

На правах рукописи

Кривошеева Юлиана Юрьевна

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

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Самара— 2026

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» на кафедре прикладной математики.

Научный руководитель:

Головашкин Дмитрий Львович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», заведующий кафедрой прикладной математики.

Официальные оппоненты:

Кузнецов Павел Константинович, доктор технических наук, профессор федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет», профессор кафедры «Электромеханика и автомобильное электрооборудование»;

Полянский Иван Сергеевич, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное казённое военное образовательное учреждение высшего образования «Академия Федеральной службы охраны Российской Федерации», заместитель начальника факультета.

Ведущая организация:

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пензенский государственный университет», г. Пенза.

Защита состоится 29 июня 2026 года в 12:30 часов на заседании диссертационного совета 24.2.379.08, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», по адресу: 443056, г. Самара, Московское шоссе, 24.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке и на сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева»: https://ssau.ru/resources/dis_protection/krivosheeva.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2026 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
д.ф.-м.н., доцент

А.В. Дорошин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертационное исследование посвящено моделированию и оптимизации одного класса пространственно-вариантных структур, относящегося к описанию кристаллических решеток, разработке соответствующего программного комплекса и его применению для случая фотонно-кристаллических волноведущих структур.

Актуальность темы диссертации. 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 (самоколлимирующий свет (Raymond C. Rumpf, Javier Pazos, 2015; Volk A, Agha I, 2021-2022)), акустики (G.H. Yoon, 2007), машиностроения (градиентное заполнение для аддитивного производства (J. Lee, 2022)), вычислительной морфологии (анализ и манипуляция формой объектов (H. Hedberg, N. Vouaynaya, 2008-2009)). Известные 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 описывают лишь положение узлов в структуре и не учитывают геометрию узлов и материал заполнения. Поэтому представляется актуальным разработка математической модели пространственно-вариантных структур, которая будет учитывать как геометрию и материал заполнения структуры, так и иметь возможность учета дефектов в структуре.

Кроме того, 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, известны работы ряда иностранных авторов (Mohammed Abdelkader E (2019), Yosri A (2021), Kobayashi K (2012)), которые посвящены оптимизации конструкции моста (получению такой конструкции, которая меньше подвержена риску разрушения). Для этого использовались 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 (2017-2021)), 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 Г. А. Свиридюк «Обратная задача для уравнений Баренблатта-Желтова-Кочиной на графе» (2007) также применяются 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 (J. Holland, M. Vose, Ю.Ю. Петров, А.Ф. Чипига).

Выбор уравнений Максвелла обусловлен тем, что они являются общей моделью электродинамики и оптики. Основным методом их численного решения в настоящий момент является метод конечных разностей во временной области (finite-difference time-domain или FDTD), представленный впервые в работе К.Уеэ «Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media» 1966 г, и развивавшейся в работах А.Тайлове. Выбирая программный комплекс, реализующий FDTD-метод, остановим внимание на пакете Ansys Lumerical, который хоть и является коммерческим, но позволяет гибко моделировать различные части FDTD-метода, задавать неоднородную сеточную область, имеет возможности для 2D моделирования, а также позволяет делать программные «надстройки», что открывает широкие возможности для решения обратных задач.

Для решения обратных задач дифракции 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. Первая такая модель принадлежит автору генетического алгоритма Джону Холланду (John Holland) (1989) и описывает ожидаемое поведение генетического алгоритма – вероятность возникновения популяции с теми или иными свойствами в следующем поколении. В дальнейшем появлялись все более усовершенствованные модели как продолжающие идеи Холланда (2003-2005; Ю.Ю. Петров, А.Ф. Чипига, Р.А. Воронкин), так и основанные на других идеях (цепях Маркова (А.Е. Ник, М.Д. Вое; 1992)), матричном представлении генетических операторов (М.Д. Вое; 1991)). Так же модели генетических алгоритмов используются для предсказания оптимальных параметров работы алгоритма (числа особей в популяции (Ю.Ю. Петров, А.Ф. Чипига; 2005), вероятностей скрещивания и мутации (J.D. Schaffer; 1989)).

