

快速遗传算法优化计算二维光子晶体*

龚春娟[†] 胡雄伟

(中国科学院半导体研究所 集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

摘要: 采用平面波展开法和快速遗传算法优化设计具有大禁带的二维光子晶体. 从随机产生的晶体结构开始, 在遗传算法中引入占空比控制算符和傅里叶变换数据备份机制, 快速搜索到了具有较大绝对禁带的正方晶格光子晶体, 其最大完全禁带的相对宽度值为 13.25%, 并且制备难度较低.

关键词: 二维光子晶体; 光子带隙; 遗传算法; 平面波展开法

EEACC: 0290P; 4110; 4140

中图分类号: O47 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2006)06-1098-05

1 引言

光子晶体 (photonic crystals, PCs)^[1,2] 中因周期性结构而存在的频率禁带称为光子禁带 (photonic band gap, PBG), 光子禁带的存在是光子晶体具有广泛应用前景^[3~5] 的重要原因. 禁带越大, 可控光的频带也越宽, 因此如何设计合适的晶体结构以获得大的光子禁带一直是研究和应用的重点与热点^[6].

传统的光子晶体设计思路一般是采用有限的几种对称图形 (如圆柱、正方柱等) 作为晶格结构或原胞, 通过调整这些散射体的几何参数尽量获得大禁带的光子晶体, 进而从中经验性地提炼可能的设计规律, 然后能指导性地寻找更好的新结构. 这些规律包括通过降低晶格结构、原胞和材料^[7] 的对称性可以使光子晶体的能带增加、能级退简并甚至产生新的能带.

本文将光子晶体原胞表示为 10×10 像素型结构, 通过配置像素填充材料 (介质或空气) 获得特定的光子晶体结构. 采用平面波展开法 (plane wave expansion method, PWM)^[8] 和傅里叶变换位移特性计算光子禁带, 并分析了像素型光子晶体的禁带分布特性. 进而, 在传统遗传算法^[7,9,10] 中引入占空比控制算符和傅里叶变换数据备份机制, 高效快速地搜索到易于制备的具有大禁带的正方晶格二维光子晶体.

2 理论模型与计算方法

2.1 原胞结构

本文考虑由两种介电材料 (硅和空气) 构成的正方晶格二维光子晶体. 与通常人工设计思路不同, 原胞被分割为 $N \times N$ 个正方形像素, 每个像素中随机填充硅 ($\epsilon = 11.56$) 或空气 ($\epsilon = 1.0$) 即可形成特定的原胞结构. 此时, 光子晶体的结构设计问题等价于像素中介电材料的选择问题. 显然, 当 N 足够大时原则上可以表达任意形状的结构, 但此时搜索规模往往呈指数形式增长, 而且像素粒度过小也给工艺制备带来了难度. 本文综合考虑运算能力和制备工艺的限制, 研究反演对称条件下大粒度像素 ($N = 10$) 的光子晶体结构设计问题 (如图 1(a) 所示).

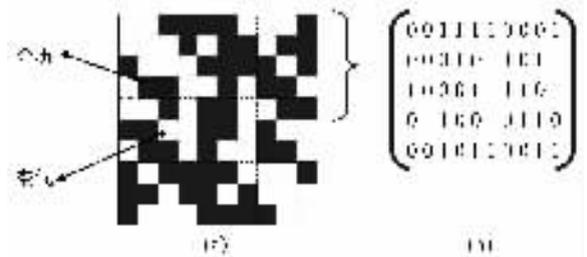


图 1 10×10 反演对称性原胞示意图 (a) 结构示意图; (b) 基因表达

Fig. 1 An example of 10×10 unit cell structure with reverse symmetry (a) Pixel structure; (b) Gene representation

* 国家自然科学基金资助项目 (批准号: 60477035, 60507006)

