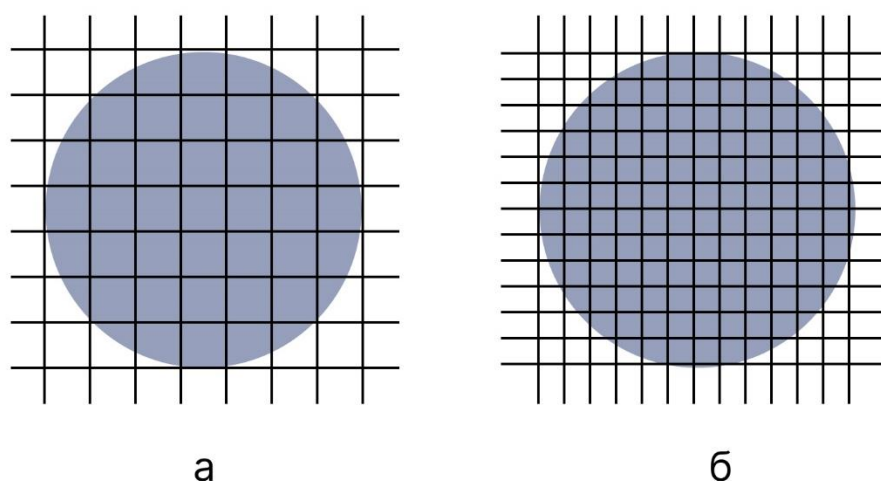


Рисунок 2.4 – Наложение сеточной области на узел структуры:

(а) грубая сетка, (б) измельченная сетка, которая хорошо описывает узел

## 2.4 Применение модели пространственно-вариантной структуры с наложением сеточной области $Y_{ee}$

Свяжем изложенную ранее модель решетки Браве (из пункта 1.1.2 настоящей работы) с сеточной областью  $Y_{ee}$  [66]. Зададим решетку в двумерной области  $D^2$  ( $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y$ ), где  $L_x, L_y$  - физические размеры области. Для этого определим функцию показателя преломления  $\varepsilon(x, y)$ , зависящую от координат точки в области  $D^2$ :

$$\varepsilon(x, y) = \begin{cases} \varepsilon_1, & (x, y) \in circle_{ij} \\ \varepsilon_2, & else \end{cases},$$

где  $\varepsilon_2$  - показатель преломления материала области  $D^2$ ,  $\varepsilon_1$  - показатель преломления материала узла решетки. Область  $circle_{ij}$  - это область узла с номером  $ij, j = \overline{1, N_x}, i = \overline{1, N_y}$ , где  $N_x$ -количество узлов в области  $D^2$  по горизонтали, а  $N_y$ -по вертикали. Если задан период решетки  $a$ , и радиус каверны  $R$ , то область  $circle_{ij}$  определяется в зависимости от типа решетки следующим образом:

$$\begin{aligned} circle_{ij} &= \{(x - x_{0j})^2 + (y - y_{0i})^2 \leq R^2, y_{0i} = ai + \frac{\sqrt{3}}{2}, x_{0j} = \\ &= \begin{cases} (j - 1)a + \frac{a}{2}, & j \bmod 2 \neq 0 \\ (j - 1)a, & j \bmod 2 = 0 \end{cases}, j = \overline{1, N_x}, i = \overline{1, N_y}\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

если решетка гексагональная, и

$$circle_{ij} = \left\{ (x - x_{0j})^2 + (y - y_{0i})^2 \leq R^2, y_{0i} = ai, x_{0j} = aj, j = \overline{0, N_x}, i = \overline{0, N_y} \right\}, \quad (3)$$

если решетка квадратная.

Свяжем координаты  $(x, y)$  двумерной области  $D^2$  с узлом  $(p, q)$  декартовой равномерной сеточной области  $D_h^2$  следующим образом  $(x_p, y_q) = (p\Delta x, q\Delta y): p = \overline{0, P}; q = \overline{0, Q}$ , где  $\Delta x, \Delta y$  соответственно пространственные шаги сетки. Тогда на сеточной области  $D_h^2$  сеточная

функция диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{pq}$  будет определена в узлах сеточной области  $\{(x_p, y_q) = (p\Delta x, q\Delta y): p = \overline{0, P}; q = \overline{0, Q}\}$ .

## **Выводы по главе 2**

1. Для численного решения уравнений Максвелла был выбран метод конечных разностей во временной области (finite-difference time-domain или FDTD), который является основным методом численного их решения.
2. В главе обосновывается выбор пакета Ansys Lumerical для решения прямой задачи дифракции: данный пакет поддерживает все упомянутые выше концепции FDTD-метода, которые легко можно настроить с помощью графического интерфейса, и поддерживает языки программирования python и matlab, что открывает возможности для дополнительных «надстроек» (например, для решения обратной задачи дифракции).
3. Для оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур с дефектами представлен способ согласования генетического алгоритма и FDTD метода, заключающийся в адаптации сеточной области в зависимости от значения радиусов узлов решетки, полученных в генетическом алгоритме. Так же при согласовании ставится дополнительное ограничение на размер узлов, обусловленное технологическими особенностями изготовления структур.
4. Показано применение модели выбранного класса пространственно-вариантной структуры с наложением сеточной области Yee для случая квадратной и гексагональной решетки.

### **3 Расчёт фотонно-кристаллических элементов «волноводного» типа**

Концепция фотонных кристаллов была предложена Яблоновичем в 1987 году [116]. С тех пор активно развивается направление синтеза оптических цифровых устройств на фотонных кристаллах: логических элементов [43], оптических переключателей [44], оптических фильтров [45] и др. Такие устройства имеют ряд преимуществ по сравнению с традиционной электроникой: высокая скорость обработки данных, устойчивость к внешнему электромагнитному воздействию, широкие возможности по аппаратному шифрованию сигнала.

Будем понимать под элементами «волноводного» типа элементы, которые не изменяют поданное на вход излучение, а просто передают его на выходной порт. К таким элементам здесь относятся изгибы волноводов [117], узел пересечения [118] и узел ввода излучения [118]. Расчет данных элементов является актуальной задачей, так как из них строятся более сложные элементы, а также для обеспечения высокой плотности компоновки на одном кристалле оптической интегральной схемы.

#### **3.1 Модели фотонно-кристаллических элементов**

Рассматриваемые элементы синтезируются на двумерном фотонном кристалле (которые формируются как набор воздушных каверн в слое кремния ( $n=3,47$ )) с дефектами (рисунки 3.2, 3.3, 3.5). Выбор данной конфигурации фотонного кристалла обусловлен тем, что их изготовление технологичнее, по сравнению с конфигурацией, при которой периодичность кристалла достигается путем формирования столбцов на диэлектрике [119].

Рассматриваемый кристалл имеет гексагональную решетку с параметрами, которые были найдены с использованием итеративного подхода, изложенном в [120]: период кристалла  $a=459$  нм и радиусом каверн  $r=183,9$  нм. Дефект получается путем удаления из кристалла одного или

нескольких рядов каверн. Рабочая длина волны источников излучения  $\lambda=1,55$  мкм. Рассмотрим подробно элементы каждого типа:

### 3.1.1 Нахождение фотонной запрещенной зоны методом разложения плоской волны

Рассчитаем фотонную запрещенную зону для исследуемого кристалла методом разложения плоской волны, чтобы убедиться, что для выбранной длины волны ( $\lambda=1,55$  мкм), все описанные ниже элементы работают корректно (присутствует волноводное распространение излучения, не проникающее в кристалл). Метод разложения плоских волн (Plane wave expansion method, PWE) [28] - вычислительный метод в электродинамике для решения уравнений Максвелла путём формулировки задачи на собственные значения. Данный метод хорошо зарекомендовал себя как метод расчета зонных диаграмм фотонных кристаллов [47-53]. Зонная диаграмма фотонного кристалла показывает зависимость частоты фотонов от их волнового числа и строится для разных направлений распространения света в кристалле. На диаграмме отображаются разрешенные состояний для фотонов. Области, в которых нет таких состояний и есть фотонная запрещенная зона. Для рассматриваемого кристалла зонная диаграмма имеет вид (рисунок 3.1):

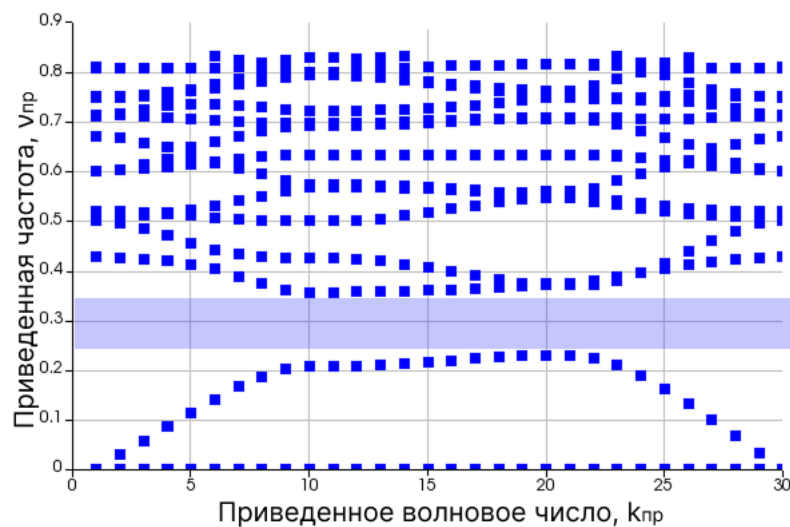


Рисунок 3.1 – Зонная диаграмма для исследуемого кристалла

На рисунке 3.1 по оси абсцисс отложено приведенное волновое число  $k_{\text{пр}} = k \frac{a}{2\pi}$ , а по оси ординат - приведенная частота  $\nu_{\text{пр}} = \nu \frac{a}{c}$ , где  $k$  – волновое число источника,  $a$  – период кристалла,  $c$  – скорость света,  $\nu$  – частота излучения источника. Точки на графике соответствуют разрешенному энергетическому состоянию фотона. Зона, где нет таких состояний, и есть фотонная запрещенная зона (отмечена прямоугольником на графике).

Чтобы убедиться, что мы работаем именно в запрещенной зоне, заменим частоту соотношением для длины волны ( $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ) и получим  $\nu_{\text{пр}} = \frac{a}{\lambda}$ . Для рассматриваемых параметров ( $a=459$  нм,  $\lambda=1,55$  мкм)  $\nu_{\text{пр}} = 0,29$ , что попадает в запрещенную зону. Следовательно, при создании линейного дефекта в исследуемом кристалле при выбранной длине волны будет наблюдаться распространение излучения по дефекту без проникновения его в глубь кристаллической структуры.

### 3.1.2 Модели фотонно-кристаллических волноводов с изгибами

Такой тип элементов был оптимизирован в [50] с помощью генетического алгоритма. Авторами получена эффективность (под которой понимается отношение интенсивности на выходе элемента к интенсивности, подаваемой на вход (пункт 2.4 настоящей работы)) в 93% для изгиба фотонно-кристаллического волновода на  $90^\circ$  на кристалле с квадратной решеткой и кремниевыми стержнями в воздухе. Однако, вычисления проводились для кристалла, малые геометрические размеры которого допускают влияние падающей (и не проникающей глубоко в структуру) волны на интерференцию в области изгиба. В настоящем исследовании изгибы получены путем стыковки фрагментов фотонно-кристаллических волноводов под углом  $120^\circ$  (рисунок 3.2а) и под углом  $60^\circ$  (рисунок 3.2б) [117].

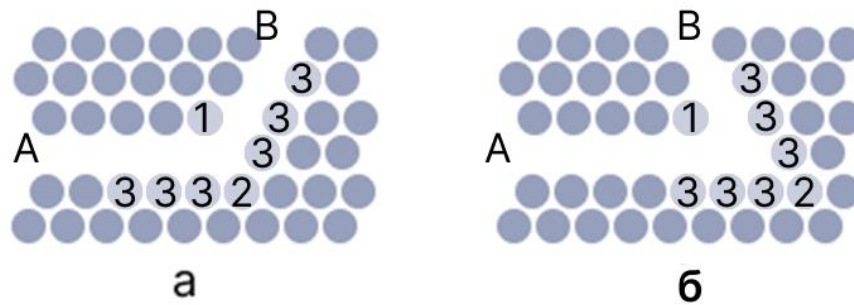


Рисунок 3.2 – Фрагменты изгибов волноводов: (а) на 120°, (б) на 60°

Пусть излучение (падающая плоская волна задается по технологии TF/SF (пункт 2.1.4 настоящей работы)) падает на левый торец волновода А, а интенсивность выходного излучения регистрируется на конце волновода В. Тогда эффективность без предварительной оптимизации такого типа элемента составляет 9% и 3% для изгиба 120° и 60° соответственно. Для получения максимально возможной эффективности передачи излучения через изгиб будем менять значения радиусов каверн вблизи изгиба. Эти каверны отмечены цифрами на рисунке 3.1 (а-б) т.е. набор параметров оптимизации (описанного в пункте 1.1 настоящей работы) имеет вид вектора  $x = \{r_1, r_2, r_3\}$ .

### 3.1.3 Модель узла пересечения

Известен ряд работ по увеличению эффективности узла пересечения двух фотонно-кристаллических волноводов [47,121,122]. Однако компоновка интегральной схемы на одном кристалле может включать пересечение большего количества волноводов. Рассмотрим пересечения двух и трех волноводов, описанных выше, на фрагменте кристалла размерами 15ах15а под углами 60°, как показано на рисунке 3.3 [118].

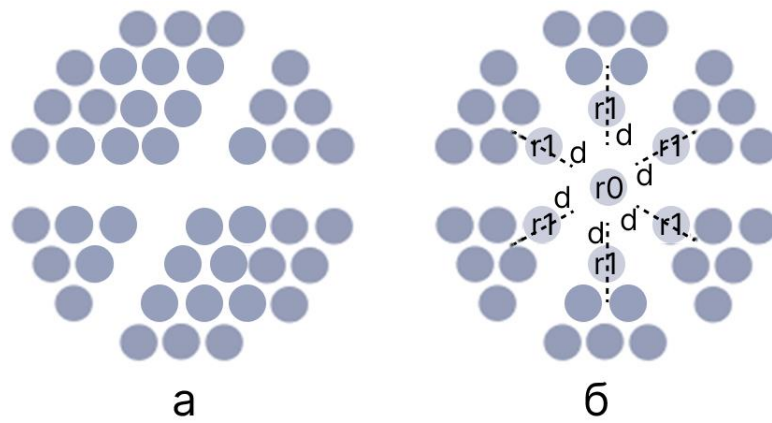


Рисунок 3.3 – Фрагменты узлов пересечения: (а) двух волноводов, (б) трех волноводов

Целью оптимизации такого узла является получение структуры, гарантирующей передачу излучения по одному из волноводов без перекрестных помех (crosstalking) с другими волноводами, входящими в состав пересечения. Пусть излучение (источник излучения магнитный диполь (пункт 2.2.4 настоящей работы)) распространяется слева направо в горизонтальном волноводе в пересечении (ограничимся рассмотрением только одного волновода для расчета эффективности, предполагая симметрию элемента). Тогда узел пересечения двух волноводов обеспечивает передачу излучения практически без потерь (рисунок 3.4) и не нуждается в оптимизации, а эффективность узла пересечения трех волноводов, составляет 48%.

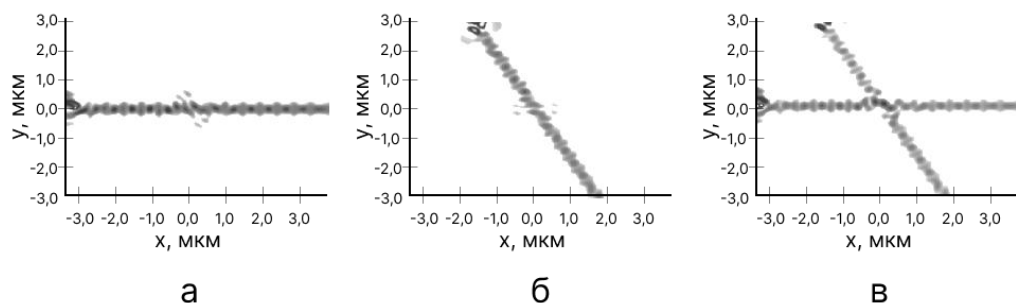


Рисунок 3.4 – Распределение модуля магнитного поля в узле пересечения двух волноводов: (а-б) работа одного волновода, (в) одновременная работа волноводов

В качестве вектора для оптимизации примем следующий набор параметров:  $x = \{r_0, r_1, d\}$ , где  $r_0, r_1$  – радиусы каверн,  $d$  – их смещения относительно начального положения, как показано на рисунке 3.3(б).

### 3.1.4 Модель узла ввода излучения

Пусть излучение (падающая волна задается по технологии TF/SF) подается на левый торец фотонно-кристаллического волновода из свободного пространства. Если расположить источник излучения на расстоянии  $4a$  от волновода, то доля (отношение интенсивности излучения в волноводе к интенсивности излучения в свободном пространстве на выбранном расстоянии) попавшего в волновод излучения составит 20%. Для повышения этой доли следует изменять топологию кристалла на торце, принимающем излучение. В качестве узла ввода будем формировать «трапецию», состоящую из четырех рядов каверн (два ряда над линейным дефектом и два ряда под) (рисунок 3.5) [118].

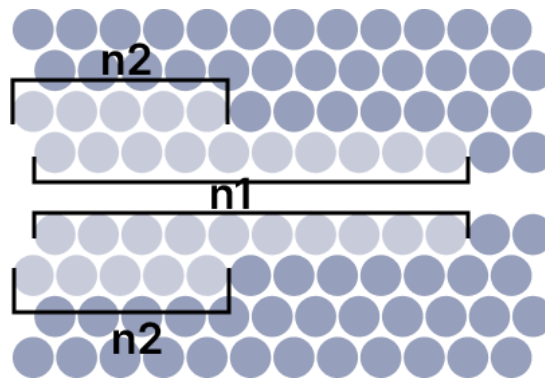


Рисунок 3.5 – Фрагмент узла ввода излучения

Тогда набор параметров оптимизации имеет вид:  $x = \{n_1, n_2, h_1, h_2\}$ , где  $n_1, n_2$  – число каверн, формирующих «трапецию» для первого и второго ряда (первым считаем ряд каверн, который расположен ближе к дефекту) соответственно,  $h_1, h_2$  – шаг изменения радиуса каверн в «трапеции».

## 3.2 Применение генетической оптимизации к расчету фотонно-кристаллических элементов

### 3.2.1 Выбор параметров генетического алгоритма

В качестве функции пригодности для генетического алгоритма (описанного в пункте 1.2.1 настоящей работы) возьмем эффективность элемента - отношение интенсивности на выходе элемента к интенсивности, подаваемой на вход:  $\delta = \frac{I_{out}}{I_{in}}$ .

Для нахождения числа особей в одном поколении обратимся к формуле (1.12) из пункта 1.2.4 настоящей работы. В данной модели авторы [22] рекомендуют  $P(S_L^N)$  брать равным 0,99. Тогда для рассмотренных ранее элементов  $L=3$  (для изгибов и узла пересечения) и  $L=4$  (для узла ввода излучения). Тогда при  $L=3$  и  $L=4$  минимальная  $N=10$  особям. Проверим с помощью численного эксперимента состоятельность данного теоретического прогноза [123]. Для каждого из рассматриваемых элементов при различных  $N$  фиксировался номер поколения  $n$ , на котором сошелся алгоритм, а также рассчитывались эффективность  $\delta$  и вычислительная сложность  $\tau$  (под которой в этой работе понимается количество обращений к функции, решающей прямую задачу дифракции). Результаты экспериментов представлены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Результаты вычислительных экспериментов по оценке размера популяции

элемент	N=4	N=6	N=8	N=10	N=12	N=14
изгиб 60°	$n=85$ $\tau=340$ ( $\delta=0,95$ )	$n=63$ $\tau=378$ ( $\delta=0,95$ )	$n=40$ $\tau=320$ ( $\delta=0,93$ )	$n=58$ $\tau=580$ ( $\delta=0,99$ )	$n=18$ $\tau=216$ ( $\delta=0,91$ )	$n=52$ $\tau=728$ ( $\delta=0,93$ )
изгиб 120°	$n=56$ $\tau=224$ ( $\delta=0,93$ )	$n=81$ $\tau=486$ ( $\delta=0,90$ )	$n=82$ $\tau=656$ ( $\delta=0,95$ )	$n=51$ $\tau=510$ ( $\delta=0,99$ )	$n=83$ $\tau=996$ ( $\delta=0,95$ )	$n=73$ $\tau=1022$ ( $\delta=0,99$ )
пересечение	$n=12$ $\tau=48$ ( $\delta=0,95$ )	$n=23$ $\tau=138$ ( $\delta=0,95$ )	$n=42$ $\tau=336$ ( $\delta=0,93$ )	$n=60$ $\tau=600$ ( $\delta=0,99$ )	$n=84$ $\tau=1008$ ( $\delta=0,95$ )	$n=47$ $\tau=658$ ( $\delta=0,99$ )

узел ввода	$n = 38$ $\tau = 152$ ( $\delta = 0,41$ )	$n = 71$ $\tau = 426$ ( $\delta = 0,42$ )	$n = 35$ $\tau = 280$ ( $\delta = 0,41$ )	$n = 83$ $\tau = 830$ ( $\delta = 0,89$ )	$n = 53$ $\tau = 636$ ( $\delta = 0,46$ )	$n = 44$ $\tau = 528$ ( $\delta = 0,42$ )
------------	---	---	---	---	---	---

Из таблицы можно видеть, что для рассматриваемых элементов максимальная эффективность в 99% достигается при размере популяции в 10 особей, что согласуется с предсказаниями модели.