В последнее время наблюдается заметное расширение применения FDTD для моделирования искусственных и природных структур на оптических длинах волн. 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, оптические переключатели на основе фотонно-кристаллического резонатора, оптические фильтры и др.

К сожалению, эффективность (под которой понимается отношение интенсивности на выходе элемента к интенсивности, подаваемой на вход) известных элементов невелика. Добиваясь ее повышения, принято использовать различные процедуры оптимизации, в том числе и генетические. Однако, 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, поэтому предварительный анализ алгоритма с помощью его математической модели представляется актуальным. Кроме того, в известной литературе по генетической оптимизации фотонно-кристаллических элементов 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. Поэтому представляется перспективным учет технологических особенностей изготовления структур, а также параметров метода решения прямой задачи дифракции (например, дискретизации вычислительной области в FDTD-методе) при решении обратной задачи.

Область исследований соответствует направлениям исследований паспорта научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ в части пунктов: 1 – «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений», 2 – «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий»; 3 – «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента».

Объектом исследования в диссертационной работе являются модели пространственно-вариантных структур.

Предметом исследования в диссертационной работе являются методы решения обратной задачи дифракции на этих структурах методом математического моделирования.

Целью диссертационной 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.

Методы исследования, использованные в диссертационной работе, основаны на использовании трех математических моделей: модели выбранного класса пространственно-вариативной структуры с дефектами, которая применяется для моделирования фотонно-кристаллических элементов; уравнений Максвелла, которые применяются для решения прямой задачи дифракции, и математическая модели генетического алгоритма, которая используется при решении обратной задачи для оценки числа особей в популяции в генетическом алгоритме.

Задачи диссертационной работы

1. Разработать математическую модель одного класса пространственно-вариативной 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-вариативной 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 диссертационной 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 используются в учебном процессе на кафедре «Наноинженерии» и в «Передовой инженерной аэрокосмической школе» Самарского университета.

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, который обеспечивался 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).

Связь диссертационной работы с планами научных исследований

Диссертационная работа выполнена 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)).

Публикации по теме диссертации

Результаты диссертации опубликованы в 12 работах, из них 4 работы опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России, 7 работ опубликованы в материалах и трудах Международных и Всероссийских конференций, получено одно свидетельство о регистрации программ для ЭВМ.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и приложений. Объем диссертации – 141 страница. Диссертация содержит 23 таблицы, 48 рисунков и список литературы из 141 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, определена цель и сформулированы задачи работы, изложены научная новизна и практическая значимость полученных результатов. Приводятся основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена математическим моделям, используемым в работе.

Первая модель – авторская модель выбранного класса пространственно-вариативной структуры (кристаллическая решетка с дефектами). Модель основана на решетке Браве и учитывает геометрию узлов структуры, материал заполнения, линейные и локальные дефекты. Произвольный узел решетки Браве имеет вид: $\mathbf{r}(l) = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – базисные векторы решетки, l_1, l_2 – целые числа. Тогда всю структуру можно описать как множество векторов решетки Браве: $L = \{\mathbf{r}_{ij}: \mathbf{r}_{ij} = i\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}$, где N_x и N_y – количество узлов в решетке по горизонтали и вертикали. Введем линейный дефект (который обусловлен извлечением узлов из решетки вдоль луча) состоящий из M узлов в решетку L : $D = \{\mathbf{r}_{ij}: \mathbf{r}_{ij} = i_m \mathbf{a}_1 + j_m \mathbf{a}_2: m = \overline{1, M}, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}$. Новая структура с линейным дефектом представляет собой разность множеств L и D : $\tilde{L} = L \setminus D$. Локальный дефект подразумевает изменение радиусов и положения центров в некотором круге с радиусом значительно меньшим линейных размеров всей решетки. Для его введения предположим, что 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:

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

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

Вторая модель – модель генетических алгоритмов. Математические модели генетических алгоритмов строятся для математического исследования и осмысления самого алгоритма. Рассмотренные в главе модели описывают ожидаемое поведение генетического алгоритма – вероятности возникновения той или иной популяции в следующем поколении. Так же модели генетических алгоритмов используются для предсказания оптимальных параметров работы алгоритма.