[†] 通信作者. Email: lucy@mail.semi.ac.cn

2005-10-24 收到, 2005-12-16 定稿

2.2 平面波展开法

对上述像素型光子晶体,采用平面波展开法计算其能带.将 Bloch 定理应用于 Maxwell 方程组可分别得到 TE, TM 偏振波的本征方程:

$$\sum_{G'} |k + G| |k + G'| \epsilon^{-1}(G - G') h_1(G') = \frac{\omega^2}{c^2} h_1(G), \quad \text{TM 波} \quad (1)$$

$$\sum_{G'} |k + G| \cdot |k + G'| \epsilon^{-1}(G - G') h_2(G') = \frac{\omega^2}{c^2} h_2(G), \quad \text{TE 波} \quad (2)$$

求解该方程组即可分别得到 TM, TE 偏振波的色散关系.

上述方程的求解中,介电常数倒数的傅里叶变换 $\epsilon^{-1}(G - G')$ 至关重要.对像素型光子晶体而言,可以根据位移特性来计算任意分布的介电常数倒数的傅里叶变换 $\epsilon^{-1}(G)$.

设 P_a 为原胞中填充介质 ϵ_a 的像素集合.首先,计算中心点像素 $p_0 \in P_a$ (图 2) 介电常数 $\epsilon_0(x, y)$ 的傅里叶变换 $\epsilon_0(G)$, $\epsilon_0(x, y)$ 表示为:

$$\epsilon_0(x, y) = \epsilon_b + (\epsilon_a - \epsilon_b) S(x, y) \quad (3)$$

其中:

$$S(x, y) = \begin{cases} 1, & |x| \leq \frac{a}{2N}, |y| \leq \frac{a}{2N} \\ 0, & |x| > \frac{a}{2N}, |y| > \frac{a}{2N} \end{cases} \quad (4)$$

可求出 $\epsilon_0(x, y)$ 的傅里叶变换 $\epsilon_0(G)$ 为:

$$\epsilon_0(G) = \begin{cases} f(\epsilon_a - \epsilon_b) \text{sinc}(\frac{G_x a}{2N}) \text{sinc}(\frac{G_y a}{2N}), & G \neq 0 \\ f(\epsilon_a - \epsilon_b) + \epsilon_b, & G = 0 \end{cases} \quad (5)$$

其中 占空比 $f = (\frac{1}{N})^2$.

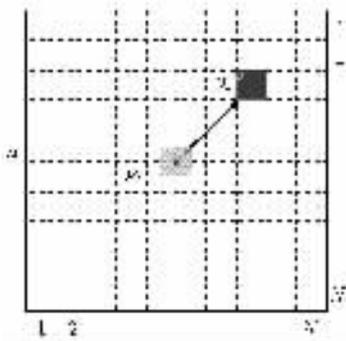


图 2 位移特性

Fig.2 Shift property

根据位移特性,任一填充 ϵ_a 介质的像素 $p_r \in P_a$ (图 2, 中心点位置为 r) 的傅里叶变换为:

$$\epsilon_r(G) = \epsilon_0(G) e^{iG \cdot r} \quad (6)$$

由(6)式可以计算像素型光子晶体介电常数分布的傅里叶变换 $\epsilon(G)$ 为:

$$\begin{aligned} \epsilon(G) &= \sum_{r \in P_a} \epsilon_r(G) = \sum_r \epsilon_r(G) \delta(r) \\ &= \epsilon_0(G) \sum_r e^{iG \cdot r} \delta(r) \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $\delta(r) = \begin{cases} 1, & r \in P_a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$

设 $e(G) = [e^{iG \cdot r_1}, e^{iG \cdot r_2}, \dots, e^{iG \cdot r_L}]$, r_k 表示原胞中第 k 个像素的中心点位置;某一原胞结构的像素介电常数分布表示为 $\delta = [\delta(r_1), \delta(r_2), \dots, \delta(r_L)]$, 则(7)式等价于

$$\epsilon(G) = \epsilon_0(G) e(G) \cdot \delta \quad (8)$$

由于 $e(G)$ 可以离线计算并存储, (8) 式表明, 给定任意原胞结构 δ 后, 即可采用加法计算 $\epsilon(G)$, 从而大大降低运算量.

