

## Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур

Ю.Ю. Кривошеева <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, 443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, д. 34

### Аннотация

Представлена математическая модель одного класса пространственно-вариантных структур, основанная на модели решетки Браве. Модель учитывает возможность ввода в структуру нелокальных и локальных дефектов, что позволяет использовать ее для моделирования и оптимизации фотонно-кристаллических элементов. Особое внимание уделено совместному использованию генетического алгоритма и FDTD-метода. Предлагаемое решение учитывает технологические ограничения на радиусы рассчитываемых каверн в кристалле, а также накладывает дополнительные условия на выбор размера сеточной области при изменении значений радиусов каверн в генетическом алгоритме, чем обуславливается согласование методов. Разработан программный комплекс для решения обратной задачи дифракции при расчете фотонно-кристаллических элементов. Для расчета элементов данный комплекс использует предложенные в статье модель и решение для согласования генетического алгоритма и FDTD-метода. С помощью программного комплекса в настоящей работе рассчитаны изгибы фотонно-кристаллических волноводов на 60° и 120°. Полученные в результате генетической оптимизации структуры характеризуются значениями эффективности в 99%, что в 33 и 11 раз больше эффективностей без оптимизации изгиба в 60° и 120° соответственно.

**Ключевые слова:** пространственно-вариативные структуры, решетка Браве, фотонные кристаллы.

**Цитирование:** Кривошеева, Ю.Ю. Моделирование и оптимизация одного класса пространственно-вариантных структур / Ю.Ю. Кривошеева // Компьютерная оптика. – 2026. – Т. 50, № 1. – 1889 – DOI: 10.18287/COJ1889.

**Citation:** Krivosheeva YuYu. Modeling and optimization of one class of spatially variable structures. Computer Optics 2026; 50(1): 1889. DOI: 10.18287/COJ1889.

### Введение

Современные инженерные задачи требуют разработки сложных конструктивных решений. Одним из перспективных направлений в этой области является использование пространственно-вариантных структур – математических моделей, в которых варьируются конструкционные характеристики (например, геометрия, материальные свойства, плотность или жесткость). Такие модели активно применяются в теории фотонных кристаллов [1], механике сплошных сред [2], обработке изображений [3] и вычислительной морфологии [4].

Для математического моделирования периодических структур среди прочего также используются решетки Браве [5 – 7], представляющие собой набор материальных точек в пространстве, повторяющихся с помощью трансляций. Произвольный узел двумерной решетки Браве имеет вид:

$$r(l) = a_1 l_1 + a_2 l_2, \tag{1}$$

где  $a_1, a_2$  – базисные векторы решетки,  $l_1, l_2$  – целые числа.

Однако данная модель описывает лишь положение точек без учета их физических свойств. Для учета физических свойств, которые изменяются периодически в какой-либо структуре, требуется переход в пространство обратной решетки [8]. Например, в работе [9] производился расчет запрещенной зоны фотонного кристалла методом разложения по плоским волнам. Для задания периодического изменения показателя преломления авторы раскладывали его в ряд Фурье с участием вектора обратной решетки  $G(h) = b_1 h_1 + b_2 h_2$ :

$$\varepsilon(r) = \sum_G \varepsilon(G) e^{iGr},$$

где  $b_1, b_2$  – базисные векторы решетки,  $h_1, h_2$  – целые числа.

Аналогичный подход в рамках рассмотрения математической модели решетки Браве и с разложением какой-либо функции, характеризующей физическое свойство в ряд Фурье, предложен в [10]. В данной работе авторы предлагают модель для синтеза пространственно-вариативной структуры, которая одновременно учитывает пространственную ориентацию, период решетки, степень заполнения и другие свойства периодической структуры во всём её объёме. Данный подход нашел широкое применение для синтеза фотонно-кристаллических устройств на кристаллах с самоколлимацией [11 – 13].

Автор настоящей работы считает предложенные подходы избыточными для математического описания регулярных фотонных кристаллов. Кроме того, предложенная в [10] модель не подходит для описания структур с линейными дефектами. Так, в настоящей статье представлена математическая модель двумерной пространственно-вариативной структуры, которая учитывает тип решетки, материал заполнения, а также имеет возможность описывать линейные дефекты и варьировать отдельные элементы структуры.