Остальные параметры генетического алгоритма были найдены эмпирически в результате вычислительных экспериментов: вероятность скрещивания  $p_c = 0,95$ , вероятность мутации  $p_m = 0,05$ , а для формирования нового поколения (последний этап генетического алгоритма (пункт 1.2.1)) бралось 10% особей из старого поколения и 90% особей, полученных в результате скрещивания и мутации.

### **3.2.2 Результаты генетической оптимизации фотонно-кристаллических волноводов с изгибами**

Пусть радиусы интересующих нас каверн (рисунок 3.1 а-б) меняются в диапазоне от 0 до  $a/2$ , где  $a$  – период кристалла. Тогда, выбрав размер кристалла по вертикали и горизонтали  $24a \times 50a$ , а размер сеточной области размерами  $522 \times 819$  узлов и минимальным количеством узлов на длину волны равным 50 (неоднородная область), в результате работы генетического алгоритма получены следующие результаты [117]: для изгиба волновода на  $120^\circ$  эффективность до оптимизации составляла 0,09, после превышала 0,99, а для изгиба на  $60^\circ$  эффективность до и после оптимизации составила 0,03 и превышала 0,99 соответственно (Таблица 3.2, рисунки 3.6 и 3.7). То есть применение генетической оптимизации позволило увеличить эффективность в 11 и в 33 раза для изгибов на  $120^\circ$  и  $60^\circ$  соответственно.

Таблица 3.2 – Радиусы каверн, полученные в результате генетической оптимизации

изгиб	эффективность до оптимизации	эффективность после оптимизации	оптимизированные радиусы, нм		
			$r_1$	$r_2$	$r_3$
60°	0,03	>0,99	199	83	83
120°	0,09	>0,99	35	54	115

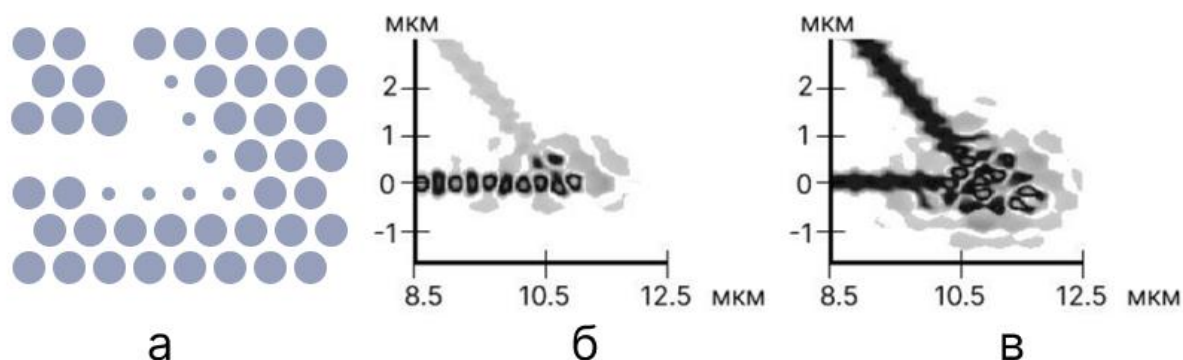


Рисунок 3.6 – Результат оптимизации изгиба волновода на 60°: (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поля до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

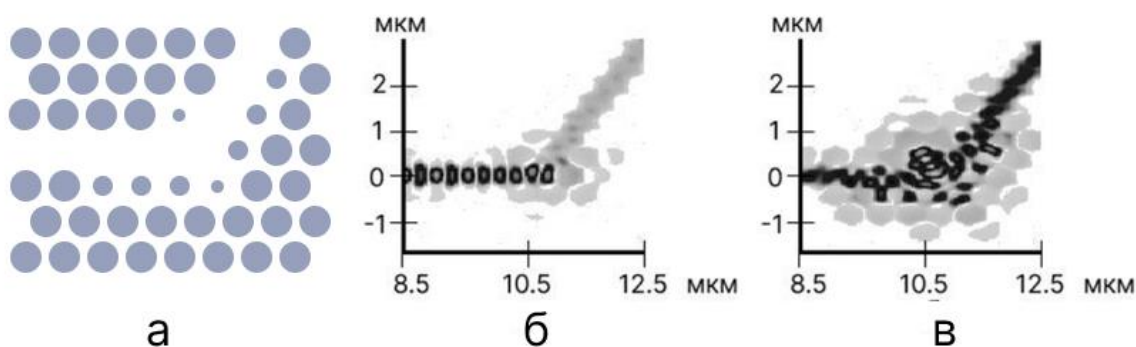


Рисунок 3.7 – Результат оптимизации изгиба волновода на 120°: (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поля до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

Стоит отметить, что при расчете изгибов волноводов алгоритм сошелся на 23 и 28 поколения для изгибов 120° и 60° соответственно. На рисунке 3.8 представлены результаты работы алгоритма.

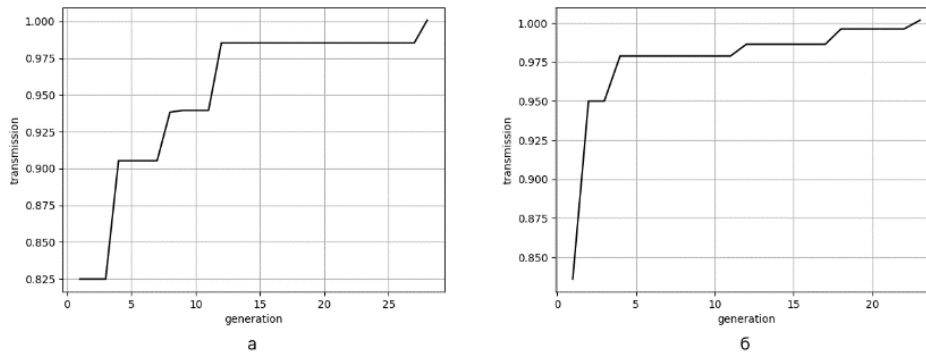


Рисунок 3.8 – Результаты работы алгоритма: (а) для изгиба на  $120^\circ$ , (б) для изгиба на  $60^\circ$

Данное решение устойчиво: с измельчением сеточной области с 891 узла до 1400 по горизонтали и с 522 до 821 по вертикали значение эффективности остается неизменным в обоих случаях. Однако из таблицы 3.2 можно заметить, что самый маленький полученный радиус каверны равен 35 нм, что технологически невозможно для изготовления [54]. К тому же шаг сеточной области равен 30 нм, то есть на одну каверну приходится чуть более одного узла сетки, что плохо описывает реальный элемент. В [124] было показано, что получаемые в ходе генетической оптимизации маленькие размеры каверн для более сложных элементов, при измельчении сеточной области приводят к неустойчивости разностного решения.

Поэтому для задачи оптимизации оптических фотонно-кристаллических элементов следует модифицировать стандартный генетический алгоритм из пункта 1.1. Наложим дополнительные ограничения на выбранные параметры с учетом технологических особенностей изготовления элемента, а также ограничений, накладываемых численным методом, при помощи которого производится расчет эффективности особи. Аналогичные ограничения были применены в [42] для расчета дифракционных оптических элементов с квантованной фазовой функцией.

В предлагаемом алгоритме радиусы каверн должны изменяться в диапазоне  $[r_0, a/2]$ , где  $a$  – период кристалла,  $r_0$  – минимальный радиус

каверны, которая может быть изготовлена и хорошо описана данной сеточной областью при фиксированном времени работы алгоритма. Рассмотрим кристалл размерами  $15a \times 15a$ . Пусть оптимальное время работы алгоритма составляет не более 48 часов. Тогда следует выбрать сеточную область размерами  $290 \times 290$  узлов. Будем считать, что сеточная область хорошо описывает задачу, если на каверну минимально приходится 10 узлов сетки. В этом случае минимальное значение радиуса каверны  $r_0$  для задачи составляет 140,4 нм, что является технологически возможным для изготовления [54]. Так же хочется отметить, что в работе [54] проводились исследования влияния флуктуации в диапазоне  $[-20\%; +20\%]$  от расчетного значения радиуса каверны в фотонно-кристаллическом волноводе. Было показано, что изменение радиуса в интервале  $[-18\%; +10\%]$  не влияют на волноводные свойства. В данной работе так же предполагается, что малые отклонения значений радиусов каверн от рассчитанных не повлияют на работу элементов.

Проведем еще одну серию вычислительных экспериментов для изгибов волноводов, проведя расчет по модифицированному генетическому алгоритму. Результаты оптимизации представлены в таблице 3.3 и на рисунках 3.9 и 3.10.

Таблица 3.3 – Радиусы каверн, полученные в результате генетической оптимизации по модифицированному алгоритму

изгиб	эффективность до оптимизации	эффективность после оптимизации	оптимизированные радиусы, нм		
			$r_1$	$r_2$	$r_3$
60°	0,03	>0,99	141	142	220
120°	0,09	>0,99	221	141	218

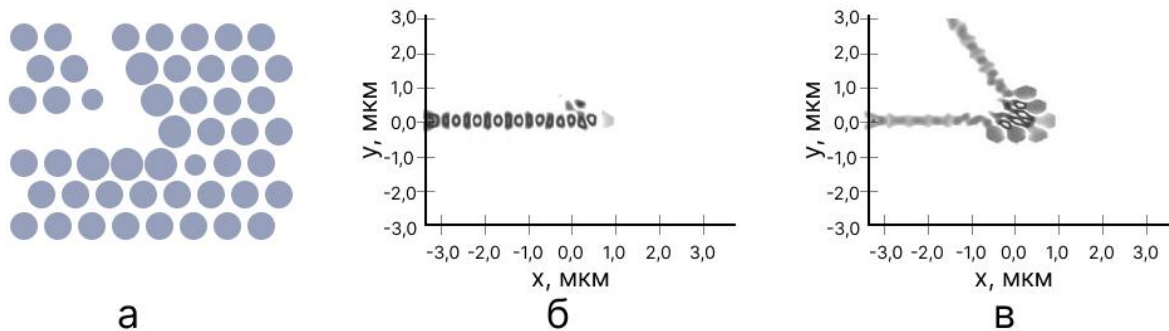


Рисунок 3.9 – Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на  $60^\circ$ : (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поле до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

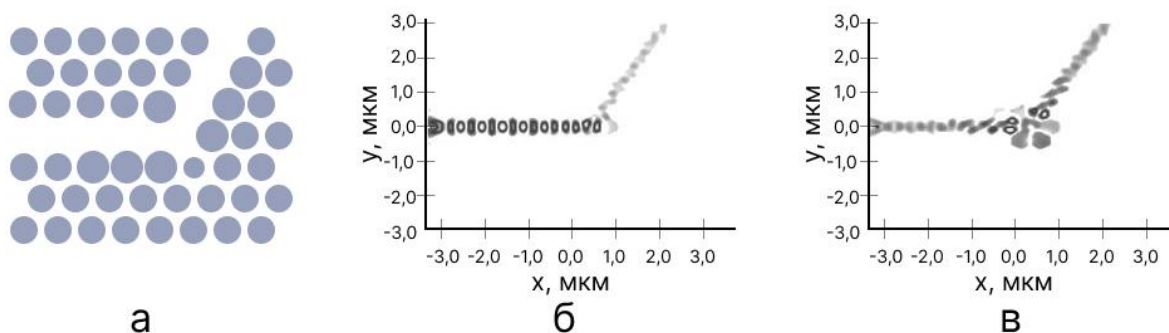
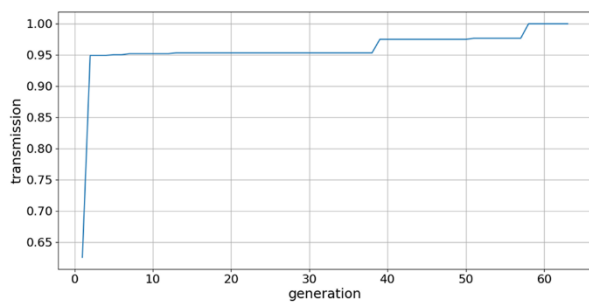
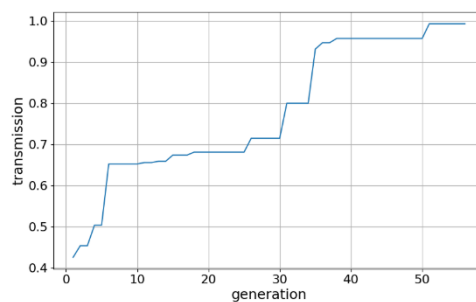


Рисунок 3.10 – Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на  $120^\circ$ : (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поле до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

Из таблицы видно, что в результате работы алгоритма были получены топологии, обеспечивающие передачу сигнала практически без потерь. Однако время, затраченное на поиск решения увеличилось. Так для изгиба на  $60^\circ$  алгоритм сошелся на 58 поколении, а для изгиба на  $120^\circ$  на 51 (рисунок 3.11). Эти результаты в 2 раза больше, чем у стандартного генетического алгоритма. Очевидно, это связано с тем, что при уменьшении области поиска, сокращается и количество решений, в которые может попасть алгоритм.



а



б

Рисунок 3.11 – Результаты работы модифицированного алгоритма: (а) для изгиба на  $60^\circ$ , (б) для изгиба на  $120^\circ$

Далее проведем еще одну серию экспериментов с применением метода согласования генетического алгоритма и FDTD метода. Правило адаптации сеточной области в зависимости от результатов генетической оптимизации представлено в таблице 3.4:

Таблица 3.4 – Правило адаптации сеточной области

сеточная область (кол-во узлов)	290	300	310	320	340	350	360	370	380
минимальный радиус (нм)	140	135	130	125	120	115	110	105	100

Так, например, если в результате оптимизации был получен радиус каверны 128 нм, то сеточную область следует измельчить до 320 узлов по горизонтали и вертикали.

После оптимизации с адаптации сеточной области были получены значения эффективностей в 99% для обоих типов изгибов (таблица 3.5, рисунок 3.12).

Таблица 3.5 – Радиусы каверн, полученные в результате генетической оптимизации

изгиб	эффективность до оптимизации	эффективность после оптимизации	оптимизированные радиусы, нм		
			$r_1$	$r_2$	$r_3$
60°	0,03	>0,99	113	221	147
120°	0,09	>0,99	215	148	121

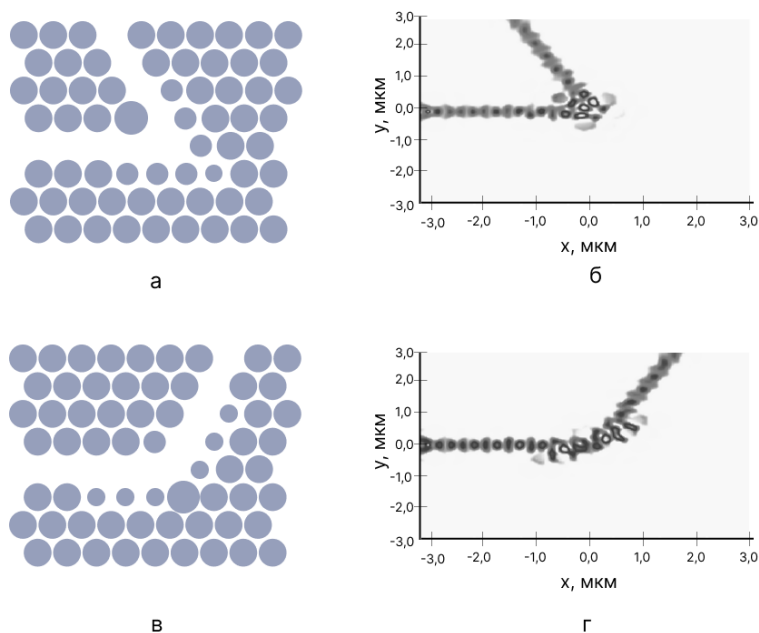
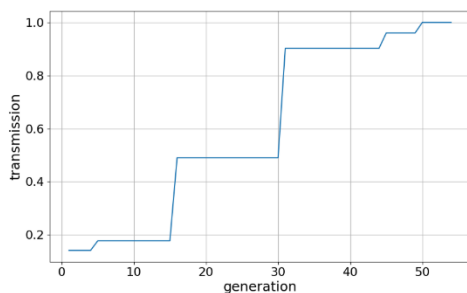
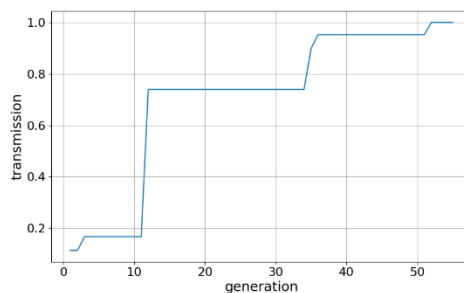


Рисунок 3.12 – Результат оптимизации алгоритмом с адаптацией сеточной области изгибов волновода на: (а-б) полученная топология и распределение модуля магнитного поле изгиба на 60°, (в-г) полученная топология и распределение модуля магнитного поле изгиба на 120°

Как видно из таблицы 3.5 радиусы каверн получились меньше, чем в предыдущем вычислительном эксперименте, но все еще пригодны для изготовления. При этом произошло сгущение сеточной области с 290 узлов до 360 узлов в случае изгиба на 60° и с 290 до 340 узлов в случае изгиба на 120°. Обратим так же внимание, что в данном вычислительном эксперименте алгоритм сошелся на 50 и 51 поколении для изгибов волноводов на 60° и 120° соответственно (рисунок 3.13).



а



б

Рисунок 3.13 – Результаты работы алгоритма с адаптацией сеточной области: (а) для изгиба на  $60^\circ$ , (б) для изгиба на  $120^\circ$

### 3.2.3 Результаты генетической оптимизации узла пересечения

При генетической оптимизации узла пересечения (рисунок 3.2б) по модифицированному генетическому алгоритму и тем же размером сеточной области, что и в предыдущем пункте была получена эффективность 0,71 (без оптимизации 0,48), при следующих результатах оптимизации:  $r_0 = 192$  нм,  $r_I = 174$  нм,  $d = 255$  нм [118]. Полученная эффективность выше эффективности изначального узла в 1,5 раза. Дифракционные картины (распределение модуля магнитного поля) и модель структуры после оптимизации представлены на рисунке 3.14.

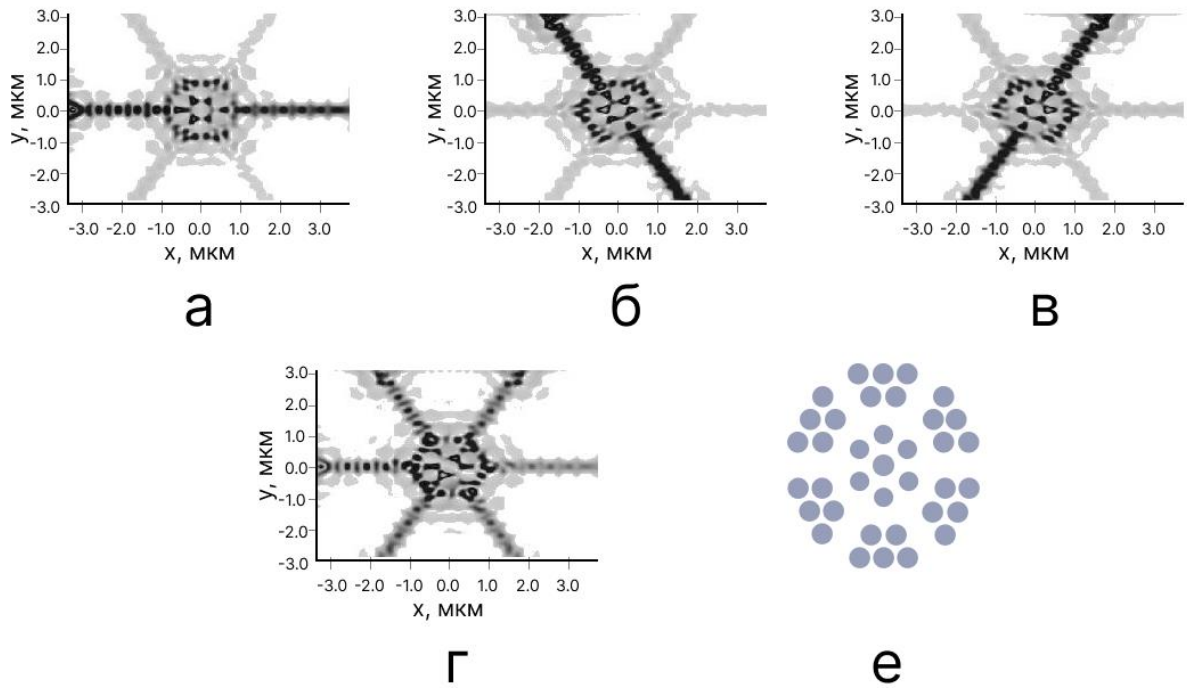


Рисунок 3.14 – Результаты первого эксперимента: (а-в) дифракционные картины случая работы волноводов по-отдельности, (г) дифракционная картина случая работы трех волноводов одновременно, (д) топология пересечения после оптимизации

Следующим шагом была догадка исключить из рассмотрения центральную каверну (как в [47]). Тогда при  $r_0 = 0$  нм (принудительно задается в алгоритме),  $r_I = 162$  нм,  $d = -120$  нм эффективность равна 0,99, что выше эффективности изначального узла в 2 раза и выше результатов первого эксперимента в 1,4 раза. Дифракционные картины (распределение модуля магнитного поля) и модель структуры после оптимизации представлены на рисунке 3.15.