Вначале приводится описание самого алгоритма и его стандартных этапов:

- Отбор. Отбор N особей для скрещивания в настоящем исследовании происходит по методу колеса рулетки.
- Скрещивание. Для получения новой (дочерней) особи, особи с номерами i и $i+1$ из набора, полученного в результате первого этапа (родительские), подвергаются одноточечному скрещиванию.
- Мутация. Для мутации с вероятностью pm выбираются гены из всей дочерней популяции, полученной на втором этапе, и их значения заменяются на случайные из заданных диапазонов.
- Формирование нового поколения. Получение новой популяции связано с расчетом эффективности для всех особей, сгенерированных в ходе предыдущих этапов текущей итерации алгоритма, и их селекции. В ходе последней новое поколение формируется из 10% лучших особей предыдущего поколения (прошлая итерация) и 90% особей с наилучшим значением эффективности из полученного набора.

Далее внимание уделяется обзору математических моделей генетических алгоритмов. Первая такая модель представлена автором алгоритма Дж. Холландом. Его модель описывает ожидаемое поведение генетического алгоритма. В последствии идеи Холланда развивались в работах А.Ф. Чипиги, Ю.Ю. Петрова, Р.А. Воронкина, а также появлялись новые подходы к построению моделей генетических алгоритмов, например, цепи Маркова (Nix A. E., Vose M. D.) или матричное представление генетических операторов (Vose M. D.).

Особое внимание уделено обзору класса моделей, предназначенных для оценки параметров генетического алгоритма (вероятностей скрещивания и мутации, числу особей в поколении). Далее в настоящей работе будет проводиться исследование границ адекватности модели А.Ф. Чипиги и Ю.Ю. Петрова для конкретной предметной области фотонных кристаллов. Приведем эту модель:

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

где $\lceil \cdot \rceil$ – операция округления до целого в большую сторону, N – число особей в поколении, L – длина хромосомы особи, а $P(S_L^N)$ 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 – k -ый бит j ой хромосомы (авторы модели рекомендуют брать 0,99).

Третья модель – уравнения Максвелла в дифференциальной форме. Данная модель выбрана так как она является общей моделью для оптики и

электродинамики. Для двумерного случая и ТЕ-поляризации уравнения Максвелла имеют вид (2):

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial x}; \quad \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial y}; \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right), \quad (2)$$

Вторая глава посвящена обзору FDTD-метода и его компонент.

Для двумерного случая для ТЕ-поляризации разностная схема Yee (3) имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{H_z|_{i,j}^{n+1} - H_z|_{i,j}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{\mu_0\mu_{i,j}} \left(\frac{E_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - E_y|_{i-0.5,j}^{n+0.5}}{\Delta x} + \frac{E_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - E_x|_{i,j-0.5}^{n+0.5}}{\Delta y} \right); \\ \frac{E_x|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - E_x|_{i,j+0.5}^{n-0.5}}{\Delta t} &= \frac{H_z|_{i,j+1}^n - H_z|_{i,j}^n}{\varepsilon_0\varepsilon_{i,j+0.5}\Delta y}; \quad \frac{E_y|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - E_y|_{i+0.5,j}^{n-0.5}}{\Delta t} = \frac{H_z|_{i,j+1}^n - H_z|_{i,j}^n}{\varepsilon_0\varepsilon_{i+0.5,j}\Delta x}; \end{aligned} \quad (3)$$

Так же внимание в главе уделяется учету дисперсии материала, наложению поглощающих PML (Perfectly Matched Layer) слоев, заданию падающей волны по технологии TF/SF (total field/scattered field), а также наложению неравномерной сеточной области, которая реализуется в пакете Ansys Lumerical.