**1. Один класс пространственно-вариативной структуры**

Уточним математическую модель решетки Браве с учетом возможности введения в структуру дополнительных неоднородностей. Конкретизируя модель решетки Браве (1) и следуя обозначениям [5], назовем пару чисел  $[[l_1 l_2]]$  символом узла. Символ узла определяет координаты узла в решетке (рис. 1). Пусть  $a$  – период решетки,  $\varphi$  – угол между базисными векторами. Тогда, ограничиваясь в данной работе случаями квадратной и гексагональной решетки, отметим, что для квадратной решетки  $|a_1| = |a_2| = a, \varphi = 90^\circ$ , а для гексагональной  $|a_1| = |a_2| = a, \varphi = 60^\circ$ . Также отметим, что модель (1) описывает бесконечную решетку.

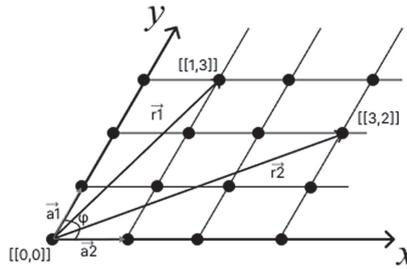


Рис. 1. Решетка Браве

Далее будем различать нелокальные и локальные дефекты, намереваясь рассчитывать с помощью данной модели фотонные кристаллы. Нелокальный дефект обусловлен его значительной протяженностью, а локальный подразумевает варьирование отдельных элементов структуры.

1.1. Нелокальные дефекты в решетке

Переходя от рассмотрения решетки с бесконечным количеством узлов к ограниченному 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:

$$L = \{r_{ij} = ia_1 + ja_2 : i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}\}.$$

Введем дефект в решетку  $L$ , состоящую из  $M$  узлов:  $D = \{r_{ij} = i_m a_1 + j_m a_2 : m = \overline{1, M}\}$ . Тогда новая структура с нелокальным дефектом (рис. 2) представляет собой разность множеств  $L$  и  $D$ :

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

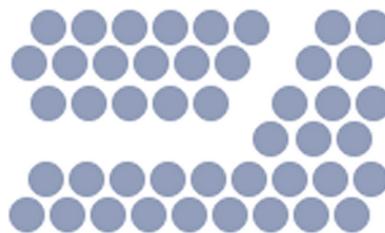


Рис. 2. Нелокальный дефект

1.2. Локальные дефекты

Подразумевая далее решение задачи оптимизации для ограниченного фрагмента кристалла, введем понятие локального дефекта (рис. 3). Пусть каждый узел решетки  $\tilde{L}$  представляет собой окружность радиуса  $R$ :  $(x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R$ , где  $r_{xi}, r_{yj}$  – координаты вектора  $r_{ij}$ . Тогда определим новое множество  $\tilde{L}_1$ :

$$\tilde{L}_1 = \{(x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R, r_{ij} = (r_{xi}, r_{yj}) : r_{ij} = ia_1 + ja_2\}.$$

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

$$A = \{(x - r_{xi})^2 - (y - r_{yj})^2 \leq R, r_{ij} = (r_{xi}, r_{yj}) : r_{ij} = ik a_1 + jk a_2, k = \overline{1, K}\}.$$

После изменения получим новое множество

$$\tilde{A} = \left\{ (x - r_{xu})^2 + (y - r_{yv})^2 \leq R_{uv}, r_{uv} = (r_{xu}, r_{yv}): r_{uv} = u_k a_1 + v_k a_2, k = \overline{1, K} \right\}.$$

Тогда окончательная структура имеет вид:

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



Рис. 3. Локальный дефект

### 2. Совместное применение генетического алгоритма и FDTD-метода

Для решения задачи оптимизации элементов на фотонных кристаллах будем одновременно использовать два численных метода: FDTD-метод для численного решения прямой задачи дифракции и генетическую оптимизацию для решения обратной задачи.