2.3 占空比特性

传统设计过程已经发现占空比在某种程度上影响光子晶体的禁带结构^[11], 对像素型表示的二维光子晶体, 本文随机统计了不同占空比下禁带的存在情况(每种占空比下随机产生 100 个晶体结构, 统计存在绝对禁带的晶体数目所占比例). 由图 3 可见, 光子晶体占空比在一定范围内(对 10×10 的晶体, 占空比有效范围为 $[0.2, 0.66]$), 光子晶体才会存在禁带, 基于此可以指导遗传算法进行更为有效的搜索.

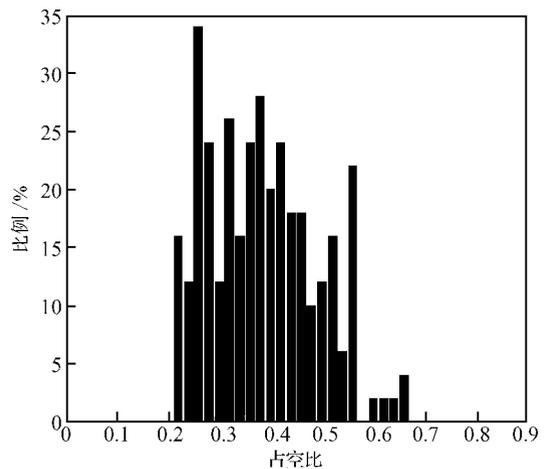


图 3 光子禁带与占空比关系

Fig. 3 Relationship between PBG appearance and filling ratio

3 快速遗传算法

由于像素型光子晶体的结构设计空间随 N 增

加而呈指数爆炸趋势(例如具有反演对称性的光子晶体, $N=10$ 时其可能的结构总数约为 10^{15}), 很难用穷尽枚举的方法来获得最优结构. 而遗传算法作为一类鲁棒性的全局搜索方法^[9,10~13] 则显示了求解该类问题的潜力. 本文结合平面波展开法特点和占空比特性, 采用一种新的快速遗传算法(rapid genetic algorithm, RGA)优化设计反演对称性条件下具有较大完全禁带的光子晶体, 算法流程如图 4 所示, 种群大小 100, 最大迭代数 1000, 采用保留精英个体的轮盘赌选择法, 交叉率 0.9, 变异率 0.05.

4 结果与分析

对正方晶格二维光子晶体, 采用快速遗传算法搜索到的原胞结构如图 5(a) 所示, 占空比为 40%, 对应的色散关系见图 5(b), 其中, 实线对应 TE 波, 虚线对应 TM 波. 该结构最大禁带的中心频率为 0.6645, 禁带宽度为 0.0881, 最大禁带的相对值为 13.25%. 同等制备难度下, 这是目前所设计出的绝对禁带相对较宽的结构.

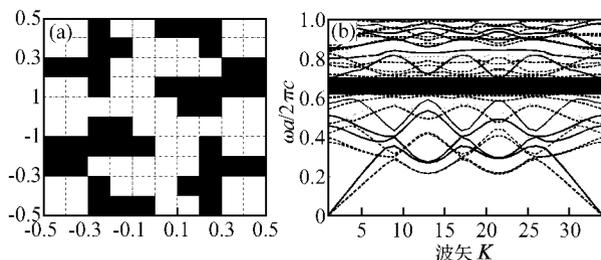


图 5 最优光子晶体 (a)原胞结构;(b)禁带结构

Fig.5 The best 2D photonic crystal (a) Unit cell structure;(b) Photonic band structure

图 6 为 4×4 原胞结构示意图. 通过分析其结构特点可以发现, 该结构实际是将高折射率正方形介质柱通过扭曲变换而得到的新的介质分布. 以往研究表明, 正方晶格中以正方形散射体拥有最大绝对禁带^[6], 该结构正是通过进一步降低正方形散射体的结构对称性而得到了大的绝对禁带.