Кроме того, 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).

Особое внимание в главе уделяется способу согласования FDTD-метода и генетического алгоритма. особенностью, которого является наложение дополнительного условия на выбор дискретизации сеточной области в FDTD методе с учетом результатов работы генетического алгоритма, чем обуславливается согласование обоих методов. После формирования очередного нового поколения в генетическом алгоритме 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, то происходит сгущение сеточной области.

Третья глава посвящена моделированию и оптимизации фотонно-кристаллических элементов «волноводного» типа. 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, узел пересечения и узел ввода излучения.

В начале главы проводится исследование границ адекватности модели (1). Ее теоретическое предсказание дает 10 особей в поколении для каждого элемента. Вычислительный эксперимент также показал, что наилучшее число особей в популяции в генетическом алгоритме для рассматриваемых элементов равно 10. Следовательно, модель (1) пригодна для оценки размера популяции при расчете фотонно-кристаллических элементов «волноводного» типа. Остальные параметры генетического алгоритма были найдены эмпирически в результате

вычислительных экспериментов: вероятность скрещивания $p_c=0,95$, вероятность скрещивания $p_m=0,05$, а для формирования нового поколения бралось 10% особей из старого поколения и 90% особей, полученных в результате скрещивания и мутации. В качестве функции пригодности бралась эффективность элемента – отношение интенсивности сигнала на выходе элемента к интенсивности сигнала поданного на вход этого волновода.

Особое внимание уделяется обоснованию необходимости модификации стандартного генетического алгоритма, которая заключается в согласовании с FDTD методом для расчета фотонно-кристаллических элементов. На примере изгибов фотонно-кристаллических волноводов показано, что полученная в результате генетической оптимизации топология характеризуется малым размером каверн, непригодных для изготовления. Поэтому предложено ввести нижнюю границу R_0 (минимальное значение) радиуса каверн, которые могут быть изготовлены в силу известной технологии и правило адаптации сеточной области в зависимости от результатов генетической оптимизации.

В результате генетической оптимизации по предложенному способу согласования генетического алгоритма и FDTD метода для всех элементов получена топология, которая обеспечивает передачу сигнала практически без потерь (эффективность более 99% для изгибов волноводов и узла пересечения, эффективность 89% для узла ввода излучения, рисунки 1-4).

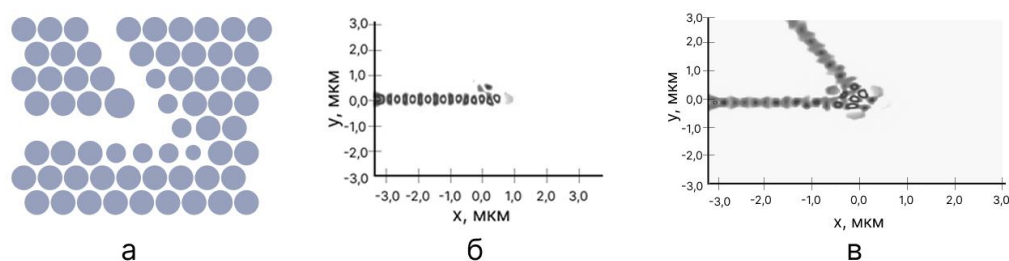


Рисунок 1 – Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на 60° : (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поля до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