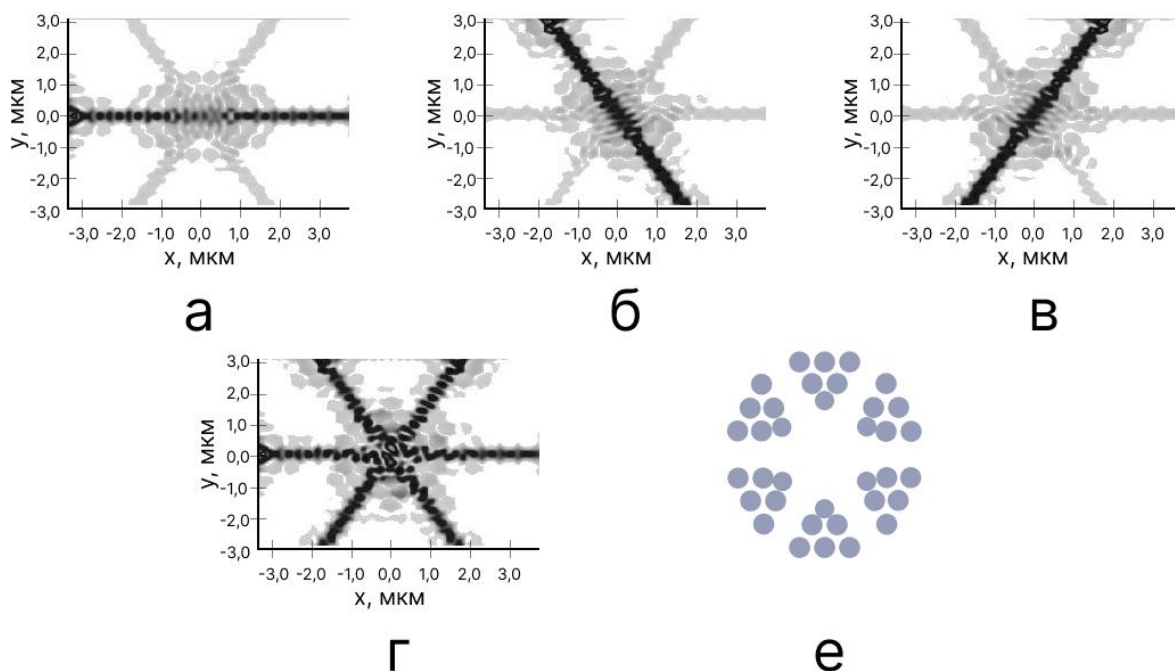


Рисунок 3.15 – Результаты второго эксперимента: (а-в) дифракционные картины случая работы волноводов по-отдельности, (г) дифракционная картина случая работы трех волноводов одновременно, (д) модель пересечения после оптимизации

Отметим, что алгоритм сошелся на 59 поколении в первом эксперименте и на 60 поколении во втором. Графики работы алгоритма представлены на рисунке 3.16.

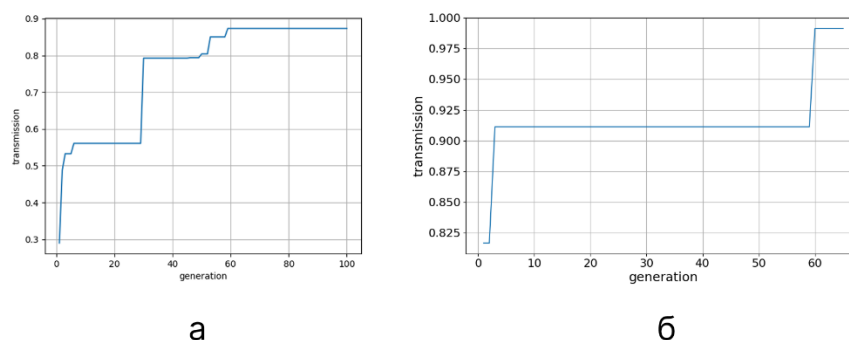


Рисунок 3.16 – Результаты работы алгоритма: (а) в первом эксперименте, (б) во втором эксперименте

Применение алгоритма согласования генетического алгоритма и FDTD метода к узлу пересечения фотонно-кристаллических волноводов не привело к улучшению результата, так как радиусы каверн в процессе оптимизации оставались достаточно большими и не требовали сгущения сеточной области.

### 3.2.4 Результаты генетической оптимизации узла ввода излучения

Пусть узел формируется на кристалле размерами по горизонтали и вертикали  $20a \times 11a$ . Тогда исходя из соображений пункта 3.2.2 будем проводить расчеты на сеточной области размером  $5800 \times 290$  узлов. Для генетической оптимизации узла ввода излучения проведем два эксперимента [118]. В первом эксперименте примем следующие диапазоны изменения параметров:  $n_1 \in [1, 10]$ ,  $n_2 \in [1, 5]$ ,  $h_1 \in [\frac{1}{20}r, \frac{1}{10}r]$ ,  $h_2 \in [\frac{1}{20}r, \frac{1}{15}r]$  (при выборе таких шагов в худшем случае радиус самой минимальной каверны в конусе будет равен 0). В результате работы алгоритма получена эффективность 0,99 (без оптимизации 0,2) при  $n_1=7$ ,  $n_2=2$ ,  $h_1=14,3$  нм,  $h_2=11,3$  нм. Топология узла ввода после оптимизации и дифракционная картина (распределение модуля магнитного поля) представлены на рисунке 3.17.

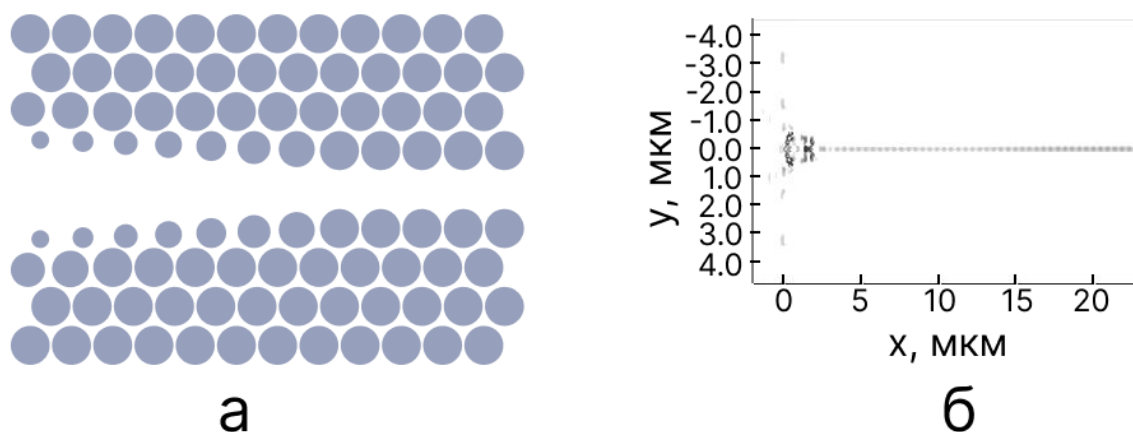


Рисунок 3.17 – Результаты первого эксперимента по оптимизации узла ввода: (а) – топология, (б) – дифракционная картина

Несмотря на то, что рассчитанная топология характеризуется вводом излучения практически без потерь и обеспечивает повышение эффективности в 5 раз, при полученном шаге изменения радиуса каверн для первого «трапеции», радиус самой маленькой каверны составляет 84 нм, что является невозможным для изготовления в силу ранее упомянутой технологии [54]. Проведем второй эксперимент, учитывая технологические особенности изготовления фотонно-кристаллического волновода. Изменим диапазоны изменения шагов:  $h_1 \in [\frac{1}{50}r, \frac{1}{20}r]$ ,  $h_2 \in [\frac{1}{50}r, \frac{1}{20}r]$  (при выборе таких шагов в худшем случае радиус минимальной каверны будет равен 90 нм). В результате работы алгоритма получено значение эффективности 0,89 при  $n_1=7$ ,  $n_2=4$ ,  $h_1=8,1$  нм  $h_2=8,8$  нм. В этом случае самый маленький радиус в топологии равен 127 нм, а эффективность повысилась в 4,5 раза. Топология узла ввода после оптимизации и дифракционная картина представлены на рисунке 3.18.

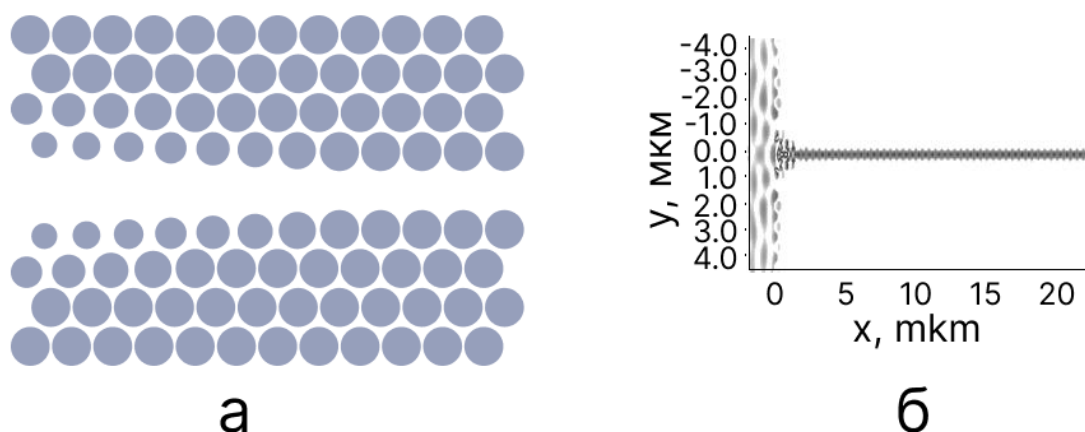


Рисунок 3.18 – Результаты второго эксперимента по оптимизации узла ввода: (а) – топология, (б) – дифракционная картина

Отметим, что алгоритм сошелся на 51 поколении в первом эксперименте и на 83 поколении во втором. Графики работы алгоритма представлены на рисунке 3.19.

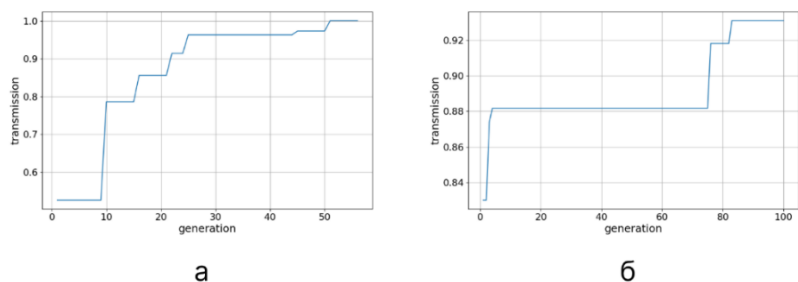


Рисунок 3.19 – Результаты работы алгоритма: (а) в первом эксперименте, (б) во втором эксперименте

Применение алгоритма согласования генетического алгоритма и FDTD метода к узлу ввода излучения не привело к улучшению результата, так как радиусы каверн в процессе оптимизации оставались достаточно большими и не требовали сгущения сеточной области.

### 3.3 Применение детерминированных методов оптимизации для расчета фотонно-кристаллических элементов волноводного типа

Хоть генетическая оптимизация и является результативным методом повышения эффективности элементов, она требует больших вычислительных затрат. В данной работе выдвигается предположение, что для оптимизации элементов «волноводного» типа достаточно применения детерминированных методов оптимизации [125].

Для решения задач настоящей работы рассматриваются детерминированные методы безградиентной оптимизации (называемые так же методами оптимизации нулевого порядка [126]: метод Хука-Дживса, метод покоординатного спуска, в которых для нахождения экстремума функции последовательно вычисляются значения целевой функции, и такой стохастический метод оптимизации, как генетический алгоритм. Методы, основанные на градиентном подходе, не рассматриваются, так как решение прямой задачи в нашем случае не предусматривает наличие аналитически

заданной функции. Кроме того, целевая функция имеет негладкий характер, что делает затруднительным нахождение градиента даже численно.

Сначала рассмотрим подробнее каждый из методов, а затем сравним результаты оптимизации элементов этими методами с результатами генетической оптимизации по критериям эффективности и вычислительной сложности [125].

### 3.3.1 Детерминированные методы безградиентной оптимизации

#### 3.3.1.1 Метод покоординатного спуска

Данный метод заключается в последовательной одномерной оптимизации (в нашей работе для одномерной оптимизации мы используем метод Брента [127]) для каждой компоненты вектора текущего приближения  $x^*$ . Опишем каждый шаг алгоритма.

*Алгоритм 3.1: Алгоритм метода покоординатного спуска*

- 1) Выбирается начальное приближение  $x^*$  и точность  $\varepsilon$ .
- 2) Для  $i$  компоненты вектора  $x^*$  при фиксированных остальных выполняется одномерная оптимизация, при этом полученная в результате одномерной оптимизации компонента, заменяет исходную в векторе  $x^*$ :  $x_i^{*+1} = \operatorname{argmin}_{y \in D} f(x_1^{*+1}, \dots, x_{i-1}^{*+1}, y, x_{i+1}^*, \dots, x_n^*)$ , где  $D$  – область допустимых значений для  $i$  компоненты вектора  $x^*$ . В данной работе одномерная оптимизация производится с помощью метода Брента.
- 3) Повторяем пункт 2 для всех компонент вектора  $x^*$  и получаем новый вектор  $x^{*+1}$
- 4) Если  $|x^{*+1} - x^*| < \varepsilon$ , то точка  $x^{*+1}$  – точка минимума, если нет, то принимаем  $x^{*+1}$  за новое начальное приближение  $x^*$  и переходим к пункту 2.

### 3.3.1.2 Метод Хука-Дживса

Данный метод делится на две фазы: исследующий поиск и поиск по образцу [128]. В начале выбирается начальный вектор  $x^*$  (назовем этот вектор базовым), вектор шагов  $H$  и наименьшее допустимое значение  $\varepsilon$  для компонент вектора  $H$ . Вычисляется значение эффективности для базового вектора  $\delta(x^*)$ . Далее выполняются непосредственно фазы алгоритма. Опишем их.

*Алгоритм 3.2: Алгоритм метода Хука-Дживса*

Фаза 1. Исследующий поиск:

1) Для  $i$  компоненты вектора  $x^*$  ( $i = \overline{1, n}$ ,  $n$  – размерность векторов  $x^*$  и  $H$ ) вычисляются значения эффективности справа и слева от базового  $\delta(x_i^* + h_i) = \delta(x_1, \dots, x_i + h_i, \dots, x_n)$  и  $\delta(x_i^* - h_i) = \delta(x_1, \dots, x_i - h_i, \dots, x_n)$

2) Если  $\delta(x_i^* + h_i) < \delta(x^*)$ , ( $\delta(x_i^* - h_i) < \delta(x^*)$ ), то  $i$ -тая компонента вектора  $x^*$  заменяется на  $x_i + h_i$  (на  $x_i - h_i$ ). Если оба новых значения больше, чем значение эффективности для базового вектора, то  $h_i$  уменьшается и заново вычисляются «соседние» от базовой значения эффективности. Если шаг  $h_i$  оказывается меньше  $\varepsilon$ , то данный этап алгоритма завершается, а  $x^*$  признается минимумом функции  $\delta(x)$  по  $i$ -той компоненте.

3) Повторяем шаги 1-2 для всех компонент вектора  $x^*$ . В результате получается новый вектор  $x^{*+1}$ .

Фаза 2. Поиск по образцу:

1) Откладывается точка  $x^{(*)}$  в направлении от  $x^*$  к  $x^{*+1}$ :  $x^{(*)} = 2x^{*+1} - x^*$

2) Для этой точки выполняется исследующий поиск.

3) Если в результате исследующего поиска для вектора  $x^{(*)}$  удастся найти вектор  $x^{(*+1)}$  отличный от вектора  $x^{(*)}$ , то делаются следующие переобозначения:  $x^{*+1}=x^*$ ,  $x^{(*+1)} = x^{*+1}$  и поиск по образцу выполняется вновь. Если точка  $x^{(*+1)}$  не была найдена, то принимаем  $x^{*+1}$  за новый базовый вектор и выполняем для него исследующий поиск.

### **3.3.2 Результаты детерминированной оптимизации фотонно-кристаллических элементов**

#### **3.3.2.1 Результаты детерминированной оптимизации фотонно-кристаллических волноводов с изгибами**

Выберем следующие параметры для методов нулевого порядка: для покоординатного спуска точность  $\varepsilon=0,001$ , для метода Хука-Дживса точность  $\varepsilon=0,0005$ , шаг  $h=0,001$  (данные значения получены эмпирически в ходе проведенных вычислительных экспериментов: для метода Хука-Дживса выбрана меньшая точность, так как точность, совпадающая с шагом, приводит к преждевременному схождению алгоритма). В качестве начального приближения для этих методов возьмем 5 различных векторов, компоненты которых – случайно равномерно распределенные числа из допустимого диапазона изменения параметров.

Еще раз отметим, что с помощью генетической оптимизации была получена эффективность более 99% для обоих типов рассматриваемых изгибов в случае стандартного генетического алгоритма [117]. Приведем сравнение этого результата с расчетами, полученными методами оптимизации нулевого порядка (таблицы 3.6-3.7) [125].

Таблица 3.6 – Сравнение методов оптимизации для изгиба фотонно-кристаллического волновода на 120°

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	>99		230	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	73	28	89	8
случайная точка 2	91	31	59	5
случайная точка 3	91	47	91	12
случайная точка 4	71	25	60	12
случайная точка 5	91	31	91	6

Таблица 3.7 – Сравнение методов оптимизации для изгиба фотонно-кристаллического волновода на 60°

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	>99		280	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	71	27	66	14
случайная точка 2	79	24	99	6
случайная точка 3	89	71	48	6
случайная точка 4	60	20	91	14
случайная точка 5	73	27	77	11

Несмотря на ограниченное количество экспериментов, можно видеть, что полученная эффективность сопоставима с результатами генетической оптимизации для изгиба  $120^\circ$ , но для изгиба на  $60^\circ$  уже заметна зависимость от начального приближения и метода оптимизации. Для изгиба  $120^\circ$  лучшая эффективность, полученная как методом покоординатного спуска, так и методом Хука-Дживса, составляет 91%, что меньше результата, полученного генетическим алгоритмом на 8%. Однако детерминированным методам оптимизации требуется меньшее число обращений к решению прямой задачи дифракции, чем генетическому алгоритму: вычислительная сложность алгоритмов покоординатного спуска и Хука-Дживса в лучшем случае, примененных к расчету изгибов волновода, в 6 раз и 20 раз меньше соответственно.

Лучшая эффективность для изгиба на  $60^\circ$ , полученная методом покоординатного спуска, равна 89%, что на 10% меньше эффективности полученной генетической оптимизации, а лучший результат, полученный методом Хука-Дживса, совпадает с результатом генетического алгоритма. При этом вычислительная сложность методов покоординатного спуска и Хука-Дживса ниже по сравнению с генетическим алгоритмом в 3 и 40 раз соответственно.

Отметим, что несмотря на детерминированный характер методов нулевого порядка, в настоящем исследовании присутствует элемент стохастичности, заключающийся в выборе начального приближения. Но даже в случае худшей полученной в данных экспериментах вычислительной сложности (71), генетическая оптимизация оказывается медленнее в 4 раза.

Приведем лучшие полученные результаты (таблица 3.8, рисунок 3.20): для изгиба на  $120^\circ$  это одна из топологий, обеспечивающая эффективность в 91%, полученная методом Хука-Дживса, что на 25% эффективности изначальной топологии. Для изгиба  $60^\circ$  это топология, обеспечивающая передачу сигнала практически без потерь, полученная так же методом Хука-

Дживса, что на 25% больше, чем эффективность без оптимизации.