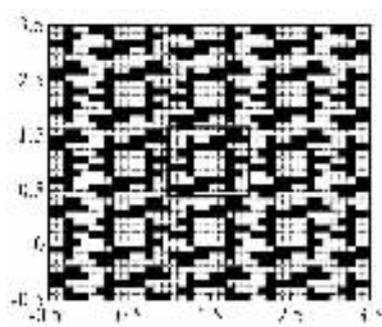


图 6 4×4 原胞结构示意图

Fig.6 4×4 unit cell structure

和一般遗传算法相比, 快速遗传算法具有很好的搜索优化特性, 如表 1 所示.

表 1 遗传算法比较

Table 1 Comparison of genetic algorithms

算法	最大绝对禁带	绝对禁带相对值/%	运行时间/h
SGA	0.027	5.83	50.8
RGA	0.088	13.25	35.2

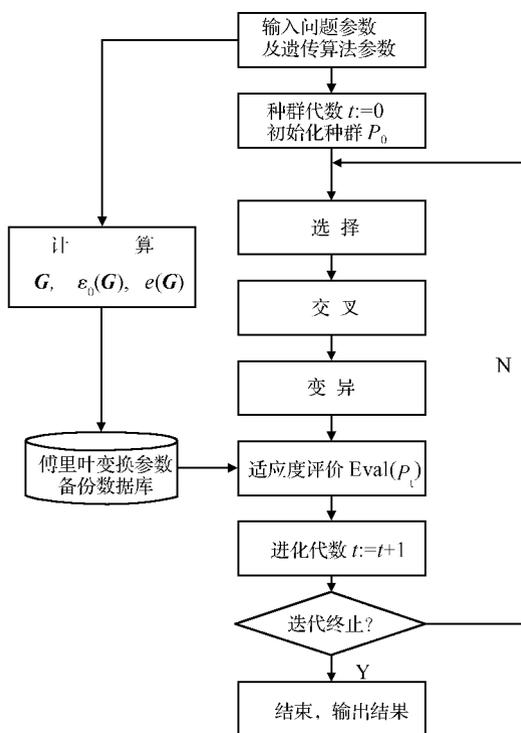


图 4 快速遗传算法流程

Fig.4 RGA workflow

其中, 遗传个体采用二进制字符串形式表示, 1 和 0 分别表示硅和空气, 对反演对称性光子晶体, 个体长度为 50(图 1(b)). 每个遗传个体采用平面波展开法(平面波个数取为 625)计算对应晶体最大绝对禁带的相对值, 以此作为个体的适应度.

与一般遗传算法(simple genetic algorithm, SGA)^[7,9,10] 有所不同, 在快速遗传算法中设计了组合变异算子. 首先, 对个体应用典型二进制变异算子加以变异^[9]; 然后, 随机调整个体中的基因值, 其占空比控制在有效范围内($[0.05, 0.7]$).

另外, 在遗传算法启动时, 计算并存储傅里叶变换所需的基本参数如 $G, \epsilon_0(G), e(G)$; 对每个晶体结构, 直接根据(8)式快速计算其光子禁带, 以提高运算速度.

这是因为通过引入占空比控制算符,使遗传算法的搜索更加趋向于在有效占空比范围内进行,从而降低了一般遗传算法中常见的“遗传偏移”和“早熟”现象;新的变异算子也使得种群保持较好的多样性,因此即使在进化的后期算法也可不断跳出局部极值点,如图7所示,从而寻找到具有大禁带的光子晶体结构。

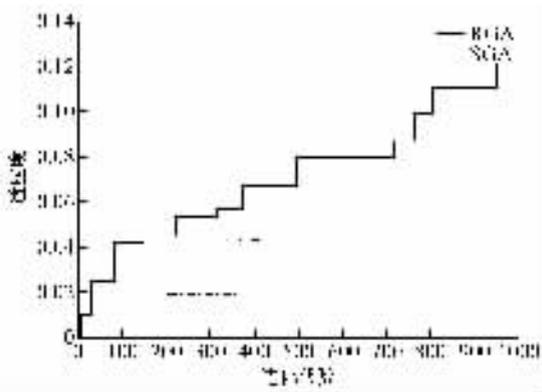


图7 遗传算法收敛曲线

Fig.7 Converging curves of RGA and SGA

表1还比较了快速遗传算法和一般遗传算法的运行速度.可以看到,由于傅里叶变换参数备份机制的引入,遗传算法搜索速度得到了相当程度的改善(提高44%),因而可以应用于更大像素规模的结构设计。