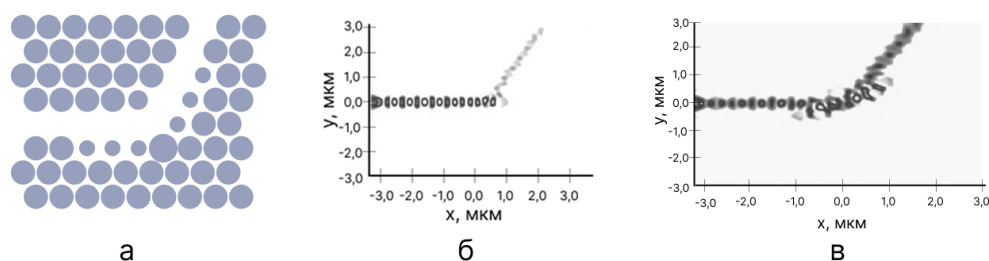


Рисунок 2 – Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на 120° : (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поле до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

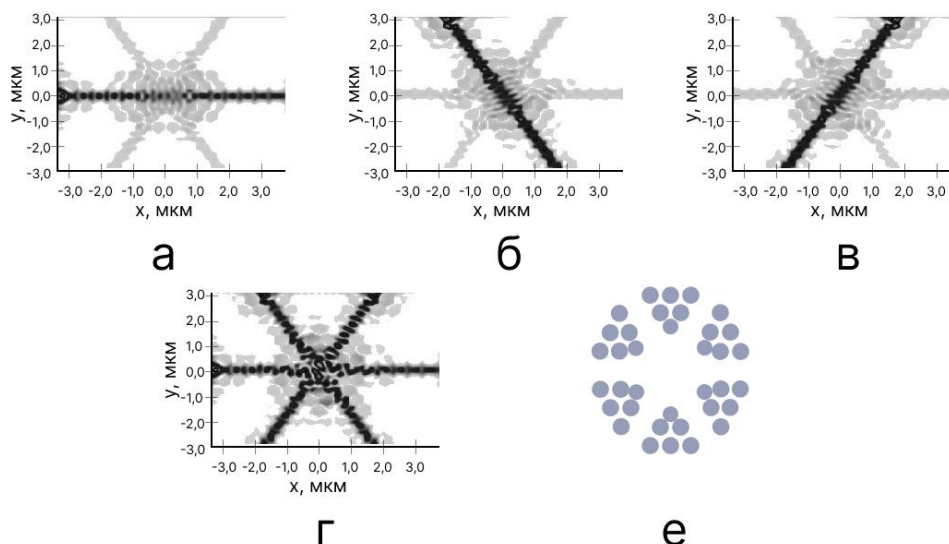


Рисунок 3 – Результаты второго эксперимента: (а-в) дифракционные картины случая работы волноводов по-отдельности, (г) дифракционная картина случая работы трех волноводов одновременно, (д) модель пересечения после оптимизации

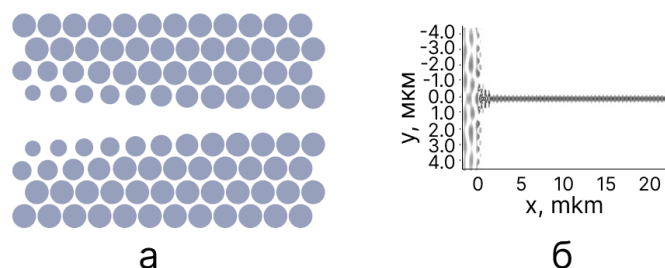


Рисунок 4 – Результаты второго эксперимента по оптимизации узла ввода: (а) – топология, (б) – дифракционная картина

Так же в главе производится расчет фотонно-кристаллических элементов с помощью детерминированных методов оптимизации (метода покоординатного спуска и метода Хука-Дживса) и выдвигается предположение: детерминированные методы оптимизации подойдут для расчета элементов «волноводного» типа, которые не изменяют поданное на вход излучение, а просто передают его на выходной порт. Вычислительные эксперименты показали – детерминированные методы оптимизации работают значительно быстрее генетического алгоритма, однако добиться такого же значения эффективности, как и при генетической оптимизации удалось только для узла пересечения волноводов и для узла ввода излучения. Поэтому исходное предположение нуждается в уточнении: 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).