Таблица 3.8 – Лучшие результаты оптимизации методами нулевого порядка

изгиб	начальное приближение $x = \{r_1, r_2, r_3\}$ , нм	оптимизированные значения $x = \{r_1, r_2, r_3\}$ , нм	эффективность при начальном приближении, %	эффективность после оптимизации, %
120°	{92, 132.5, 117}	{91.7, 132.5, 127}	46	91
60°	{71, 92, 100.6}	{61, 62, 100.6}	54	99

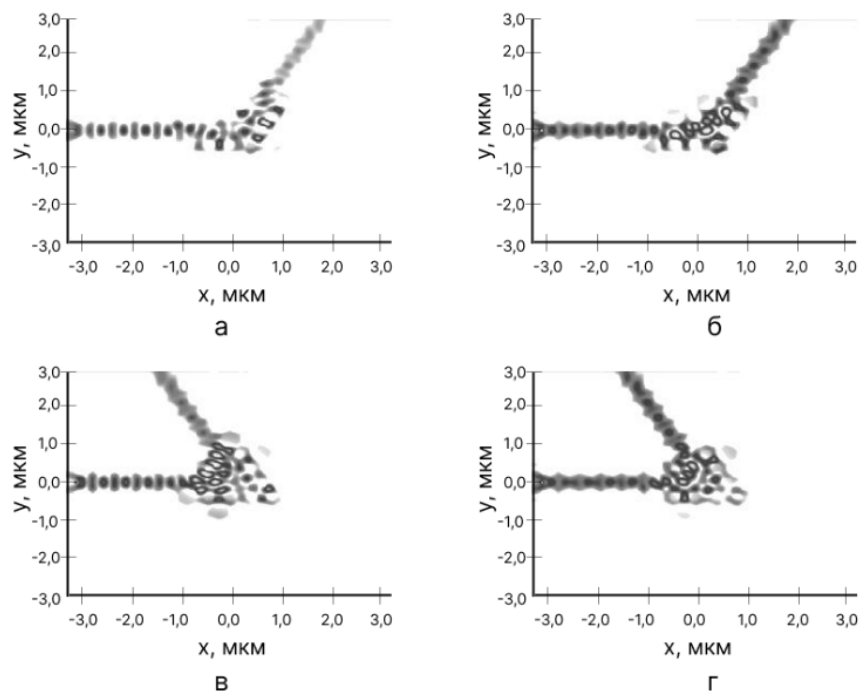


Рисунок 3.20 – Распределение модуля магнитного поля: (а-б) изгиб 120° до и после оптимизации соответственно, (в-г) изгиб 60° до и после оптимизации соответственно

Проведем теперь серию вычислительных экспериментов, учитывая особенности технологии изготовления и применяя описанные выше ограничения. Полученная с помощью детерминированных и стохастического подходов эффективность и вычислительная сложность алгоритмов приведены в таблицах 3.9-3.10.

Таблица 3.9 – Сравнение методов оптимизации для изгиба фотонно-кристаллического волновода на 120°

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	>99		430	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	63	23	38	46
случайная точка 2	51	41	30	63
случайная точка 3	65	22	30	56
случайная точка 4	20	38	98	16
случайная точка 5	52	22	30	55

Таблица 3.10 - Сравнение методов оптимизации для изгиба фотонно-кристаллического волновода на 60°

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	>99		410	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	92	39	98	26
случайная точка 2	43	22	46	54
случайная точка 3	20	21	36	50
случайная точка 4	87	21	60	52
случайная точка 5	49	22	64	50

Из таблиц видно, что для технологического диапазона (описанного в пункте 3.2.2) методы оптимизации нулевого порядка для расчета волноводных изгибов работают хуже по критерию эффективности. Хотя и можно получить результат сравнимый с результатом генетической оптимизацией, но он будет сильно зависеть от начального приближения.

### 3.3.3.2 Результаты детерминированной оптимизации для узла пересечения волноводов

Для узла пересечения трех фотонно-кристаллических волноводов [118] (описанных в пункте 3.1.2) генетической оптимизацией получена эффективность более 99%. Данное значение было получено с учетом предположения об исключении из рассмотрения центральной каверны  $r_0$  (рисунок 3.1в), поэтому и сейчас эта каверна не будет рассматриваться как параметр оптимизации, то есть вектор для оптимизации имеет вид:  $\{r_1, d\}$ . Приведем сравнение ранее полученного генетическим алгоритмом результата с результатами расчета, полученными методами оптимизации нулевого порядка (таблица 3.11) [125].

Таблица 3.11 – Сравнение методов оптимизации для пересечения волноводов

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	>99		600	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	99	40	10	21
случайная точка 2	99	36	50	47
случайная точка 3	99	20	65	24
случайная точка 4	99	17	40	37
случайная точка 5	91	39	9	16

Из таблицы можем видеть, что эффективность, полученная методом покоординатного спуска, совпадает с эффективностью работы пересечения после генетической оптимизации, при этом вычислительная сложность данного метода нулевого порядка применительно к узлу пересечения ниже в 20 раз. Оптимизируя такой элемент методом Хука-Дживса, получили значение эффективности заметно меньшее по сравнению с генетической оптимизации. Кроме того, для некоторых начальных приближений полученная эффективность ниже, чем эффективность пересечения без оптимизации (68%).

### **3.3.3.3 Результаты детерминированной оптимизации для узла ввода излучения**

Обратимся к узлу ввода излучения [118], описанному в пункте 3.1.3 настоящей работы. Для него с помощью генетического алгоритма получена эффективность 89%. Рассмотрим вектор параметров оптимизации  $x = \{n_1, n_2, h_1, h_2\}$ : в нем первые два параметра отвечают за количество каверн в рядах, образующих узел (рисунок 3.4), и могут принимать только целые значения ( $n_1 \in [1,10], n_2 \in [1,5]$  [93]). Однако рассматриваемые методы оптимизации нулевого порядка работают с непрерывными величинами. Поэтому выберем  $n_1$  и  $n_2$ : проварьируем по отдельности  $h_1, h_2$  для каждого значения  $n_1, n_2$  и рассчитаем эффективность, затем найдем, при каких  $n_1$  и  $n_2$  наблюдается наибольшее ее значение. С помощью данного способа находим, что  $n_1 = 8, n_2 = 4$ . Зафиксируем эти значения при дальнейшем расчете эффективности, а вектор параметров оптимизации примет вид:  $x = \{h_1, h_2\}$ . Приведем сравнение ранее полученного генетическим алгоритмом результата с расчетами, полученными методами оптимизации нулевого порядка (таблица 3.12) [125].

Таблица 3.12 – Сравнение методов оптимизации для узла ввода излучения

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	89		830	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	81	9	91	8
случайная точка 2	80	8	92	13
случайная точка 3	80	8	91	13
случайная точка 4	80	7	91	19
случайная точка 5	80	7	91	12

Из таблицы видно, что с помощью метода Хука-Дживса в лучшем случае удалось получить эффективность на 3% выше, чем генетическим алгоритмом, при этом его вычислительная сложность в 64 раза ниже. Узел ввода излучения, рассчитанный по координатным спуском, характеризуется средней эффективностью 80%, что ниже на 9% по сравнению с генетической оптимизацией. Приведем параметры лучшего результата, полученную топологию и дифракционные картины. При начальном приближении  $h_1 = 5,8$  нм,  $h_2 = 4,2$  нм эффективность составляла 0,4, после оптимизации методом Хука-Дживса  $h_1 = 6,8$  нм,  $h_2 = 9,2$  нм, а эффективность равна 0,92, что в 2,3 раза больше. Распределение модуля магнитного поля и полученная топология представлены на рисунке 3.21.

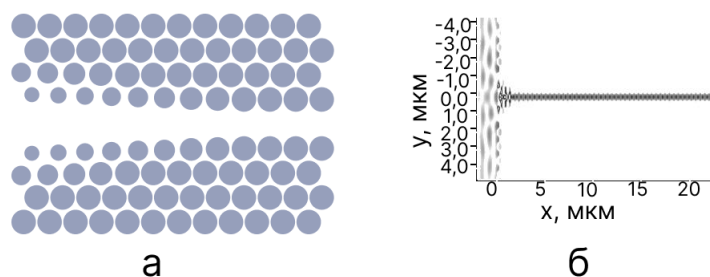


Рисунок 3.21 – Результаты второго эксперимента по оптимизации узла ввода: (а) – топология, (б) – дифракционная картина

### 3.3.3 Обсуждение результатов оптимизации

Возвращаясь к предположению, выдвинутому в начале этой главы, отметим, что оно частично подтвердилось, но нуждается в уточнении, а именно: методы оптимизации нулевого порядка подходят для расчета элементов, в которых излучение распространяется по прямому волноводу и для которых вектор параметров оптимизации имеет размерность равную двум (узел пересечения и узел ввода излучения), для расчета элементов, где излучение отклоняется от прямолинейного направления (изгибы) необходимо использование генетического алгоритма. В подтверждении сказанного обратим внимание на такие элементы как узел пересечения и узел ввода излучения. Для них эффективности, рассчитанные детерминированными и стохастическим методом, совпадают для любого начального приближения. При этом для узла пересечения лучше работает метод покоординатного спуска, а для узла ввода – метод Хука-Дживса. Также стоит отметить, что для данных элементов вектор оптимизационных параметров содержал только две компоненты. Для изгибов фотонно-кристаллических волноводов вектор параметров оптимизации содержал три компоненты и до наложения ограничений эффективность, рассчитанная методами оптимизации нулевого порядка, оказалась в среднем ниже на 10% по сравнению с расчетами по генетическому алгоритму, а также наблюдалась сильная зависимость от начального приближения. При наложении

ограничений, связанных с технологическими особенностями изготовления элемента, эффективность, полученная детерминированными методами, падает на 30%.

Кроме того, обратим внимание на такой критерий сравнения подходов к оптимизации фотонно-кристаллических оптических элементов как вычислительная сложность методов. Признаем, что для некоторых исследователей он может оказаться важнее обсуждаемой ранее эффективности. В настоящем исследовании вычислительные эксперименты выполнялись на двух системах: ноутбуке (процессор Intel(R) Core(TM) i5-8250U CPU @ 1.60GHz 1.80 GHz, оперативной память 16 Гб) и сервере (два процессора Intel Xeon Silver 4214R 2m4 ГГц , оперативная память 2 Тб). Приведем абсолютные времена (в минутах) работы алгоритмов на этих системах (таблица 3.13) [125].

Таблица 3.13 - Абсолютное время работы алгоритмов

элемент	время работы генетического алгоритма, мин		среднее время работы по координатного спуска, мин		среднее время работы метода Хука-Дживса, мин	
	ноутбук	сервер	ноутбук	сервер	ноутбук	сервер
изгиб 120°	143	57	10	4	16	6
изгиб 60°	410	109	25	7	46	12
пересечение	250	100	13	5	12	7
узел ввода	691	208	7	2	11	3

Из таблицы 3.13 видно, что в случае ограничения на мощность вычислительной системы (либо на время доступа к такой системе) методы оптимизации нулевого порядка предпочтительнее.

### 3.3.4 Метод частичного перебора для оптимизации изгиба волновода на 120°

Наряду с изложенными методами в настоящей работе предлагается еще один [125], заключающийся в ограничении области перебора возможных значений параметров оптимизации, связанным с учетом численного метода решения прямой задачи. В известных работах такой прием не обнаружен. Предполагается, что данный метод, примененный к расчету изгибов волноводов с изменением радиусов каверн в технологическом диапазоне, будет работать быстрее, чем генетический алгоритм (из пункта 1.2.1), но при этом давать всегда высокое значение эффективности в отличие от методов покоординатного спуска с одномерной оптимизацией методом Брента (алгоритм 3.1) и Хука-Дживса (алгоритм 3.2).

Разобьем интервал изменения радиуса каверн  $D=[R_0, a/2]$  с некоторым шагом  $h_r$ . Для фиксированной сетки будем изменять радиусы каверн с небольшим шагом и считать относительное отклонение  $\Delta$  выходной интенсивности к выходной интенсивности для изначального элемента (референтной):  $\Delta = \frac{I_{out}}{I_{ref}} \times 100\%$ . Для определенности будем считать, что изменение радиуса не влияет на численное решение, если  $\Delta < 2\%$ . Тогда изменение радиуса, при котором решение меняется на 2%, и будет шагом дискретизации  $h_r$ . Стоит отметить, что  $h_r$  может быть разным для разных каверн, которые выбраны в качестве параметров оптимизации элемента. Если удастся найти такой шаг дискретизации для каждой оптимизируемой каверны в элементе и разбить исходную непрерывную область, то для оптимизации элемента можно будет применить метод частичного перебора.

Для проведения такой оптимизации воспользуемся методом покоординатного спуска (описанным в пункте 3.3.1.1 настоящей работы), в котором в качестве одномерной оптимизации переберем все значения радиуса из получившегося после дискретизации интервала. Тогда в одной итерации алгоритма будет произведено количество обращений к функции

расчета эффективности равно суммарному количеству всех значений радиусов. Приведем сам алгоритм.

*Алгоритм 3.3: Алгоритм метода частичного перебора*

- 1) Выбирается начальное приближение  $x^*$  и точность  $\varepsilon$ .
- 2) Для  $i$  компоненты вектора  $x^*$  при фиксированных остальных выполняется одномерная оптимизация:

2.1) Для вектора  $x^* = \{x_1^*, \dots, x_{i-1}^*, x_{ij}, x_{i+1}^*, \dots, x_n^*\}$ , где  $x_{ij} = R_0 + jh_{ri}, j = \overline{1, J}, J = \frac{a}{2h_{ri}}$  находим эффективность  $\delta_j$ .

2.2) Выбираем компоненту  $x_{ij}$ , для которой эффективность была максимальной и запоминаем ее:  $y = \underset{j=\overline{1, J}}{\operatorname{argmax}} \delta_j$ .

- 3) Полученная в результате одномерной оптимизации компонента, заменяет исходную в векторе  $x^*$ :  $x_i^{*+1} = \{x_1^{*+1}, \dots, x_{i-1}^{*+1}, y, x_{i+1}^*, \dots, x_n^*\}$ .

- 3) Повторяем пункт 2 для всех компонент вектора  $x^*$  и получаем новый вектор  $x^{*+1}$

- 4) Если  $|x^{*+1} - x^*| < \varepsilon$ , то точка  $x^{*+1}$  – точка максимума, если нет, то принимаем  $x^{*+1}$  за новое начальное приближение  $x^*$  и переходим к пункту 2.

Рассмотрим изгиб фотонно-кристаллического волновода на  $120^\circ$  (рисунок 3.1а). Найдём шаги дискретизации  $h_r$  для каждого из радиусов. Зависимость отклонения  $\delta$  от радиуса показана на рисунке 3.22. Черной точкой на рисунке отмечен референтный радиус, который соответствует радиусу каверн в исходном кристалле ( $r=183,9$  нм).

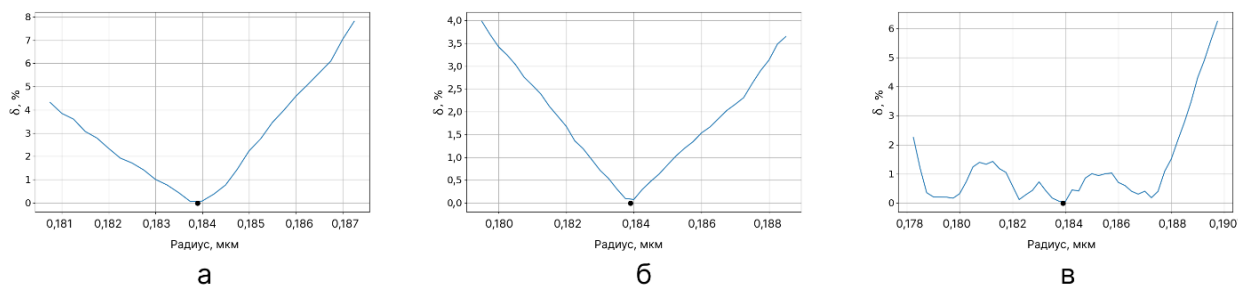


Рисунок 3.22 – Зависимость отклонения  $\delta$  от радиуса:

(а) для  $r_1$ , (б) для  $r_2$ , (в) для  $r_3$

Из полученных графиков можно найти шаг  $h_r$ , для которого  $\delta$  изменяется в среднем на 2%: для  $r_1$   $h_{r1} = 1$  нм, для  $r_2$   $h_{r2} = 2$  нм, для  $r_3$   $h_{r3} = 4$  нм. Проведем дискретизацию области для радиусов каверн ( $r \in [140,4 \ 229,5]$  нм) с данными шагами и применим алгоритм частичного перебора 3.3. После дискретизации количество значений в области поиска составляет 90 45 и 23 значения для  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_3$  соответственно. Тогда за одну итерацию алгоритма совершается 158 обращений к функции расчета эффективности.

В качестве начального приближения для алгоритма возьмем значения радиусов исходного кристалла, а также пять случайно равномерно распределенных точек. Результаты работы алгоритма представлены в таблице 3.14.

Таблица 3.14 – Результаты оптимизации с помощью частичного перебора

начальное приближение	эффективность, %	вычислительная сложность
изначальный кристалл	99,9	316
случайная точка 1	98,3	474
случайная точка 2	98,3	316
случайная точка 3	99,2	158
случайная точка 4	99,7	158
случайная точка 5	99,7	316

Из таблицы можно видеть, что эффективность, полученная в результате частичного перебора, совпадает с эффективностью, полученной генетической оптимизацией (таблица 3.9), но при этом вычислительная сложность предложенного метода для расчета элемента почти в 2 раза ниже, чем сложность генетического алгоритма. По сравнению с методами оптимизации нулевого порядка частичный перебор работает существенно медленнее, но даже при небольшом количестве экспериментов со случайным начальным приближением этот метод дает стабильный результат: топология, полученная в процессе оптимизации, обеспечивает прохождение сигнала через изгиб практически без потерь.

### **Выводы по главе 3**

- 1) Исследование адекватности модели (1.12) оценки числа особей в популяции применительно к фотонно-кристаллическим элементам волноводного типа показало, что размер популяции, полученный в результате вычислительных экспериментов, вполне соответствует предсказаниям упомянутой модели.
- 2) Показана необходимость модификации простого генетического алгоритма для оптимизации фотонно-кристаллических устройств: при применении простого генетического алгоритма получаемые радиусы каверн не пригодны для изготовления.
- 3) Разработана модификация генетического алгоритма с учетом особенностей численного метода решения прямой задачи дифракции и с учетом технологических особенностей изготовления фотонно-кристаллических элементов. При применении модифицированной процедуры генетической оптимизации к рассмотренным в работе элементам получены структуры обеспечивающие следующие значения эффективности: более 99% для изгибов волноводов на  $60^\circ$  и  $120^\circ$ , что соответственно в 33 и 6 раз больше эффективности до оптимизации; более 99% для узла пересечения, что в 1,5 раза больше эффективности

до оптимизации; 89 % для узла ввода излучения, что в 2,3 раза больше эффективности до оптимизации.

- 4) Применение алгоритма с адаптацией сеточной области к фотонно-кристаллическим элементам волноводного типа не дали существенных улучшений при оптимизации.
- 5) Сравнительный анализ генетической оптимизации с методами оптимизации нулевого порядка показал, что по критерию получаемого значения эффективности элемента методы оптимизации нулевого порядка подходят для расчета элементов, в которых излучение распространяется по прямому волноводу и для которых вектор параметров оптимизации имеет размерность равную двум (узел пересечения и узел ввода излучения), а для расчета элементов, где излучение отклоняется от прямолинейного направления (изгибы) необходимо использование генетического алгоритма.
- 6) К известным методам ограничения возможных решений обратной задачи добавился новый связанный с учетом численного метода решения прямой задачи. Так в случае изгиба фотонно-кристаллического волновода на  $120^\circ$  полученная предложенным методом топология характеризуется передачей излучения практически без потерь, при этом вычислительная сложность метода в 2 раза меньше, чем у генетического алгоритма.

## 4 Расчёт фотонно-кристаллических логических элементов

В данной главе будут рассматриваться фотонно-кристаллические элементы «НЕ». В отличие от элементов «волноводного» типа, рассчитанных в предыдущей главе, в логических элементах излучение изменяется в соответствии с назначением элемента, а не просто передается на выходной порт.

### 4.1 Модели фотонно-кристаллические элементы

#### 4.1.1 Модель логического элемента «НЕ» на кристалле с Y-образным дефектом

На основе описанного ранее в главе 3 фотонного кристалла с дефектом предлагается синтезировать логический элемент «НЕ», представляющий собой Y-образный дефект (пересечение трех фрагментов волноводов под углом  $120^\circ$  на кристалле размерами  $15a \times 15a$ , рисунок 4.1а) [124]. Данная структура характеризуется технологичностью, эффективностью и быстродействием, в силу чего может считаться перспективной. Кроме того, из-за отсутствия проблемы неопределенности фазы из такого элемента можно синтезировать более сложные посредством многократного каскадирования элемента [129].