5 小结

通过引入物理思想,设计了一种快速遗传算法并获得了易于制备的具有大禁带结构的二维正方晶格光子晶体(10×10 像素,最大禁带相对值13.25%)。今后,可以将更多的领域知识融入到遗传算法中以进一步提高算法搜索效果和效率;同时,还可将类似的方法拓展到对三角晶格等的结构优化研究中。

参考文献

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(20): 2059
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(23): 2486
- [3] Zhang Wanyun, Ji Jiarong, Yuan Xiaodong, et al. Fabrication technique of p-type(100) silicon-based two dimensional photonic crystals. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2005, 26(5): 941 (in Chinese) [张晚云, 季家榕, 袁晓东, 等. 利用 p 型(100) 硅片制备二维光子晶体的工艺. *半导体学报*, 2005, 26(5): 941]
- [4] Wu L, Krauss T F. Superprism phenomena in planar photonic crystals. *IEEE J Quantum Electron*, 2002, 38(7): 915
- [5] Vodo P, Parimi P V, Lu W T, et al. Microwave photonic crystal with tailor-made negative refractive index. *Appl Phys Lett*, 2004, 85(10): 1858
- [6] Wang Rongzhou, Wang Xuehua, Gu Benyuan. Effects of shapes and orientations of scatters and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals. *J Appl Phys*, 2001, 90(9): 4307
- [7] Ye Zhuo, Shen Linfang, He Sailing. Design for 2D anisotropic photonic crystal with large absolute band gaps by using a genetic algorithm. *The European Physical Journal B*, 2004, 37: 417
- [8] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(25): 3152
- [9] Holland J H. *Adaptation in natural and artificial systems*. Ann Arbor, University of Michigan Press, 1975
- [10] Bäck T, Hammel U, Schwefel H P. Evolutionary computation: comments on the history and current state. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1997, 1(1): 3
- [11] Chen Qin, Huang Yongzhen, Guo Weihua, et al. Modulation of photonic bandgap and localized states by dielectric constant contrast and filling factor in photonic crystals. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2003, 24(12): 1233
- [12] Sanchez-Dehesa J, Hakansson A, Sanchez L. Inverse design of photonic devices by using a genetic algorithm. *Photonic Crystal Materials and Nanostructures, Proceedings of SPIE*, 2004, 5450: 200
- [13] Preble S, Lipson M, Lipson H. Two-dimensional photonic crystals designed by evolutionary algorithms. *Appl Phys Lett*, 2005, 86: 061111-1-3

Large Two-Dimensional Photonic Band-Gaps Designed by Rapid Genetic Algorithms*

Gong Chunjuan[†] and Hu Xiongwei

(*State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

Abstracts: The plane wave expansion method (PWM) and rapid genetic algorithm (RGA) are used to design two-dimensional photonic crystals with large complete band-gaps. The algorithms evolve from randomly generated photonic crystals and integrate a filling fraction controlling operator and Fourier transform data storage mechanism to run efficiently and effectively. The obtained optimal photonic crystal has a large band gap with a relative width of 13.25% and can be easily fabricated due to large pixel.

Key words: two-dimensional photonic crystals; photonic band gap; rapid genetic algorithm; plane wave expansion method
EEACC: 0290P; 4110; 4140

Article ID: 0253-4177(2006)06-1098-05

* Project supported by and the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60477035, 60507006)

[†] Corresponding author. Email: lucy@mail.semi.ac.cn

Received 24 October 2005, revised manuscript received 16 December 2005

©2006 Chinese Institute of Electronics