Четвертая глава посвящена моделированию и оптимизации логических элементов на фотонных кристаллах, а именно Y-образному элементу «HE» и элементу «HE» на кристалле с самоколлимацией.

На примере Y-образного элемента «HE» показана необходимость модификации стандартного генетического алгоритма для расчета фотонно-кристаллических элементов. Запуск стандартного алгоритма хоть и привел к высокой эффективности (99%), однако данное решение оказалось неустойчивым: полученные каверны оказались слишком малы, чтобы быть хорошо описанными сеточной областью (необходим учет количества узлов сеточной область на одну каверну) и быть изготовленными (необходим учет минимального размера, который может быть изготовлен).

В результате запуска алгоритма с адаптацией сеточной области Yee, лишённого прежних недостатков, были получены топологии элементов со следующими значениями эффективности: 66% для Y-образного элемента «HE» и 81% для элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией. При этом алгоритм сошелся на 85 и 77 поколении соответственно. Дифракционные картины для оптимизированных элементов представлены на рисунках 5 и 6.

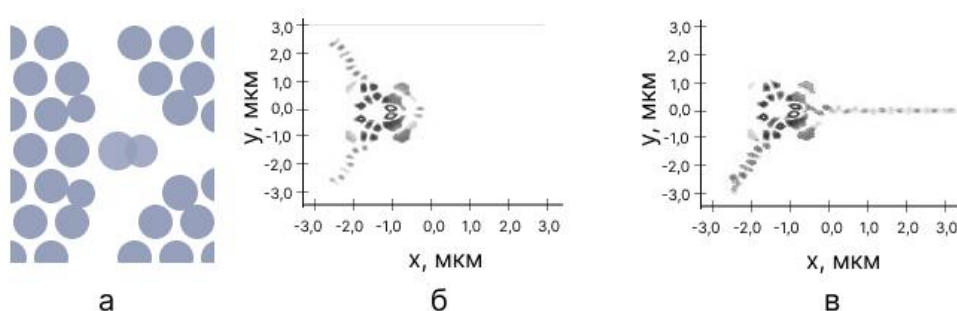


Рисунок 5- Результаты оптимизации Y-образного логического элемента «HE»: (а) модель элемента после оптимизации, (б) дифракционная картина, соответствующая логическому 0 на выходе, (в) дифракционная картина, соответствующая логической 1 на выходе

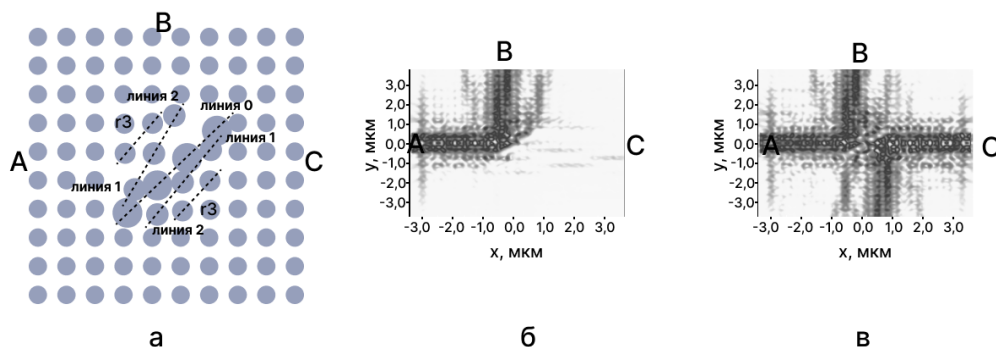


Рисунок 6 - Результаты оптимизации логического элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией (а) топология элемента, (б) распределение квадрата модуля электрического поля для логической 1, (в) распределение квадрата модуля электрического поля для логического 0

Сравнение с результатами, полученными детерминированными методами оптимизации (эффективностью и временем работы), показало, что такие методы не

применимы для расчета фотонно-кристаллических логических элементов: хоть они и работают быстрее, значение эффективности оказывается значимо ниже результата генетической оптимизации (в среднем 30%).