Метод FDTD [14] 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. Свяжем изложенную ранее модель решетки Браве с сеточной областью [15]. Зададим фотонно-кристаллическую 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 подложки,  $\varepsilon_1$  – показатель преломления материала каверн. Область  $circle_{ij}$  – это область каверны с номером  $ij, j = \overline{1, N_x}, i = \overline{1, N_y}$ , где  $N_x$  – количество каверн 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:

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

если решетка гексагональная, и

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

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  $\{(x_p, y_q) = (p\Delta x, q\Delta y): p = \overline{0, P}; q = \overline{0, Q}\}$ .

Классические схемы FDTD строятся на однородных сеточных областях, 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 [16 – 17]. Такие сетки позволяют учитывать точное геометрическое расположения объекта моделирования, делая ячейки меньше на границах раздела среды и объекта, а также уменьшают численную дисперсию. Если в ячейке  $ij$  проходит граница каверны (с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$ ) и подложки (с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$ ), то принято рассчитывать величину  $\varepsilon^{eff}$  – эффективную диэлектрическую проницаемость (диэлектрическую проницаемость, учитывающую  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ ), например по методу средневзвешенного объема [16] или методу Ю-Миттры [17]. Программный пакет Ansys Lumerical R1,

используемый в настоящей работе для решения прямой задачи дифракции, позволяет накладывать неоднородные сеточные области и регулировать их параметры.

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 – выбор наиболее приспособленных особей для передачи генов следующему поколению.
- Скрещивание – обмен генами между родителями для получения нового потомства.
- Мутация – замена значения гена в потомстве на случайное с целью обеспечения разнообразия и предотвращения преждевременной сходимости алгоритма.
- Формирование нового поколения – оставление некоторого процента лучших особей из предыдущего поколения и добавление новых особей, полученных в результате предыдущих этапов.

Этапы алгоритма повторяются либо пока не достигается максимальная эффективность, либо пока не генерируется наперед заданное максимальное количество поколений.

Отметим, что при расчете фотонно-кристаллических элементов следует учитывать технологические особенности их изготовления [18]. Так, радиус каверн не должен быть меньше некоторого  $R_0$  – минимального радиуса, который может быть изготовлен. Кроме того, следует также учитывать особенности сеточной области в FDTD-методе: слишком грубая сетка не подойдет для описания круглой формы каверны.

Таким образом, в настоящей работе предлагается совместное использование метода FDTD 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. Будем считать, что сеточная область хорошо описывает каверну, если на нее приходится не менее 10 узлов сетки. Тогда после формирования очередного нового поколения и перед расчетом функции пригодности (эффективности) для каждой особи в этом поколении проверим минимальное значение генов, которые отвечают за радиус каверн. Если для каверны с этим радиусом текущая сеточная область оказывается слишком грубой, то происходит сгущение сеточной области. Технологическое ограничение  $R_0$  «зашито» в оператор мутации: гены радиуса не могут изменить свое значение меньше, чем на  $R_0$ .

### 3. Программный комплекс

Для решения обратной задачи с помощью генетического алгоритма был написан собственный программный комплекс. Необходимость в собственном программном комплексе возникла из-за отсутствия комплекса, обеспечивающего решения всех задач данного исследования. Например, в пакетах Ansys Lumerical и Tidy3D содержится модуль для решения обратной задачи дифракции: она решается с помощью метода топологической оптимизации [19 – 21]. Однако заметим, что структуры, получаемые методом топологической оптимизации, сложны для изготовления. Пакет COMSOL также предоставляет инструмент для решения обратной задачи дифракции при расчете фотонно-кристаллических элементов. В отличие от Ansys Lumerical и Tidy3D, в этом пакете рассматриваются отдельные каверны кристалла, но оптимизация проводится детерминированными методами, что не подходит для расчета сложных структур [22].

Различные методы оптимизации (как локальные, так и глобальные) входят во многие пакеты для математического моделирования (Matlab, библиотека SciPy 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, 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.

Далее, следуя [23], опишем разработанный программный комплекс. Написанный программный комплекс представляет собой четыре модуля, обменивающихся друг с другом данными: модуль графического интерфейса, модуль моделирования структуры, модуль расчета функции эффективности и модуль оптимизации (рис. 4).