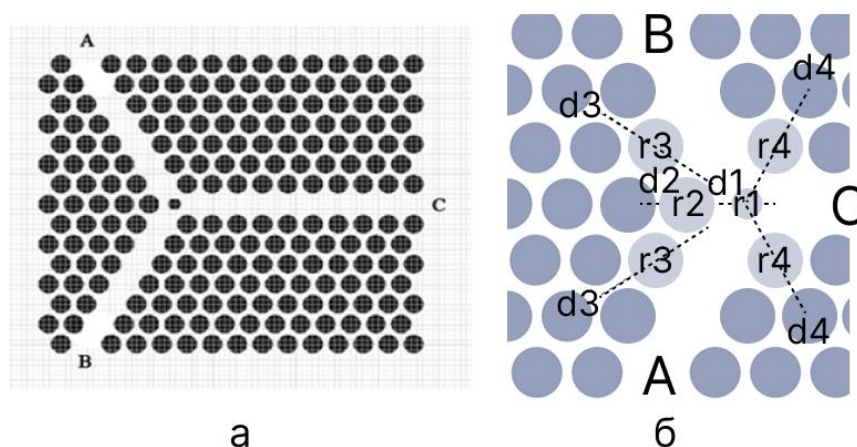


Рисунок 4.1 – Y-образный элемент «НЕ»: (а) сам элемент, (б) набор параметров оптимизации

Оптимизация данного элемента состоит в увеличении эффективности для сигнала логической единицы, формируемой на выходе элемента С при отсутствии информационного сигнала на входе В и наличии только референтного А. Источниками излучения для обоих входов служат магнитные диполи (описанные в пункте 2.2.4 настоящей работы). Эффективность элемента без оптимизации составляет 17%. Набор параметров оптимизации (пункт 1.2.1 настоящей работы) для этого элемента имеет вид:  $x = \{r_1, r_2, r_3, r_4, d_1, d_2, d_3, d_4\}$  где  $r_i$  – радиусы каверн, а  $d_i$  – их смещение относительно начального положения вдоль штриховых линий (рисунок 4.1б).

#### **4.1.2 Модель логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией**

Немалый интерес представляют фотонно-кристаллические элементы, которые работают благодаря эффекту самоколлимации [130]. Самоколлимированный пучок можно передавать по прямой линии в фотонном кристалле без дифракции, подобно тому, как это происходит в фотонно-кристаллическом волноводе, но при этом поддерживать прямолинейное распространение света удастся при неизменной структуре фотонного кристалла. Известны работы, в которых авторы синтезировали такие логические элементы как «И-НЕ», «ИЛИ-НЕ», «Исключающее ИЛИ» на кристаллах с самоколлимацией [131, 132].

Рассмотрим фотонно-кристаллическую структуру, предложенную в [131] и с помощью генетического алгоритма на ее основе синтезируем логический элемент «НЕ». Фотонный кристалл в [131] (рисунок 4.2), характеризуется квадратной решеткой с периодом  $a=397,7$  нм и воздушными кавернами радиусом  $r=118,9$  нм в подложке из кремния. Для получения логического элемента «НЕ» рассмотрим центральный квадрат  $4a \times 4a$  и будем формировать «зеркало», которое повернет референтный сигнал (в качестве падающей волны выступает гауссов импульс (пункт 2.1.4 настоящей работы)

с рабочей длиной волны 1,55 мкм), подаваемый на торец А, на 90°. Тогда на выходе В получим сигнал для логической единицы. Если кроме референтного сигнала подать информационный на торец С, то на выходе В будем наблюдать логический ноль. Целью оптимизации данного элемента является получение такой топологии «зеркала», которая обеспечивает максимально возможную эффективность для сигнала логической единицы.

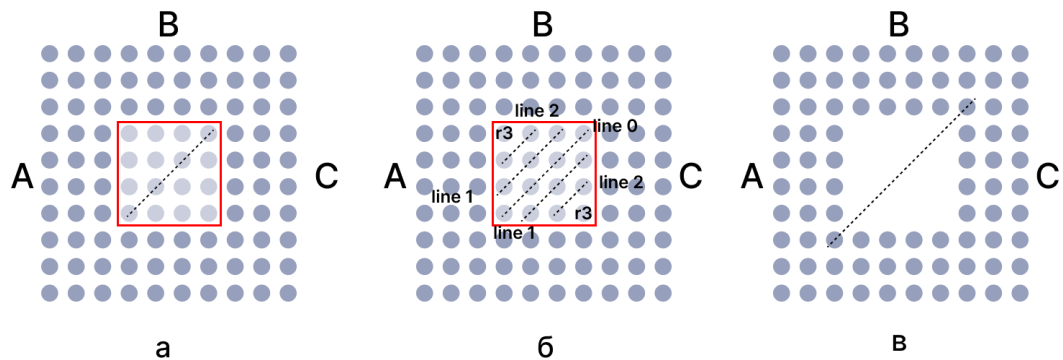


Рисунок 4.2 - Правила синтеза логического элемента «НЕ» на самоколлимирующем кристалле на первом (а), втором (б) и третьем (в) этапах вычислительного эксперимента

При проведении вычислительных экспериментов «зеркало» формировалось тремя различными способами.

- 1) В первом вычислительном эксперименте будем формировать «зеркало» из одной диагонали квадрата (рисунок 4.2а). Тогда в качестве параметров оптимизации будут выступать радиус каверн в линии, расстояние между кавернами в линии и наклон линии:  $x = \{r, d, \alpha\}$ .
- 2) Во втором вычислительном эксперименте разобьём квадрат на линии, как показано на рисунке 4.2б. Тогда получаем 5 линий (где линия 0 соответствует диагонали квадрата, а линии 1 и 2 лежат над и под этой диагональю) и две отдельно стоящие каверны. Предполагая, что «зеркало» должно быть симметричным, будем рассматривать только центральную линию и часть квадрата выше нее, устанавливая такие же параметры для оставшейся нижней части квадрата. Для каждой линии выберем три параметра оптимизации: радиус каверн в линии  $r$ ,

расстояние между кавернами  $d$ , наклон линии  $\alpha$ . Тогда вектор для оптимизации имеет вид:  $x = \{r_0, d_0, \alpha_0, r_1, d_1, \alpha_1, r_2, d_2, \alpha_2, r_3\}$ .

- 3) В третьем эксперименте «вырежем» из центра кристалла квадрат со стороной  $4a$  (рисунок 4.2в). Случайным образом кинем в него 8 каверн случайного радиуса (из допустимого диапазона (описанного в пункте 3.2.2)). Еще 8 каверн внутри квадрата образуется в результате отражения случайно сгенерированных относительно диагонали квадрата. Каждая каверна имеет 3 случайных параметра: радиус и координаты  $x$  и  $y$ . Итого в генетическом алгоритме будет оптимизироваться 24 параметра:  $x = \{(r_k, x_k, y_k): k = \overline{1,8}, i = \overline{1,N}\}$ .

Представленный план проводимых экспериментов подразумевает усложнение на каждом этапе структуры «зеркала» и увеличение количества оптимизируемых параметров. Ожидается, что данное усложнение будет приводить к улучшению эффективности элемента, но, увы, к снижению скорости работы алгоритма.

## **4.2 Применение генетической оптимизации к расчету фотонно-кристаллических элементов**

Рассчитаем описанные выше элементы с помощью генетического алгоритма (пункт 1.2.1). Параметры алгоритма возьмем из главы 3: количество особей в поколении  $N=10$ , вероятность мутации  $p_m=0,05$ , вероятность скрещивания  $p_c=0,95$ .

### **4.2.1 Результаты генетической оптимизации фотонно-кристаллического Y-образного логического элемента «НЕ»**

Для данного элемента проведем два вычислительных эксперимента [124]. Как упоминалось ранее выбор не правильного размера сеточной области приводит к неустойчивости решения, так как достаточно грубая сетка плохо описывает реальный элемент. В первом эксперименте сознательно выберем сеточную область с малым количеством узлов:  $180 \times 180$ .

При этом также не будем ставить ограничения на радиус каверн: он может изменяться в диапазоне от 0 до  $a/2$ . Тогда в результате работы алгоритма получаем значения параметров оптимизации, представленных в таблице 4.1. Отметим, что в данном эксперименте время работы алгоритма составило примерно 12 часов (вычисления проводились на сервере с двумя процессорами Intel Xeon Silver 4214R 2m4 ГГц, оперативной памятью 2 Тб). Полученная топология и дифракционная картина (распределение модуля магнитного поля) для сигнала логической 1 представлены на рисунке 4.3.

Таблица 4.1 - Параметры после оптимизации в первом эксперименте

эффективность на выходе элемента		оптимальные параметры радиусов и смещений, мкм							
лог. 1	лог. 0	$r_1$	$r_2$	$r_3$	$r_4$	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$
>0.99	0	0,14	0,17	0,05	0,12	-0,10	0,04	0,06	0,04

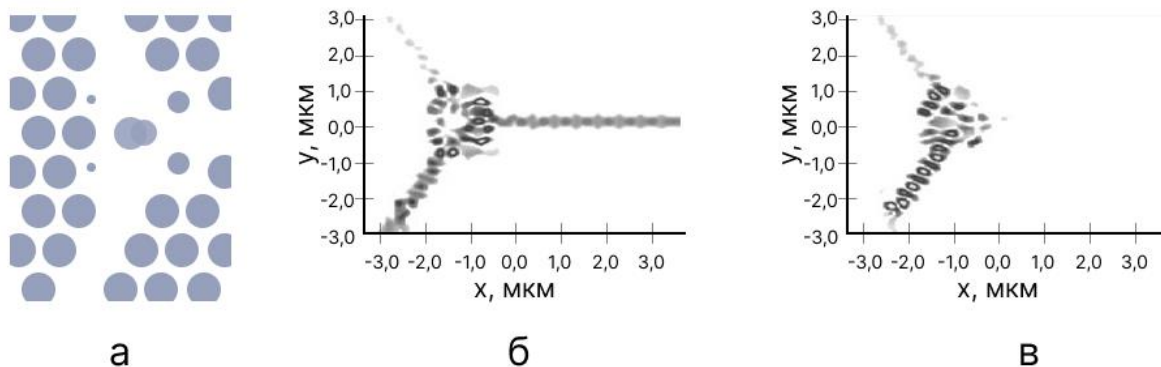


Рисунок 4.3 - Результаты первого эксперимента: (а) модель элемента после оптимизации; (б) дифракционная картина при сетке 180x180; (в) дифракционная картина при сетке 190x190

Значение эффективности оказалось равным 1 для логической 1 (рисунок 4.3б), что свидетельствует о сходимости генетического алгоритма при выбранных ранее значениях параметров (количестве особей, вероятности скрещивания и мутации). Для верификации результата проведем моделирование на более мелкой сеточной области, например размерами

190x190 узлов. В результате такого моделирования значение эффективности оказалось равным 0,19 (рисунок 4.3в). Снижение эффективности в 5 раз настораживает и не свидетельствует о сходимости разностного решения (не путать со сходимостью алгоритма). В качестве объяснения заметим, что самые малые каверны (рисунок 4.3а) имеют радиус после оптимизации 0,05 мкм, а шаг сетки составляет 0,04 мкм, то есть на каверну приходится чуть больше одного узла сетки, что плохо описывает реальный элемент. С измельчением сетки увеличивается количество узлов, приходящихся на каверну и решение начинает значимо меняться. К тому же, как говорилось ранее, элемент с данными размерами каверн не удастся изготовить по технологическим причинам [54]. Поэтому для задачи оптимизации оптических логических элементов следует использовать генетический алгоритм с модификациями, описанными в пункте 3.2.2 предыдущей главы.

Для второго эксперимента будем использовать сеточную область размерами 290x290 узлов и ограничим радиус каверн снизу значением  $R_0=140,4$  нм (как в предыдущей главе). В результате работы алгоритма получены значения параметров, представленные в таблице 4.2 и на рисунке 4.4.

Таблица 4.2 - Параметры после оптимизации во втором эксперименте

эффективность на выходе элемента		оптимальные параметры радиусов и смещений, мкм							
лог. 1	лог. 0	$r_1$	$r_2$	$r_3$	$r_4$	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$
0,66	0,06	0,17	0,21	0,16	0,19	-0,15	0,03	-0,15	-0,08

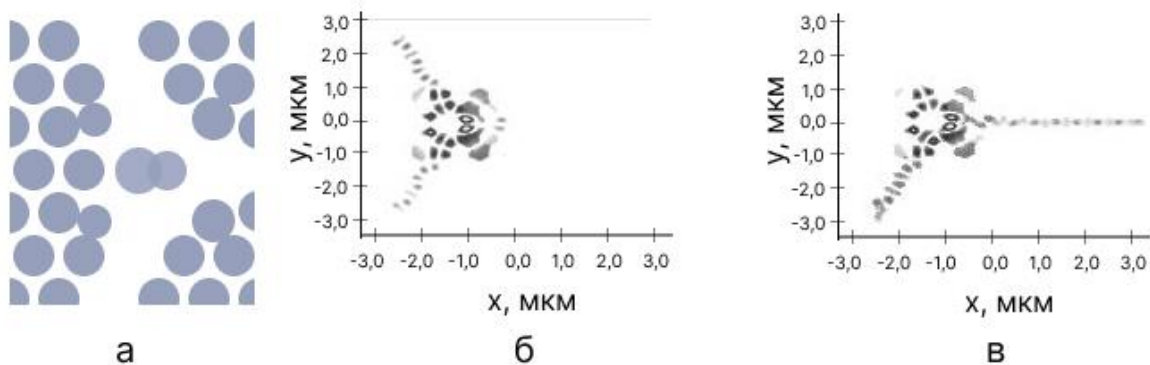


Рисунок 4.4 - Результаты второго эксперимента: (а) модель элемента после оптимизации; (б) дифракционная картина, соответствующая логическому 0 на выходе; (в) дифракционная картина, соответствующая логической 1 на выходе

При помощи генетической оптимизации удалось получить параметры, обеспечивающие эффективность равную 0,66, что больше по сравнению с неоптимизированным элементом «НЕ» (эффективность 0,17) в 4 раза.

Для проверки результата и подтверждения сходимости решения проведем несколько моделирований на измельчающихся сетках в диапазоне от 180x180 до 330x330 узлов. На графике (рисунок 4.5) представлена зависимость значения эффективности от количества узлов сетки.

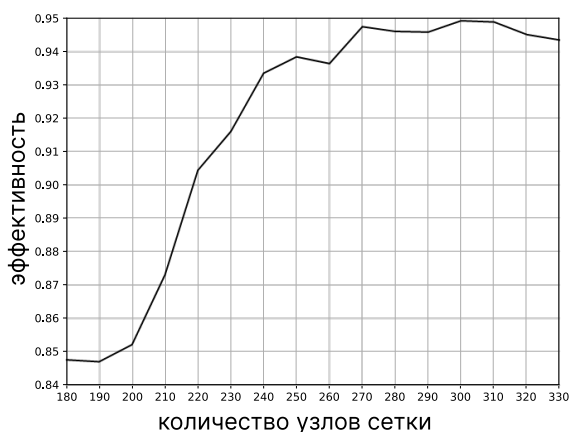


Рисунок 4.5 - Значение эффективности на измельчающихся сетках

Из графика видно, что при увеличении дискретизации значение эффективности перестает существенно меняться после значения 250, что свидетельствует о сходимости разностного решения.

Так же отметим, что алгоритм сошелся на 85 поколении (рисунок 4.6).

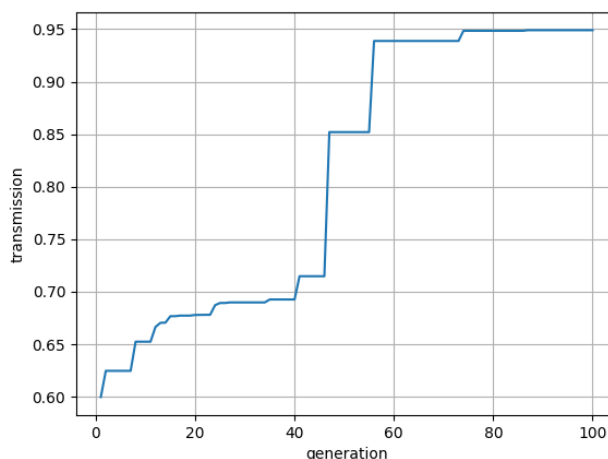


Рисунок 4.6 - Результаты работы алгоритма

Применение алгоритма согласования генетического алгоритма и FDTD метода к фотонно-кристаллическому элементу «HE» на кристалле с Y-образным дефектом не привело к улучшению результата, так как радиусы каверн в процессе оптимизации оставались достаточно большими и не требовали сгущения сеточной области.

#### **4.2.2 Результаты генетической оптимизации логического элемента «HE» на фотонном кристалле с самоколлимацией**

Моделирование данного элемента происходило на сеточной области размерами 290x290 узлов, при этом нижнее ограничение на радиус каверны  $R_0$  совпадало с радиусом каверн в исходном кристалле (118,9 нм) [125].

При первом вычислительном эксперименте в результате применения генетического алгоритма была получена эффективность для сигнала логической 1 в 47% при следующих значениях оптимизационных

параметров:  $r = 190 \text{ nm}$ ,  $d = 293 \text{ nm}$ ,  $\alpha = 39.1^\circ$ . Отметим, что рассчитанный результат в 1,7 раз выше эффективности структуры без оптимизации. Следуя работе [132], будем предполагать, что разделение сигналов происходит в соответствии с пороговой обработкой. Для сигнала логического нуля получаем сигнал, интенсивность которого, отнесенная к интенсивности падающего излучения, равна 18% (отметим, что целью оптимизации было повышение эффективности именно сигнала логической единицы). Рассчитанная топология «зеркала» и дифракционные картины представлены на рисунке 4.7.

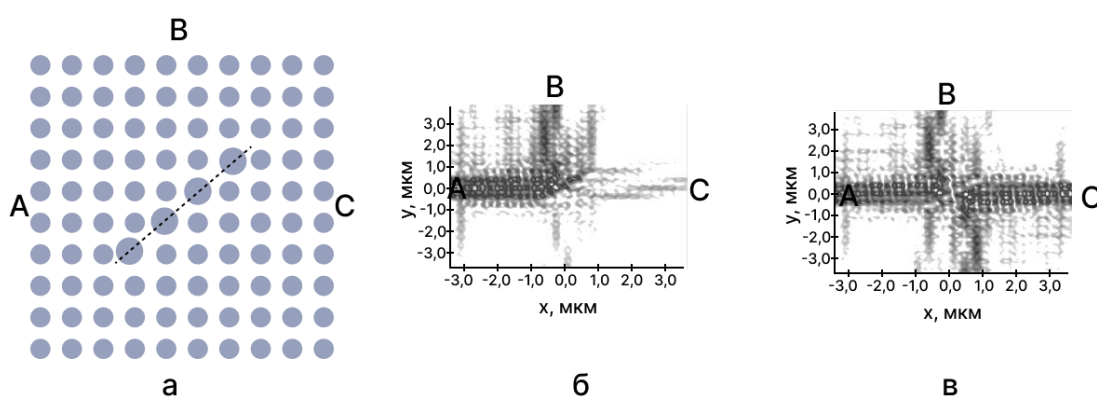


Рисунок 4.7 - Результаты первого вычислительного эксперимента: (а) топология элемента, (б) распределение квадрата модуля электрического поля для логической 1, (в) распределение квадрата модуля электрического поля для логического 0

В результате второго вычислительного эксперимента на выходе В формируется соответствующий логической 1 сигнал, эффективность для которого составляет 71% что в 3 раза выше, чем для структуры без оптимизации и в 1,26 раз выше результата предыдущего эксперимента. Для сигнала логического 0 интенсивность, отнесенная к интенсивности падающего излучения, равна 34%. Полученные в результате оптимизации параметры, топология элемента и дифракционные картины представлены в таблице 4.3 и на рисунке 4.8.

Таблица 4.3 - Значения полученных параметров во втором эксперименте

линия	радиус, мкм	расстояние, мкм	угол наклона, рад
линия 0	0,190	0,318	0,938
линия 1	0,186	0,334	0,642
линия 2	0,171	0,320	1,021
радиус 3	0,192	-	-

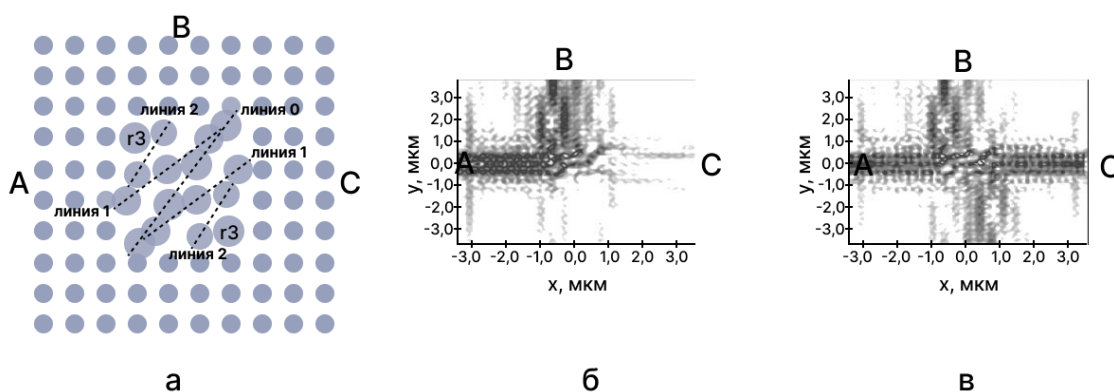


Рисунок 4.8 Результаты второго вычислительного эксперимента:  
 (а) топология элемента; (б) распределение квадрата модуля электрического поля для логической 1; (в) распределение квадрата модуля электрического поля для логического 0

Во втором вычислительном эксперименте генетический алгоритм сошелся на 84 поколении (рисунок 4.9).