Так же в главе приведена проверка адекватности модели (1). Теоретическое предсказание по данной модели – 11 особей в популяции для обоих элементов. Однако вычислительный эксперимент показал, что наилучшее значение эффективности достигается при 12 особях для Y-образного элемента «HE» и при 8 для элемента «HE» на кристалле с самоколлимацией. Поэтому можно сделать вывод, что модель (1) нуждается в доработке.

В конце главы представлен авторский программный комплекс для моделирования и оптимизации выбранного класса пространственно-вариантных структур. Программный комплекс включает в себя четыре блока: блок графического интерфейса, блок моделирования структуры, блок расчета эффективности особи для генетического алгоритма и самого блока генетического алгоритма. Второй и третий блок связан с внешним пакетом Ansys Lumerical, в котором решается прямая задача дифракции: второй блок передает всю информацию о решетке и дефектах в ней, по которой в Ansys Lumerical строится модель структуры, третий блок передает набор генов особи (радиус и расположение каверн), а затем получает значение эффективности данной особи, которое затем передается в блок генетического алгоритма.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты, полученные в работе:

1. Разработана математическая модель одного-класса пространственно-вариативной структуры (кристаллической решетки). 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 в частности 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 (кристаллических решеток) 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-вариативной 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° и 120° , 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 «НЕ», что в 4 раза больше эффективности до оптимизации,
- 81% для логического элемента «НЕ» на кристалле с самоколлимацией, что в 4 раза больше эффективности до оптимизации.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

Статьи в изданиях, индексируемых Scopus и ВАК:

1. 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.
2. 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.
3. Application of Deterministic Optimization Methods for the Design Photonic Crystal Waveguide Fragments with Bends / Yu.Yu. Krivosheeva, E.S. Biryukov, D.L. Golovashkin, V.S. Pavelyev // *Optical Memory and Neural Networks*. - 2025, - Vol. 34, Suppl. 3, - P. S377–S384.
4. Кривошеева, Ю.Ю. Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур / Ю.Ю. Кривошеева // *Компьютерная оптика*. – 2026. – Т. 50, № 1. 1189.

Работы в материалах и трудах Международных и Всероссийских конференций:

5. Кривошеева, Ю.Ю., Головашкин Д.Л. Расчет волноводных фотонно-кристаллических структур с изгибами с помощью генетического алгоритма // 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.
6. Krivosheeva Yu.Yu. Genetic optimization of the Y-shaped photonic crystal logic element NOT / Y.Y. Krivosheeva, D.L. Golovashkin, V.S. Pavelyev // *The 30th International Conference on Advanced Laser Technologies*. — 2023. — P. 274.

7. Мокшин, П.В., Кривошеева Ю.Ю. Разработка и оптимизация фотонно-кристаллических кремниевых ИЛЭ / П.В. Мокшин, Ю.Ю. Кривошеева, С.И. Харитонов // XXI Всероссийская молодежная Самарская конкурс-конференция по оптике, лазерной физике и физике плазмы, посвященная 300-летию РАН. — 2023. — С. 107-108.
8. Кривошеева, Ю.Ю. Сравнение двух подходов к расчету интерференционных логических элементов на фотонно-кристаллических структурах / Ю.Ю. Кривошеева, Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев // XXI Международная конференция по голографии и прикладным оптическим технологиям. — 2024. — Т. 1. — С. 124-125.
9. Кривошеева, Ю.Ю. Расчет узла пересечения фотонно-кристаллических волноводов с помощью генетического алгоритма / Ю.Ю. Кривошеева, Д.Л. Головашкин, В.С. Павельев // X Международная конференция и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2024). — 2024. — Т. 1. 010642.
10. 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.
11. 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 // X Международная конференция и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2025). — 2025. — Т. 1. 011692.

Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ:

12. 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.