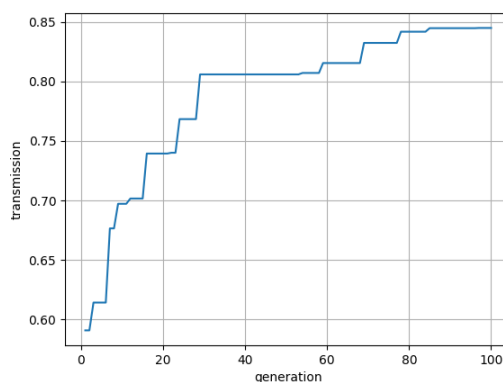


Рисунок 4.9 – Результат работы алгоритма во втором эксперименте

В третьем вычислительном эксперименте генетической оптимизацией получена топология элемента «НЕ», обеспечивающая эффективность для сигнала логической 1 в 70%, что с точностью до десятков совпадает с результатом второго эксперимента. Однако для сигнала логического 0 отношение выходной интенсивности к входной оказалось равно 23%, что ниже по сравнению с предыдущей структурой на 11%. Рассчитанная топология является самой удачной из трех полученных, так как обеспечивает высокую эффективность для сигнала логической 1 и имеет практически двукратную разницу между логическим 0 и 1, что облегчает пороговую обработку. Полученные параметры, топология элемента и дифракционные картины представлены в таблице 4.4 и на рисунке 4.10.

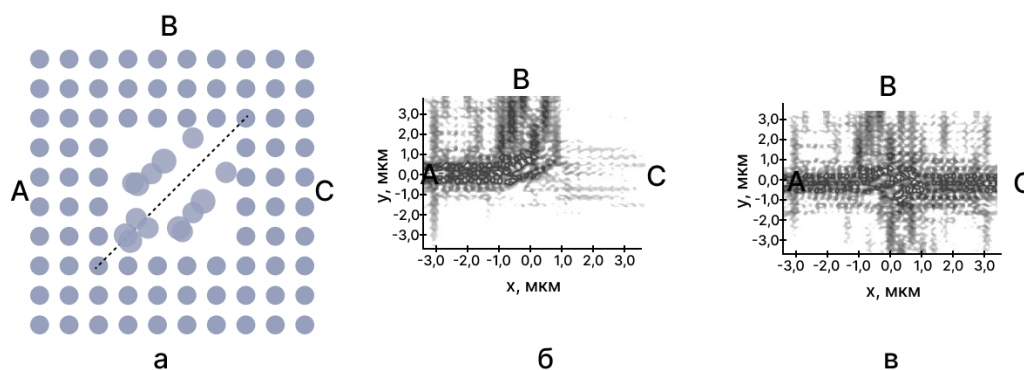


Рисунок 4.10 - Результаты третьего вычислительного эксперимента:  
 (а) топология элемента; (б) распределение квадрата модуля электрического поля для логической 1; (в) распределение квадрата модуля электрического поля для логического 0

Таблица 4.4 - Значения полученных параметров в третьем эксперименте

Номер каверны	радиус, мкм	координата X	координата Y
1	0,177	6,228	-0,425
2	0,148	7,141	0,906
3	0,130	6,708	0,557
4	0,134	6,510	-0,336
5	0,152	6,365	0,286
6	0,141	7,128	-0,112
7	0,132	6,310	0,294
8	0,163	6,744	0,585

Кроме того, отметим, что алгоритм сошелся на 30 поколении (рисунок 4.11), что быстрее предыдущего этапа эксперимента в 3 раза. Следовательно, можно сделать вывод, что ожидания относительно времени вычислений не совсем оправдались.

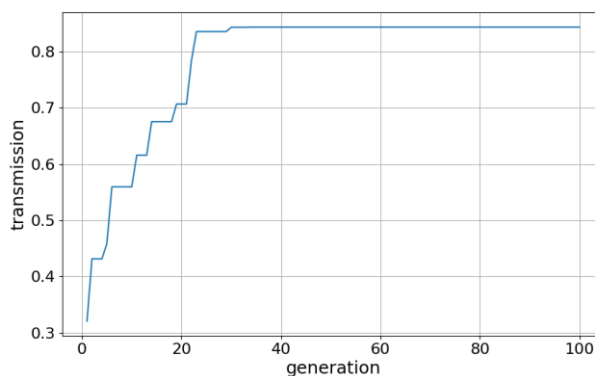


Рисунок 4.11 – Результат работы алгоритма в третьем эксперименте

Применим алгоритма адаптации сеточной области во втором эксперименте, так как он показал наилучший результат при применении простого генетического алгоритма. Результаты работы алгоритма представлены в таблице 4.5 и на рисунке 4.12.

Таблица 4.5 - Значения полученных параметров во втором эксперименте после применения алгоритма адаптации сеточной области

линия	радиус, мкм	расстояние, мкм	угол наклона, рад
линия 0	0,192	0,296	0,742
линия 1	0,145	0,307	1,044
линия 2	0,135	0,285	0,831
радиус 3	0,129	-	-

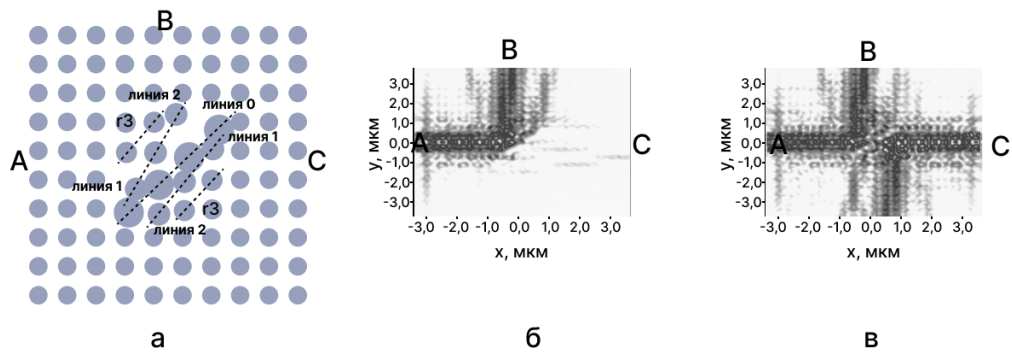


Рисунок 4.12 - Результаты второго вычислительного эксперимента с применением алгоритма адаптации сеточной области: (а) топология элемента; (б) распределение квадрата модуля электрического поля для логической 1; (в) распределение квадрата модуля электрического поля для логического 0

В результате оптимизации было получено значение эффективности для сигнала логической 1 в 81%, что на 10% больше, чем результат применения алгоритма без согласования методов. При этом, как можно видеть из таблицы 4.5 полученные радиусы значило меньше, чем радиусы в аналогичном эксперименте, но без адаптации сетки, но при этом входят в технологический диапазон. В процессе оптимизации сеточная область изменилась с 290x290 узлов на 330x330. Отметим, что алгоритм сошелся на 77 поколении (рисунок 4.13, что быстрее, чем при оптимизации без адаптации сеточной области (84 поколение).

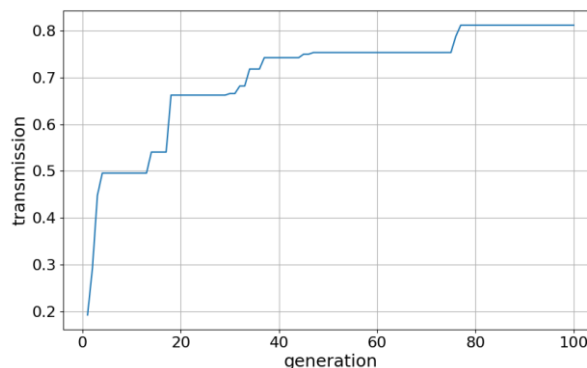


Рисунок 4.13 – Результат работы алгоритма

### 4.2.3 Исследование модели нахождения числа особей в популяции в случае расчета логических элементов

Обратимся к формуле (1.12) из пункта 1.2.4 настоящей работы. Из нее находим, что оптимальное число особей  $N$  в одной популяции составляет 11 для Y-образного логического элемента «НЕ» (при  $L=8$ ), и 10, 11, 12 для логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией в первом ( $L=3$ ), во втором ( $L=10$ ) и третьем ( $L=24$ ) экспериментах соответственно. Проверим адекватность модели (1.12) применительно к расчету фотонно-кристаллических логических элементов [123]. Результат проверки (номер поколения  $n$ , на котором сошелся алгоритм, эффективность  $\delta$  и вычислительная сложность  $\tau$  при различных размерах популяции) приведен в таблице 4.6 (при исследовании логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией ограничимся рассмотрением только второго правила синтеза этого элемента).

Таблица 4.6 – Результаты вычислительных экспериментов по оценке размера популяции

элемент	N=4	N=6	N=8	N=10	N=11	N=12	N=14
Y-образный логический элемент «НЕ»	$n=99$ $\tau=396$ ( $\delta=0,44$ )	$n=96$ $\tau=576$ ( $\delta=0,48$ )	$n=74$ $\tau=592$ ( $\delta=0,51$ )	$n=85$ $\tau=850$ ( $\delta=0,66$ )	$n=65$ $\tau=715$ ( $\delta=0,51$ )	$n=22$ $\tau=264$ ( $\delta=0,69$ )	$n=47$ $\tau=658$ ( $\delta=0,69$ )
элемент «НЕ» на кристалле с самоколлимацией	$n=94$ $\tau=376$ ( $\delta=0,64$ )	$n=80$ $\tau=480$ ( $\delta=0,66$ )	$n=59$ $\tau=472$ ( $\delta=0,89$ )	$n=84$ $\tau=840$ ( $\delta=0,71$ )	$n=60$ $\tau=660$ ( $\delta=0,69$ )	$n=68$ $\tau=816$ ( $\delta=0,72$ )	$n=76$ $\tau=1064$ ( $\delta=0,71$ )

Для логических элементов с большей длиной хромосомы, чем у рассмотренных ранее в главе 3 элементов «волноводного» типа, оценка (1.12) оказывается несостоятельной. Из результатов эксперимента следует, что оптимальные размеры популяции составляют 12 и 8 для Y-образного элемента «НЕ» и для элемента «НЕ» на самоколлимирующем фотонном кристалле соответственно, в то время как модель (1.12) дает предсказание в 11 особей в обоих случаях.

Отметим, что для расчета элементов этой главы, генетический алгоритм запускался с размером популяции  $N=10$ . При этом полученные значения эффективности являются достаточно высокими для практического применения.

### **4.3 Применение детерминированных методов оптимизации для расчета фотонно-кристаллических логических элементов**

Выберем такие же параметры для методов нулевого порядка, как и в главе 3: для покоординатного спуска (пункт 3.3.1.1) точность  $\varepsilon=0,001$ , для метода Хука-Дживса (пункт 3.3.1.2) точность  $\varepsilon=0,0005$ , шаг  $h=0,001$ . Начальное приближения для этих методов - пять различных векторов, компоненты которых случайно равномерно распределенные числа из допустимого диапазона изменения параметров. Будем сравнивать эффективности и вычислительную сложность генетического алгоритма (пункт 1.2.1) с алгоритмами покоординатного спуска 3.1 и Хука-Дживса 3.2.

#### **4.3.1 Результаты детерминированной оптимизации Y-образного логического элемента «НЕ»**

С помощью генетической оптимизации была получена эффективность 91% для Y-образного логического элемента «НЕ» (описанного в пункте 4.1.1) [124]. Приведем сравнение этого результата с расчетами, полученными методами оптимизации нулевого порядка (таблица 4.7) [125].

Таблица 4.7 - Сравнение методов оптимизации для Y-образного элемента «HE»

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	66		850	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	44	67	32	55
случайная точка 2	44	74	39	99
случайная точка 3	17	61	15	119
случайная точка 4	46	66	21	79
случайная точка 5	47	71	32	105

Из таблицы видно, что методам оптимизации нулевого порядка требуется в среднем в 10 раз меньше обращений к функции, решающей прямую задачу дифракции, чем генетическому алгоритму, однако эффективность, полученная генетической оптимизацией, значительно выше, чем при безградиентной.

#### 4.3.2 Результаты детерминированной оптимизации логического элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией

Для сравнения результатов расчета логического элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией (описанного в пункте 4.1.2), будем использовать второе правило синтеза этого элемента, так как в нем используется вектор параметров оптимизации меньшей размерности, чем в третьем правиле, а эффективность для сигнала логической 1 с точностью до целых совпадает с эффективностью элемента, синтезированному по третьему

правилу (пункт 4.2.2). Сравнение результатов работы алгоритмов представлено в таблице 4.8 [125].

Таблица 4.8 - Сравнение методов оптимизации для элемента «HE» на самоколлимирующем фотонном кристалле

метод	эффективность, %		вычислительная сложность	
генетический алгоритм	71		840	
оптимизация нулевого порядка	метод покоординатного спуска		метод Хука-Дживса	
	эффективность, %	вычислительная сложность	эффективность, %	вычислительная сложность
случайная точка 1	63	67	36	84
случайная точка 2	24	66	52	93
случайная точка 3	60	80	28	84
случайная точка 4	41	62	62	79
случайная точка 5	50	70	66	79

Из таблицы видно, что на данном элементе методы оптимизации нулевого порядка работают хуже по критерию эффективности: на маленькой выборке можно получить результат сопоставимый с результатом градиентной оптимизации, но он будет зависеть от начального приближения. При этом детерминированным методам требуется в среднем в 11 раз меньше обращений к функции, решающей прямую задачу.

### 4.3.3 Обсуждение результатов оптимизации

Из полученных результатов в 4.3.1 и 4.3.2 можно сделать вывод, что для логических элементов методы оптимизации нулевого порядка оказались не применимы вовсе. Отметим, что векторы параметров оптимизации содержали 8 и 10 компонент для Y-образного элемента «HE» и для элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией соответственно. Как было сказано в предыдущей главе, методы оптимизации нулевого порядка оказались

применимы для расчета элементов, для которых вектор параметров оптимизации содержат 2 компонента, а уже для трех компонент эти методы не являются эффективными. Поэтому полученный результат является ожидаемым.

Приведем также абсолютное время работы алгоритмов на ноутбуке и сервере [125] (параметры которых описаны в пункте 3.3.3 предыдущей главы).

Таблица 4.9 - Абсолютное время работы алгоритмов

элемент	время работы генетического алгоритма, мин		среднее время работы по координатного спуска, мин		среднее время работы метода Хука-Дживса, мин	
	ноутбук	сервер	ноутбук	сервер	ноутбук	сервер
У-образный элемент «HE»	4250	1199	340	96	455	128
Элемент «HE» с самоколли-мацией	3360	1680	276	138	336	168

Из таблицы 4.9 видно, что время работы методов нулевого порядка значительно ниже, чем время работы генетического алгоритма. Поэтому для получения не самого оптимального результата, но за небольшие временные затраты (или в отсутствие доступа к мощной вычислительной системе), применение методов оптимизации нулевого порядка оправдано.

#### **4.4 Программный комплекс для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантной структуры**

Напомним, что для решения прямой задачи дифракции в настоящей работе используется программный пакет Ansys Lumerical, описанный в пункте 2.3. Для решения обратной задачи с помощью генетического алгоритма был написан собственный программный комплекс [133]. Необходимость в собственном программном комплексе возникла из-за отсутствия комплекса обеспечивающего решения всех задач данного исследования. Отметим, что в программный комплекс вошла именно генетическая оптимизация, так как она оказалась универсальнее методов оптимизации нулевого порядка (пункт 3.3.1 настоящей работы). Для дальнейшего производства элементов важно именно повышение их эффективности. Детерминированные методы оптимизации, как было показано ранее, позволяют получить высокое значение эффективности лишь для некоторых элементов и сильно зависят от начального приближения.

Отметим, что в рассмотренном ранее пакете Tidy3D [36] содержится модуль для решения обратной задачи дифракции: она решается с помощью метода топологической оптимизации [47-49]. Однако, заметим, что структуры, получаемые методом топологической оптимизации сложны для изготовления. Так же различные методы оптимизации (как локальные, так и глобальные) входят во многие пакеты для математического моделирования (Matlab [134], библиотеку SciPy [135] для Python), однако все эти встроенные методы принимают на вход для оптимизации аналитически заданную функцию. В настоящем исследовании же функция для оптимизации (эффективность) не имеет аналитического выражения и вычисляется с помощью обращения к Ansys Lumerical.

Исходя из сказанного выше, одной из задач, которую должен решать программный комплекс, должна быть возможность работать с Ansys Lumerical и получать из него данные. Ansys Lumerical имеет возможность

работать с языками Matlab и Python. В случае первого разработка ведется изнутри самого Ansys Lumerical, а для связи используется собственный язык Ansys Lumerical. В случае Python в программу подключается библиотека lumapi [136], которая обеспечивает связь программы на Python и Ansys Lumerical. Выберем последний способ для написания собственного программного комплекса, так как он позволяет делать дополнительные надстройки на комплекс (например, графический интерфейс) и не требует использования дополнительного языка.

#### **4.4.1 Описание функциональных требований к программному комплексу**

Следуя [137] опишем функциональные требования к программному комплексу. Для этого определим основные внешние функции комплекса, позволяющего моделировать и оптимизировать выбранный класс пространственно-вариантных структур.

1. Наличие доступа к файловой системе на устройстве для чтения файла с параметрами структуры и сохранения изображения распределения электромагнитного поля в структуре в любом формате и тестового файла с результатами оптимизации;
2. Реализация алгоритма моделирования структуры во внешнем пакете Ansys Lumerical по информации из текстового файла;
3. Реализация алгоритма расчета эффективности моделируемой структуры посредством обмена данными с внешним пакетом Ansys Lumerical;
4. Реализация генетического алгоритма с инструментом его согласования с FDTD методом, сохранение данных о лучшей особи популяции в алгоритме и об измельчении сеточной области;
5. Реализация интерактивного взаимодействия с пользователем через графический интерфейс, а также обеспечение отображения всей необходимой входной и выходной информации в удобочитаемом формате;

6. Способность при возникновении исключительных ситуаций, таких как ввод некорректных значений параметров, отображать соответствующее сообщение пользователю.

#### 4.4.2 Описание модулей программного комплекса

Следуя [137] опишем модули, из которых состоит разработанный программный комплекс. Написанный программный комплекс представляет собой четыре основных блока, обменивающихся друг с другом данными: блок графического интерфейса, блок моделирования структуры, блок расчета функции эффективности и сам блок оптимизации (рисунок 4.14).

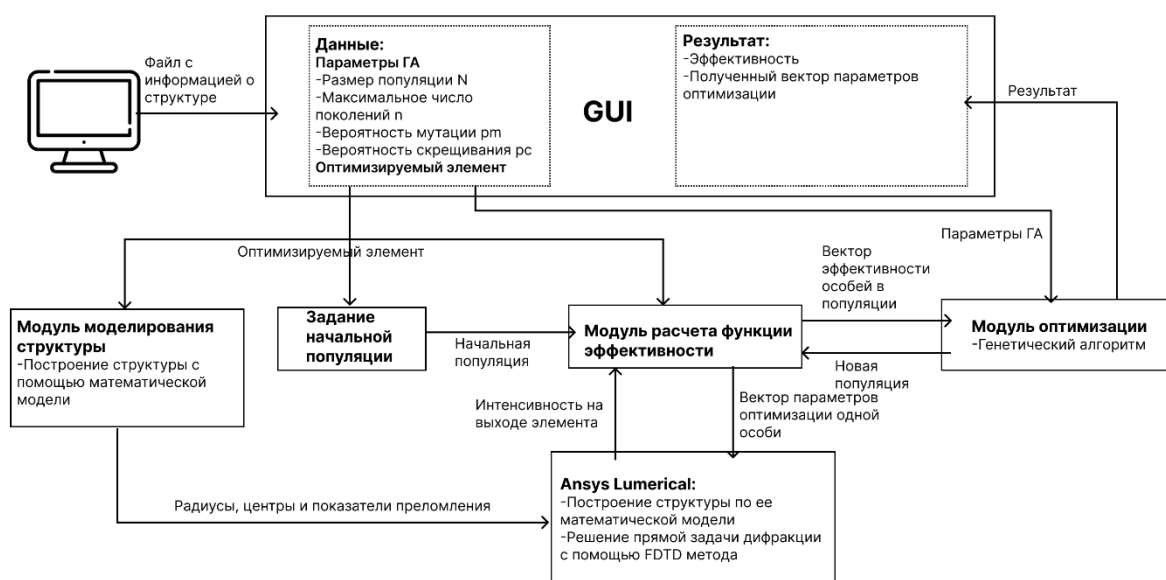


Рисунок 4.14 – Блок схема программного комплекса

#### Графический интерфейс

Сначала пользователь, взаимодействуя с графическим интерфейсом (рисунок 4.15), вводит параметры для генетического алгоритма (размер популяции, число поколений, вероятности мутации и скрещивания), а также выбирает файл, в котором содержится информация о моделируемой структуре: название структуры, размер кристалла, его тип, период решетки, радиус каверн, показатели преломления подложки и каверн, а так же номера

каверн, которые образуют линейный дефект и номера каверн, которые будут составлять одну особь генетического алгоритма.

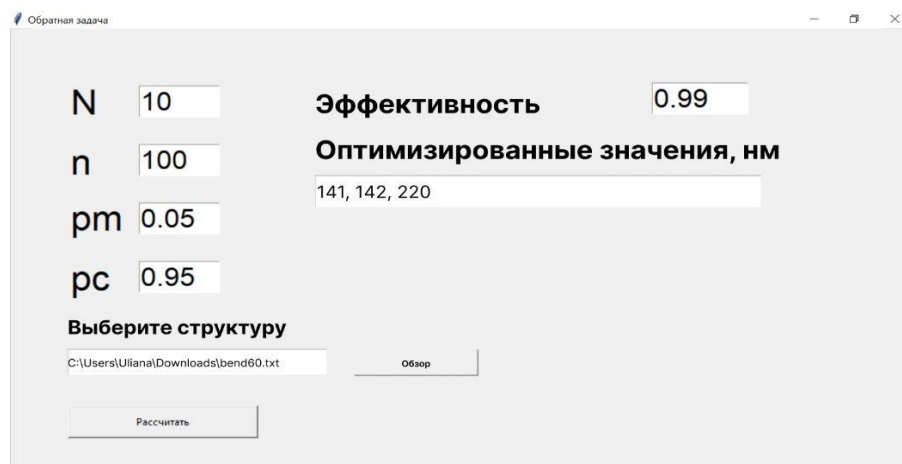


Рисунок 4.15 – Графический интерфейс

### ***Модуль моделирования структуры***

В данном блоке извлекается информация из файла и строится структура. Вначале рассчитываются положения центров каверн в регулярной структура по формуле (2) или (3), а затем из нее удаляются каверны с индексами, составляющие линейный дефект. Полученный массив значений координат центров, радиусы и показатели преломления передаются с помощью библиотеки `lumar1` в Ansys Lumerical, где происходит построение окончательной структуры. Данный блок так же можно использовать как отдельную программу, например для последующей конвертации модели в файл GDS [138], используемый как стандарт для обмена данными о топологии интегральных схем в системах автоматизированного проектирования.

### ***Модуль расчета функции эффективности***

Данный блок получает информацию из файла с названием структуры и номерами каверн, которые будут изменены. С помощью библиотеки `lumar1` выставляются значения параметров оптимизации (значения радиусов каверн

и т.д.), запускается симуляция (решение прямой задачи дифракции), а затем с монитора снимается значение интенсивности на выходе элемента. После извлечения значения выходной интенсивности взаимодействие с Ansys Lumerical заканчивается и происходит расчет эффективности (интенсивность на входе для каждого элемента заранее известна и зашита в программу). Данный блок также может использоваться отдельно, для автоматизированного расчета эффективности элемента.

### ***Модуль оптимизации***

Данный блок получает на вход значения эффективностей в текущей популяции из блока расчета функции эффективности, а также параметры генетического алгоритма из графического интерфейса. После нахождения эффективности каждой особи, данные значения передаются на блок оптимизации, где, согласно генетическому алгоритму), формируется новое поколение, которое затем передается опять в блок расчета функции эффективности. Если же достигнуто максимальное значение эффективности (равное 1) или было достигнуто максимальное количество поколений, то лучшая эффективность и лучшие значения параметров оптимизации передаются в блок графического интерфейса.

Отметим, что при работе генетического алгоритма мутация осуществляется с учетом технологических особенностей изготовления элементов. Так же эта особенность учитывается при создании начальной популяции.

При написании генетического алгоритма были использованы функции из библиотеки numpy [139], графики построены с помощью библиотеки matplotlib [140], а графический интерфейс написан с помощью библиотеки tkinter [141].

## Выводы по главе 4

- 1) На примере Y-образного логического элемента «НЕ» еще раз показана необходимость модификации простого генетического алгоритма: решение, полученное не модифицированным алгоритмом, характеризуется не только не технологичностью, но и неустойчивостью при сгущении сеточной области.
- 2) При применении модифицированной процедуры генетического оптимизации к рассмотренным в работе элементам получены структуры обеспечивающие следующие значения эффективности: 66% для Y-образного логического элемента «НЕ», что в 4 раза больше эффективности до оптимизации; 71% для логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией, что в 2,1 раз больше эффективности до оптимизации.
- 3) Применении генетической оптимизации с адаптацией сеточной области Yее не привело к улучшению результатов для Y-образного элемента «НЕ», Для элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией такое применение дало значение эффективности для сигнала логической 1 в 81%, что на 10% больше, чем при простой оптимизации (без адаптации сеточной области), а так же привело к снижению вычислительной сложности оптимизации.
- 4) Сравнительный анализ генетической оптимизации с методами оптимизации нулевого порядка так же показал, что по критерию получаемого значения эффективности элемента для расчета элементов, где излучение отклоняется от прямолинейного направления (оптические логические элементы) необходимо использование генетического алгоритма. Так же критерием выбора метода решения обратной задачи может считаться вычислительная сложность метода, измеряемая здесь количеством обращений к решению прямой задачи. В

этом случае выбор методов оптимизации нулевого порядка предпочтительнее.

- 5) Для данного исследования разработан программный комплекс, предназначенный для оптимизации одного класса пространственно-вариантных структур с помощью генетического алгоритма. Программа включает в себя четыре блока: графический интерфейс, блок построения модели элемента, блок расчета функции пригодности особи (эффективности структуры) для генетического алгоритма и блок генетического алгоритма. Все блоки программного комплекса могут использоваться отдельно для решения более частных задач. Для нахождения эффективности каждой структуры решалась прямая задача дифракции с использованием FDTD метода, который реализуется в программном пакете Ansys Lumerical R1. Программный комплекс написан на языке python, API которого может быть использовано в Ansys Lumerical.

## Заключение

В результате диссертационного исследования проведено моделирование и оптимизация выбранного класса пространственно-вариантных структур, разработан соответствующий программный комплекс, который применен для случая фотонно-кристаллических волноведущих структур.

Основными результатами диссертации являются:

1. Разработана математическая модель одного-класса пространственно-вариантной структуры. Предложенная модель основана на модели решетки Браве и учитывает размер узлов, материал заполнения структуры, а также линейные и локальные дефекты в структуре, что делает возможным ее применение для последующего расчета фотонно-кристаллических элементов.
2. Для оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур с дефектами представлен способ согласования генетического алгоритма и FDTD метода, заключающийся в адаптации сеточной области в зависимости от значения радиусов узлов решетки, полученных в генетическом алгоритме. Так же при согласовании ставится дополнительное ограничение на размер узлов, обусловленное технологическими особенностями изготовления структур;
3. Для данного исследования разработан программный комплекс, предназначенный для оптимизации одного класса пространственно-вариантных структур с помощью генетического алгоритма. Программа включает в себя четыре блока: графический интерфейс, блок построения модели элемента, блок расчета функции пригодности особи (эффективности структуры) для генетического алгоритма и блок генетического алгоритма. Все блоки программного комплекса могут использоваться отдельно для решения более частных задач. Для нахождения эффективности каждой структуры решалась прямая задача дифракции с использованием FDTD

метода, который реализуется в программном пакете Ansys Lumerical R1. Программный комплекс написан на языке python, API которого может быть использовано в Ansys Lumerical. В отличие от аналогов, в которых «вшитый» блок оптимизации реализует топологический метод, разработанный комплекс реализует генетический алгоритм. Такой подход позволяет учитывать особенности конкретного оптимизируемого элемента и получить структуры пригодные для изготовления.

4. Применение предложенной модели пространственно-вариантной структуры и метода согласования генетического алгоритма и FDTD метода к рассмотренным в работе фотонно-кристаллическим оптическим элементам позволило получить структуры, обеспечивающие следующие значения эффективности:

- более 99% для изгибов волноводов на  $60^\circ$  и  $120^\circ$ , что соответственно в 33 и 11 раз больше эффективности до оптимизации,
- более 99% для узла пересечения, что в 2 раза больше эффективности до оптимизации,
- 89 % для узла ввода излучения, что в 4,5 раза больше эффективности до оптимизации,
- 66% для Y-образного логического элемента «HE», что в 4 раза больше эффективности до оптимизации,
- 81% для логического элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией, что в 4 раза больше эффективности до оптимизации.

## Список литературы

1. Volk, A. Development of spatially variant photonic crystals to control light in the near-infrared spectrum / A. Volk, A. Rai, I. Agha // *Sci Rep.* – 2022. – Vol. 12. 16146.
2. Gnawali, R. Bio-inspired spatially variant photonic crystals for self-collimation and beam-steering applications in the near-infrared spectrum / R. Gnawali, A. Volk, I. Agha // *Sci Rep.* – 2021. – Vol. 11. 18767.
3. Rumpf Raymond C. Spatially variant periodic structures in electromagnetics / C. Rumpf Raymond [et al.] // *Philos Trans A Math Phys Eng Sci.* – 2015. – Vol. 373. - № 2049. 20140359.
4. Yoon, G. H. Topology optimization of acoustic–structure interaction problems using a mixed finite element formulation / G.H. Yoon, J.S. Jensen, O. Sigmund // *International journal for numerical methods in engineering.* – 2007. – Vol. 70. – №. 9. – P. 1049-1075.
5. Lee, J. Design of spatially-varying orthotropic infill structures using multiscale topology optimization and explicit de-homogenization / J. Lee [et al.] // *Additive Manufacturing.* – 2021. – Vol. 40. 101920.
6. Hedberg, H. Binary morphology with spatially variant structuring elements: Algorithm and architecture. / H. Hedberg, P. Dokladal, V. Owall // *IEEE Transactions on Image Processing.* – 2009. – Vol. 18. - № 3. – P. 562-572.
7. Bouaynaya, N. Theoretical Foundations of Spatially-Variant Mathematical Morphology Part II: Gray-Level Images. / N. Bouaynaya, D. Schonfeld // *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence.* – 2008. – Vol. 30. – P. 837-850.
8. Mohammed Abdelkader E. A computerized hybrid Bayesian-based approach for modelling the deterioration of concrete bridge decks / E.A. Mohammed, T. Zayed, M. Marzouk // *Structure and Infrastructure Engineering.* – 2019. – Vol. 15. – №. 9. – P. 1178-1199.
9. Genetic algorithm-Markovian model for predictive bridge asset management / A. Yosri [et al.] // *Journal of Bridge Engineering.* – 2021. – Vol. 26. – №. 8. 04021052.

10. Kobayashi, K. A Bayesian estimation method to improve deterioration prediction for infrastructure system with Markov chain model / K. Kobayashi, K. Kaito, N. Lethanh //International Journal of Architecture, Engineering and Construction. – 2012. – Vol. 1. – №. 1. – P. 1-13.
11. Алексеев, Г.В. “Оптимизационный метод в задачах акустической маскировки материальных тел / Г. В. Алексеев, А. В. Лобанов, Ю. Э. Спивак // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2017. – Т. 57. - № 9. – С. 1477–1493.
12. Спивак, Ю.Э. Оптимизационный метод в двумерных задачах магнитной маскировки / Ю. Э. Спивак // Сиб. электрон. матем. изв. – 2019. - № 16. – С. 812–825
13. Алексеев, Г. В. Численный анализ трехмерных задач магнитной маскировки на основе оптимизационного метода / Г. В. Алексеев, Ю. Э. Спивак // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2021. – Т. 61, № 2. – С. 224-238.
14. Свиридюк, Г. А. Обратная задача для уравнений Баренблатта-Желтова-Кочиной на графе / Г.А. Свиридюк, А.А. Баязитова //Неклассические уравнения математической физики: сб. тр. междунар. конф.«Дифференциальные уравнения, теория функций и приложения, посвящ. – 2007. – С. 244-250.
15. Chambers, L.D. The Practical Handbook of Genetic Algorithms: Applications / L.D. Chambers // New York : Chapman and Hall/CRC. – 2001. – 544 p.
16. J. H. Holland, J.H. Searching Nonlinear Functions for High Values / J. H. Holland // Applied Mathematics and Computation. – 1989. - № 32. – P. 225-274.
17. Чипига, А.Ф. Модифицированная математическая модель простого генетического алгоритма / А.Ф. Чипига, Ю.Ю. Петров // Искусственный интеллект. -2005 - №4. – С. 314-317.
18. Чипига, А.Ф. Оценка деструктивных свойств кроссинговера в мажоритарном генетическом алгоритме / А Ф. Чипига, Р А. Воронкин // Наука. Инновации. Технологии. - 2004. - № 38. – С. 31-40.

19. Чипига, А. Ф. Вероятность разрушения шаблона в теореме Холланда при использовании мутации для генетического алгоритма с расщеплением признаков / А. Ф. Чипига, Р. А. Воронкин // Вестник Северо-Кавказского государственного технического университета Серия «Физико-химическая». - 2003. – Т. 1. - № 7. - С 103-113.
20. Nix, A. E. Modeling genetic algorithms with Markov chains / A.E. Nix, M.D. Vose // Annals of mathematics and artificial intelligence. – 1992. – Vol. 5. – №. 1. – P. 79-88.
21. Punctuated equilibria in genetic search / M.D. Vose [et al.] //Complex systems. – 1991. – Vol. 5. – №. 1. – P. 31-44
22. Чипига, А. Ф. Оценка выбора размера популяции в простом генетическом алгоритме / А.Ф. Чипига, Ю.Ю. Петров // Информационное противодействие угрозам терроризма. – 2005. – №. 5. – С. 26-29.
23. A study of control parameters affecting online performance of genetic algorithms for function optimization / J.D. Schaffer [et al.] // Proceedings of the 3rd international conference on genetic algorithms. – 1989. – P. 51-60.
24. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. ТЕОРИЯ ПОЛЯ 7-е изд., испр. -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. - 512 с. ISBN 5-02-014420-7 (т. II)
25. Борн, М. Основы оптики : пер. с англ. / М. Борн, Э. Вольф // Москва : Наука. - 1973. – 720 с.
26. Аналитический метод исследования поведения оптической волны в нелинейной среде с периодически расположенными нанопленками / С.А. Волкова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. – 2023. – Т. 31. – №. 5. – С. 575-585.
27. Monk, P. Finite element methods for Maxwell's equations / P. Monk // Oxford university press. - 2003. – 468 p.
28. Calculation of two dimensional photonic bandgap using the Plane Wave Expansion (PWE) method / A.F. Fernanda [et al.] // AIP Conference Proceedings. - 2024. – Т. 3074. – №. 1. 020010.

29. Yee, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / Kane S. Yee // IEEE Transactions Antennas and Propagation. – 1966. – Vol.14, - № 3. – P. 302–307.
30. Taflove, A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Third Edition /A. Taflove, S.C. Hagness // Boston : Artech House, - 2005. - 1038 p.
31. B-CALM: An open-source GPUbased 3D-FDTD with multi-pole dispersion for plasmonics / P. Wahl [et al.] // Optical and Quantum Electronics. – 2012. – Vol. 44. – P. 285-290.
32. Tan, E. L. Fundamental implicit FDTD schemes for computational electromagnetics and educational mobile apps / E.L. Tan // Progress In Electromagnetics Research. – 2020. - Vol. 168. – P. 39–59.
33. Time reversal differentiation of fdtd for photonic inverse design / R.J. Tang R [et al.] // ACS Photonics. – 2023. – Vol. 10. – №. 12. – С. 4140-4150.
34. Ansys Lumerical : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://www.lumerical.com/> (дата обращения: 21.01.2023).
35. Meep Documentation : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://meep.readthedocs.io/en/master/> (дата обращения: 10.05.2025).
36. Python-Driven FDTD Software: Tidy3D: [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://www.flexcompute.com/tidy3d/solver/> (дата обращения: 10.05.2025).
37. Волоотовский, С. Г. Программное обеспечение для итерационного расчета и исследования ДОЭ / С. Г. Волоотовский, Н. Л. Казанский, В. С. Павельев // Компьютерная оптика. – 1997. – №. 17. – С. 48-53.
38. Повышение энергетической эффективности дифракционных оптических элементов для задач трехмерной наноскопии / Д. В. Проконова [и др.] // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2019. – Т. 83. – №. 12. – С. 1612-1617.
39. Котляр, В. В. Алгоритм расчета дифракционных оптических элементов для генерации вращающихся модальных изображений/ В. В. Котляр, В. А. Сойфер, С. Н. Хонина // Автометрия. – 1997. – №. 5. – С. 46.

40. Сошников, Д. В. Градиентный метод расчета каскадных ДОЭ и его применение в задаче классификации рукописных цифр/ Д. В. Сошников, Л. Л. Досколович, Е. В. Бызов // Компьютерная оптика. – 2023. – Т. 47. – №. 5. – С. 691-701.
41. Павельев, В.С. Стохастический подход к оптимизации квантованных дифракционных оптических элементов / В.С. Павельев // Известия самарского научного центра РАН. – 2002. - Т. 4. - №1. – С. 61-67.
42. Харченко, Е. Л. Метод оптимизации источника освещения в проекционной фотолитографии / Е. Л. Харченко, В. В. Иванов, А. В. Кузовков // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2018. – №. 2. – С. 32-37.
43. Ahmad Mohebzadeh-Bahabady Proposal of a Cascade Photonic Crystal XOR Logic Gate for Optical Integrated Circuits with Investigation of Fabrication Error and Optical Power Changes / Ahmad Mohebzadeh-Bahabady // Photonics. – 2021. - Vol. 8. - № 9. - P. 392-405
44. Takiguchi, M. All-Optical InAsP/InP Nanowire Switches Integrated in a Si Photonic Crystal. / M. Takiguchi, N. Takemura, K. Tateno // ACS Photonics. – 2020. - Vol. 7. -№ 4. – P. 1016–1021.
45. Foroughifar, A. Design and analysis of a novel four - channel optical filter using ring resonators and line defects in photonic crystal microstructure. / A. Foroughifar, H. Saghaei, E. Veisi // Optical and Quantum Electronics. – 2021. – Vol. 53. - № 2. 101.
46. Heshmati, MMK. Optimized Design and Simulation of Optical Section in Electro-Reflective Modulators Based on Photonic Crystals Integrated with Multi-Quantum-Well Structures. / MMK. Heshmati, F. Emami // Optics. – 2023. – Vol. 4 – № 1. – P. 227-245.
47. Broadband wave-guide intersection with low-crosstalk in two-dimensional photonic crystal circuits by using topology optimization. / Y. Watanabe [et al.] // Opt. Express – 2006. – Vol. 14. - № 20. P. 9502 – 9507.

48. Topology optimization of waveguide bends with wide, flat band-width in air-bridge-type photonic crystal slabs. / Y. Watanabe [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2007. – Vol. 101. - № 11. 113108.
49. Shen, B. An integrated-nanophotonics polarization beamsplitter with  $2.4 \times 2.4 \mu\text{m}^2$  footprint. / B. Shen, P. Wang, R. Polson // Nature Photon. – 2015. - № 9. – P. 378–382.
50. Optimization of low-loss and wide-band sharp photonic crystal waveguide bends using the genetic algorithm. / J. Liyong [et al.] // Optik. – 2013. – Vol. 124. - № 14. P. 1721-1725.
51. Genetic optimization of photonic crystal wave-guide termination for both on-axis and off-axis highly efficient directional emission. / J. Liyong [et al.] // Optics express. – 2009. – Vol. 17. - № 12. – P. 10126-10135.
52. Photonic crystal broadband y-shaped  $1 \times 2$  beam splitter inversely de-signed by genetic algorithm. / K. Hang [et al.] // Opt. Eng. – 2023. – Vol. 62. - № 6. 065106.
53. Polarization-independent waveguides in air holes photonic crystals and its slow light / Q. Fan [et al.] // Optics Communications. – 2016. – Vol. 380. – P. 227-232.
54. Сошников, Д.В. Оценка влияния технологических погрешностей изготовления на работу фотонно-кристаллических волноводов / Д.В. Сошников // Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем : сб. ст. по материалам XVII Всерос. с междунар. участием науч.-техн. конф. (г. Пенза, Россия, 28 ноября – 3 декабря 2022 г.). Пенза : Изд-во ПГУ, 2022. С. 128 – 133.
55. Сиротин, Ю.И. Основы кристаллофизики / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская // Москва : Наука, - 1979. – 639 с.
56. Кирш, Д.В. Алгоритм реконструкции трёхмерной структуры кристалла по двумерным проекциям / Д.В. Кирш, А.С. Широканев, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2019. – Т. 43, № 2. – С. 324-331.
57. Широканев, А.С. Исследование алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток с применением градиентного

метода наискорейшего спуска / А.С. Широканев, Д.В. Кириш, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. - 2017. - Т. 41, № 3. - С. 453-460.

58. Лиопо, В. А. Объемноцентрированная ячейка Браве в плотнейшей шаровой упаковке / В.А. Лиопо [и др.] // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2019. – Т. 9. – №. 2. – С. 103-113.

59. Рышков, С. С. К вопросу о финальной  $\zeta$ -оптимальности решеток, дающих наиплотнейшую решетчатую упаковку  $n$ -мерных шаров / С.С. Рышков // Сибирский математический журнал. – 1973. – Т. 14. – №. 5. – С. 1065-1075.

60. Лиопо, В. А. Обратная решетка и обратное пространство кристалла / В.А. Лиопо [и др.] // Прогрессивные технологии и системы машиностроения: междунар. – 2018. – Т. 2 - №. 61. – С. 46.

61. Дышеков, А. А. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в сверхрешётках / А.А. Дышеков, Ю.П. // Успехи физики металлов. – 2001. – Т. 2. – С. 281-350.

62. Zeuschner, S. P. Reciprocal space slicing: A time-efficient approach to femtosecond x-ray diffraction / S.P. Zeuschner [et al.] // Structural Dynamics. – 2021. – Vol. 8. – №. 1. 014302

63. Nolze, G. Crystallographic analysis of the lattice metric (CALM) from single electron backscatter diffraction or transmission Kikuchi diffraction patterns / G. Nolze [et al.] // Applied Crystallography. – 2021. – Vol. 54. – №. 3. – P. 1012-1022.

64. Raymond, C. R. Synthesis of spatially variant lattices. / C.R. Raymond, J. Pazos // Opt. Express. – 2012. – Vol. 20. - № 14. – P. 15263-15274.

65. Беликов, А.В. Расчет зонной структуры металлических фотонных кристаллов: модифицированный метод разложения по плоским волнам / А. В. Беликов, М. В. Богданова, Ю. Е. Лозовик // Матем. Моделирование. – 2007. – Т. 19. - № 4. – С. 19–26.

- 66 **Кривошеева, Ю.Ю.** Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур / Ю.Ю. Кривошеева // Компьютерная оптика. – 2026. – Т. 50, № 1. 1189.
67. Нейдорф, Р. А. Сравнительный анализ эффективности вариантов турнирного отбора генетического алгоритма решения однородных распределительных задач / Р. А. Нейдорф, В. Г. Кобак, Д. В. Титов //Advanced Engineering Research. – 2009. – Т. 9. – №. 03. – С. 410-418.
68. Михайлова, А. Н. Использование метода колеса рулетки при решении задачи маршрутизации с помощью генетического алгоритма/ А. Н. Михайлова //Вестник науки. – 2020. – Т. 1. – №. 5. – С. 88-91.
69. Jebari, K. Parent Selection Operators for Genetic Algorithms / K. Jebari, M. Madiafi, A. Elmoujahid //International Journal of Engineering Research & Technology, - 2013. - Vol. 2. - № 11. – P. 1141 – 1145.
70. Степанов, К. А. Анализ эффективности методов скрещивания в генетических алгоритмах / К. А. Степанов //Природные и интеллектуальные ресурсы Сибири. СИБРЕСУРС 2016. – 2016. – С. 122-122.
71. Чипига, А. Ф. Математическая модель равновероятного распределения потомков в генетическом алгоритме / А. Ф. Чипига, Ю. Ю. Петров // Системы управления и информационные технологии. – 2005. – Т. 2. – № 19. – С. 51-55.
72. Калмыков, И. А. Повышение вероятности нахождения глобального экстремума регуляцией генетических операторов в генетическом алгоритме / И.А. Калмыков, А. Ф. Чипига, Ю. Ю. Петров // Сборник трудов СевКавГТУ, серия «Естественнонаучная». – 2008. - № 4.
73. Чипига, А. Ф. Генетические операторы мажоритарного генетического алгоритма с элитным отбором / А. Ф. Чипига, Р. А. Воронкин // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Серия: Технические науки. - 2005. - № 4. – С. 45-50.

74. Petrovan, A. A Comparative Study between Haploid Genetic Algorithms and Diploid Genetic Algorithms / A. Petrovan, O. Matei, P. C. Pop // Carpathian Journal of Mathematics. – 2023. – Vol. 39. – №. 2. – P. 433-458.
75. A diploid genetic algorithm for solving the multidimensional multi-way number partitioning problem / A. Petrovan [et al.] // Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation. – 2023. – P. 231-234.
76. Jasuja, A. Feature selection using diploid genetic algorithm / A. Jasuja // Annals of Data Science. – 2020. – Vol. 7. – №. 1. – P. 33-43.
77. Altenberg, L. The schema theorem and Price's theorem / L. Altenberg // Foundations of genetic algorithms. – 1995. – Vol. 3. – P. 23-49.
78. Wright, A. H. Markov chain models of genetic algorithms / A.H. Wright, Y. Zhao // Procs. of GECCO'99. – 1999. – P. 734-741.
79. Чипига, А. Ф., Воронкин Р. А. Применение цепей Маркова для анализа влияния мутации на сходимость генетического алгоритма с кодированием по сумме битов / А.Ф. Чипига, Р.А. Воронкин // Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2005. – Т. 48. – №. 4. – С. 87-94.
80. Синюк, В. Г., Любимов С. В. Решение эталонной транспортной задачи с помощью генетических алгоритмов / В.Г. Синюк, С.В. Любимов // Программные продукты и системы. – 2009. – №4. – С. 34-37.
81. Markov chain-based genetic algorithm for solving a redundancy allocation problem for a system with repairable warm standby components / F. Kayedpour [et al.] // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Part O: Journal of Risk and Reliability. – 2024. – Vol. 238. - № 4. – P. 853-872.
82. Математические модели генетических алгоритмов / П.М. Осипов [и др.] // Труды Международного симпозиума «Надежность и качество». – 2007. – Т. 1. – С. 231-234.
83. Radcliffe, N. J. The algebra of genetic algorithms / N.J. Radcliffe // Annals of mathematics and artificial intelligence. – 1994. – Vol. 10. – P. 339-384.
84. Слепцов, Н.В. Повышение качества эволюционно-генетических вычислений с помощью разделения оценки и масштабирования / Н.В.

- Слепцов, С.В. Щербакова // Известия вузов. Поволжский регион. Технические науки. - 2008. - №4. – С. 67-79.
85. Hesser, J. Towards an optimal mutation probability for genetic algorithms / J. Hesser, R. Männer // Parallel Problem Solving from Nature: 1st Workshop, PPSN I Dortmund, FRG, October 1–3 1990. – 1991. – Vol. 1. – P. 23-32.
86. Wolpert, D.H. No Free Lunch Theorems for Optimisation / D.H. Wolpert, W.G. Macready // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 1997. – Vol. 1, -№ 1. – P. 67-82.
87. Rudolph, G. Convergence analysis of canonical genetic algorithms / G. Rudolph // IEEE transactions on neural networks. – 1994. – Vol. 5. – №. 1. – P. 96-101.
88. Eiben, A. E. Global convergence of genetic algorithms: A Markov chain analysis / A.E. Eiben, E. H. L. Aarts, K.M. Van Hee // Parallel Problem Solving from Nature: 1st Workshop, PPSN I Dortmund, FRG, October 1–3 1990. - 1991 – Vol. 1. – P. 3-12.
89. Городилов, А.Ю. Двухуровневый генетический алгоритм реконфигурации программируемых логических интегральных схем / А.Ю. Городилов // Information Technologies and Knowledge. - 2014. – Т. 8. - № 2. – С. 131–140.
90. Городилов, А. Ю. Теорема о сходимости генетического алгоритма с двухуровневым кодированием к точному решению задачи реконфигурации ПЛИС / А.Ю. Городилов, Е.Ю. Данилова // Вестник Пермского университета. Серия: Математика. Механика. Информатика. - 2015. – Т. 31 - № 4. - С. 84-90.
91. Дифракционная компьютерная оптика: Под ред. В. А. Сойфера. Москва : ФИЗМАТЛИТ, - 2007. - 736 с.
92. Агранович, В.М. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. - 1962, - Т. 76. - № 4. – С. 643–682.
93. Lekner, J. TM, TE and TEM'beam modes: exact solutions and their problems / J. Lekner // Journal of Optics A: Pure and Applied Optics. – 2001. – Vol. 3. – №. 5. 407.

94. Чебышев, В. В. Тензор гринна для поля щелевого излучателя с многослойным укрытием / В.В. Чебышев, О.И. Ястребцова // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения*. – 2016. – Т. 16. – №. 5. – С. 52-55.
95. Никольский, В.В. Электродинамика и распространение радиоволн / В.В. Никольский, Т.И. Никольская // Москва : Наука, - 1999. – 544 с.
96. Oughstun, K.E. On the Lorentz-Lorenz formula and the Lorentz model of dielectric dispersion / K. E. Oughstun, N.A. Cartwright // *Opt. Express*. – 2003. - № 11. – P. 1541-1546.
97. Цифровые анализаторы спектра, сигналов и логики / Под ред. проф. В. П. Дьяконова. — Москва : СОЛОН-Пресс, - 2009. — С. 248.
98. Berenger, J. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / J. Berenger. // *Journal of Computational Physics*. – 1994. – Vol. 114, Issue 2. – P. 185-200.
99. Roden, J. Convolution PML (CPML): an efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media / J. Roden, S.Gedney // *Microwave and Optical Technology Letters*. – 2000. – Vol. 27. - № 5. – P. 334-339.
100. Gedney, S. D. An auxiliary differential equation formulation for the complex-frequency shifted PML / S.D. Gedney, B. Zhao // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 2009. – Vol. 58. – №. 3. – P. 838-847.
101. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский // Москва : Наука, - 1977. – 656 с.
102. Kaneda, N. FDTD analysis of dielectric resonators with curved surfaces / N. Kaneda, B. Houshm, T. Itoh // *IEEE Trans. Microwave Theory Tech*. – 1997. – Vol. 45. - № 9. – P. 1645–1649.
103. Dey, S. A conformal finite-difference time-domain technique for modeling cylindrical dielectric resonators / S. Dey, R. Mittra // *IEEE Trans. Microwave Theory Tech*. – 1999 - Vol. 47. - № 9, - P. 1737–1739.

104. Yu, W. A conformal finite difference time domain technique for modeling curved dielectric surfaces / W, Yu, R. Mittra // IEEE Microwave Components Lett. – 2001. - Vol. 11. – P. 25-27.
105. A flexible framework for large-scale FDTD simulations: open-source inverse design for 3D nanostructures / Y. Mahlau [et al.] // Photonic and Phononic Properties of Engineered Nanostructures XV. – SPIE, 2025. – Vol. 13377. – P. 40-52.
106. FDTD simulation to investigate the effect of nanopattern on light extraction distribution of ZnS: Cu LED / F. Ibrahim [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. - 2023. – Vol. 2673. – №. 1. 012010.
107. Optimization on the design of nano-patterned ZnS: Cu LED surface using FDTD simulation / F. Ibrahim [et al.] // Nano-Structures & Nano-Objects. – 2024. – Vol. 40. 101410.
108. Falih, A. S. Full-wave multiphysics model for simulation and investigation of terahertz photoconductive antenna using LUMERICAL and CST softwares / A.S. Falih, K.A. Hubeatir, R.S. Fyath // Results in Optics. – 2023. – Vol. 10. 00344.
109. Lumerical FDTD — Monitors | Ansys Innovation Courses: [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://innovationspace.ansys.com/product/lumerical-fdtd-monitors/> (дата обращения: 21.11.2023).
110. Сухинов, А. А. Адаптивные декартовы сетки / А.А. Сухинов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2008. – №. 54. – С. 164-166.
111. Сухинов, А. И. Адаптивные сеточные методы для эффективного моделирования динамики мелководных прибрежных систем / А.И. Сухинов, С.В. Проценко, Е.А. Проценко // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2025. – Т. 9. – №. 3. – С. 44-55.
112. Sukhinov, A.I. Reconstruction of Basin Bottom Surface for High Precision Hydrodynamics Modeling Using Parallel Computations. / A.I. Sukhinov, B. Roux, A.A. Sukhinov // Int. Conf on Parallel Computational Fluid Dynamics, May 21–24, 2007, Antalya, Turkey

113. Van Hoof J. A. Towards adaptive grids for atmospheric boundary-layer simulations / Van Hoof J. A. [et al.] //Boundary-layer meteorology. – 2018. – Vol. 167. – №. 3. – P. 421-443.
114. Yan S. A discontinuous Galerkin time-domain method with dynamically adaptive Cartesian mesh for computational electromagnetics / Yan S. [et al.] //IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 2017. – Vol. 65. – №. 6. – P. 3122-3133.
115. Barbas, A. Development of a Godunov method for Maxwell's equations with adaptive mesh refinement / A. Barbas, P. Velarde //Journal of Computational Physics. – 2015. – Vol. 300. – P. 186-201
116. Yablonovitch, E. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics / E. Yablonovitch. // Physical Review Letters. – 1987. – Vol. 58, Issue 20. – P. 2059-2062.
117. **Кривошеева, Ю.Ю.** Расчет волноводных фотонно-кристаллических структур с изгибами с помощью генетического алгоритма / Ю.Ю. Кривошеева, Д.Л. Головашкин // Математическое и компьютерное моделирование естественнонаучных и социальных проблем : сб. ст. по материалам XVII Всерос. с междунар. участием науч.-техн. конф. (г. Пенза, Россия, 1-4 июня 2023 г.). Пенза : Изд-во ПГУ, 2023. С. 151 – 156.
118. **Krivosheeva, Yu.Yu.** Design of the Intersection Node of Photonic Crystal Waveguides Using a Genetic Algorithm / Yu.Yu. Krivosheeva, P.V. Moxsin, D.L. Golovashkin, V.S. Pavelyev // 2024 X International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT), Samara, Russian Federation. - 2024. - P. 1-5
119. Bjarklev, A. Photonic crystal fibres / A. Bjarklev, J. Broeng, A.S. Bjarklev // New York : Springer New York - 2003. – 298 p.
120. Iterative approach based on the FDTD method for the design of metal-dielectric photonic crystal devices / P. Mokshin [et al.] // 2022 VIII International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT), Samara, Russian Federation. - 2022, - P. 1-4.

121. Elimination of cross talk in waveguide intersections / S. Johnson [et al.] // *Opt. Lett.* – 1998. – Vol. 23. – P. 1855 – 1857.
122. Gilarlue, M.M. Photonic crystal waveguide intersection design based on Maxwell's fish-eye lens / M.M. Gilarlue, S.H. Badri // *Photonics Nanostruct.* – 2018. – Vol. 31. – P. 154 – 159.
123. **Кривошеева, Ю.Ю.** Применение модели генетического алгоритма для решения обратной задачи дифракции в случае расчета фотонно-кристаллических оптических элементов / Ю.Ю. Кривошеева, Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев // XI Международная конференция и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2025). — 2025. — Т. 1. 011692.
124. Pavelyev, V.S. Genetic Optimization of the Y-Shaped Photonic Crystal NOT Logic Gate / V.S. Pavelyev, **Yu.Yu. Krivosheeva**, D.L. Golovashkin // *Photonics.* – 2023. – Vol. 10. - № 10. 1173.
125. **Кривошеева, Ю.Ю.** Сравнение двух подходов к расчету интерференционных оптических элементов на фотонно-кристаллических структурах/ Ю.Ю. Кривошеева, Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев // *Компьютерная оптика.* – 2025. – Т. 49, № 4. – С. 549-559.
126. Певнева, А. Г. Методы оптимизации / А.Г. Певнева, М.Е. Калинин // Санкт-Петербург : Университет ИТМО. – 2020. – 66 с.
127. Brent, R.P. Algorithms for Minimization without Derivatives / R.P. Brent // New Jersey: Prentice-Hall. - 1973. – 195 p.
128. Аттетков, А.В. Методы оптимизации / А.В. Аттетков, С.В. Галкин, В.С. Зарубин // Москва : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, - 2003. — 440 с.
129. Мокшин, П.В. Интерференционные логические элементы на основе фотонного кристалла с Y-образным дефектом / П.В. Мокшин, Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев // *Компьютерная оптика.* – 2023. – Т. 47, - № 6. – С. 895-900.

130. Kosaka, H. Self-collimating phenomena in photonic crystals / H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – Vol. 74. - № 9. – P. 1212-1214.
131. Design and analysis of logic NOR, NAND and XNOR gates based on the interference effect / Xiao-Wen S [et al.] // *Quantum electronics.* – 2018. – Vol. 48. - № 2. – P. 178-183.
132. Xue, Y. Design and research of logic gate based on photonic crystal self-collimation effect / Y. Xue, Y. Hu, D. Meng // *Proceedings of the SPIE.* – 2022. 1216203.
133. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024616931. Программа для расчета интерференционных фотонно-кристаллических элементов по модифицированному генетическому алгоритму / **Ю.Ю. Кривошеева**. Заявка №2024613355. Дата поступления 21 февраля 2024 г. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 27 марта 2024 г.
134. Genetic Algorithm – MATLAB & Simulink : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://www.mathworks.com/discovery/genetic-algorithm.html> (дата обращения: 9.02.2024).
135. Optimization and root finding (scipy.optimize) : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/optimize.html> (дата обращения: 9.02.2024).
136. Python API - Lumerical : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://developer.ansys.com/docs/lumerical/python-lumerical> (дата обращения: 21.01.2023).
137. Куприянов, А.В. Математическое моделирование, методы и программные средства текстурного анализа изображений кристаллических структур : диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук : 05.13.18 / Куприянов Александр Викторович. - Самара, 2013. - 239 с.

138. Xing-yu W. Design of GDSII pattern conversion system / Xing-yu W., Ying-ding Z. //The 2nd International Conference on Information Science and Engineering. – IEEE, - 2010. – P. 4503-4505.
139. NumPy : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://numpy.org/> (дата обращения: 9.02.2023).
140. Matplotlib – Visualization with Python : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <https://matplotlib.org/> (дата обращения: 9.02.2023).
141. TkDocs : [сайт]. – [Б. м.], 2025. – URL: <http://tkdocs.com/> (дата обращения: 12.05.2025).

# Приложение А. Свидетельство о регистрации программного комплекса

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



**СВИДЕТЕЛЬСТВО**  
о государственной регистрации программы для ЭВМ  
**№ 2024616931**

**«Программа для расчета интерференционных фотонно-кристаллических элементов по модифицированному генетическому алгоритму»**

Правообладатель: *Кривошеева Юлиана Юрьевна (RU)*

Автор(ы): *Кривошеева Юлиана Юрьевна (RU)*

Заявка № **2024613355**  
Дата поступления **21 февраля 2024 г.**  
Дата государственной регистрации  
в Реестре программ для ЭВМ **27 марта 2024 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

**Ю.С. Зубов**

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат: 4026b8a0921613564a1f96183673b4aa7  
Владелец: **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 18.08.2023 по 22.08.2024



## Приложение Б. Акты о внедрении

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор – проректор по науке  
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»



/А.Н. Розенцвайг

« 13 » апреля 2026 г.

АКТ

о использовании результатов диссертационного исследования

Кривошеевой Юлианы Юрьевны


«Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур»

Настоящим подтверждаем, что результаты диссертационного исследования Кривошеевой Ю.Ю. включены в тематику и отчетные материалы по проекту «Разработка метода оптимизации фотонно-кристаллических компонентов фотонных устройств обработки информации» в рамках реализации Программы развития передовой инженерной аэрокосмической школы Самарского университета по научному направлению «Интеллектуальный инжиниринг программно-аппаратных комплексов интеллектуальной реальности на основе методов фотоники, сенсорики и анализа больших данных» (по Соглашению от «01» мая 2023 г. № ПИАШ/09-И-2023 (17/23Б))

В качестве одного из исполнителей Кривошеева Ю.Ю. разработала метод и программный комплекс для оптимизации фотонно-кристаллических компонентов устройств обработки информации, а также в соавторстве с другими исполнителями проекта подготовила, опубликовала и представила на международных конференциях работы о результатах применения данного метода для оптимизации фотонно-кристаллических волноведущих структур с изгибами, узла пересечения волноводов, узла ввода излучения, а также интерференционного Y-образного логического элемента «HE».

Научный результат диссертации Кривошеевой Ю.Ю. (метод и программный комплекс для оптимизации фотонно-кристаллических компонентов устройств обработки информации) имеет высокое прикладное значение и использован при проведении вычислительных экспериментов на базе ресурсов Самарского университета.

Директор передовой инженерной аэрокосмической школы  
д.т.н., доцент

 /Ткаченко И.С.

« 10 » апреля 2026 г.

Руководитель проекта  
д.ф.м.н., доцент

 /Павельев В.С.

« 10 » апреля 2026 г.

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

ly /Гаврилов А.В.

19 апреля 2026г.



АКТ

о внедрении (использовании) результатов научно-исследовательской работы  
(диссертационного исследования) в учебный процесс

Результаты диссертационного исследования Кривошеевой Ю.Ю. «Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур», выполненного на кафедре прикладной математики использованы в учебном процессе на кафедре наноинженерии на основании решения кафедры, протокол №10 от «15» мая 2025 г.

Указанные результаты включены в курс «Теоретические основы интегральной оптики» направления подготовки 11.03.04 - Электроника и наноэлектроника, образовательная программа «Электроника и наноэлектроника (Нанотехнологии электроники и фотоники)»

Заведующий кафедрой наноинженерии  
д.ф.-м.н., доцент

Павельев В.С.  
« 6 » апреля 2026 г.

Научный руководитель  
д.ф.-м.н., профессор

Головашкин Д.Л.  
« 6 » апреля 2026 г.

Начальник методического отдела  
учебно-методического управления  
к.т.н., доцент

Вдовин Р.А.  
« 6 » апреля 2026 г.

Начальник отдела сопровождения  
научных исследований  
к.т.н., доцент

Родионов Л.В.  
« 06 » апреля 2026 г.