#### *Графический интерфейс*

Сначала пользователь, взаимодействуя с графическим интерфейсом (рис. 5), 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 также номера

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

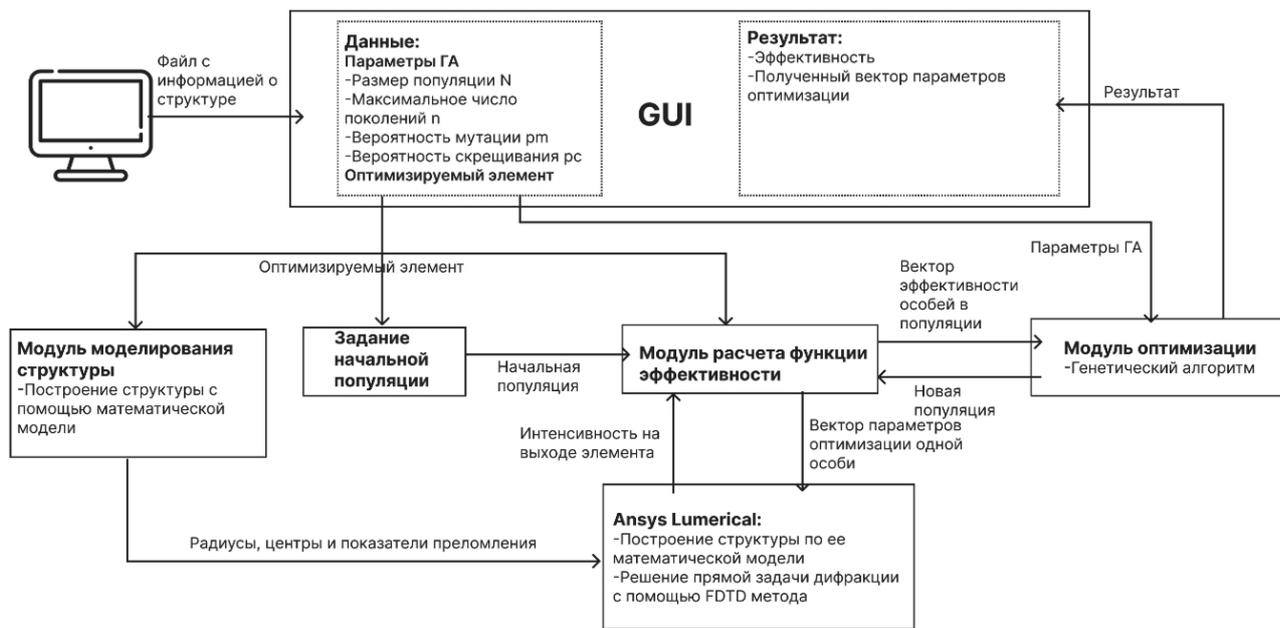


Рис. 4. Блок-схема программного комплекса

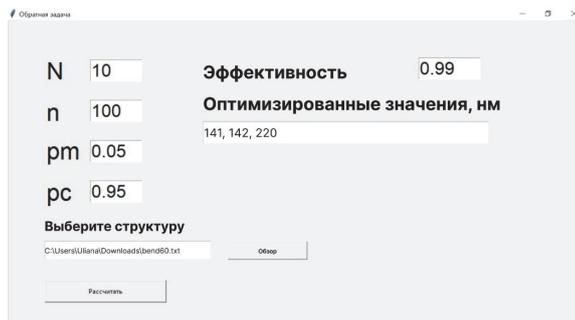


Рис. 5. Графический интерфейс

**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 также можно использовать как отдельную программу, например для последующей конвертации модели в файл GDS, 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.

При написании генетического алгоритма были использованы функции из библиотеки numpy, а графический интерфейс написан с помощью библиотеки tkinter.

**4. Применение изложенных моделей к расчету фотонно-кристаллических волноводов с изгибами**

Применим изложенные модели для оптимизации изгибов фотонно-кристаллических волноводов на 60° и 120°. Данные структуры представляют собой кристалл с гексагональной решеткой с периодом  $a=459$  нм, узлы решетки – воздушные каверны ( $\epsilon_1=1$ ) в подложке из кремния ( $\epsilon_2=3,47$ ) с радиусом  $R=183,9$  нм и линейным дефектом – соединением двух волноводов под углами 60° и 120°. Размер кристалла –  $15a \times 15a$ , размер сеточной области  $300 \times 300$  узлов. Минимальный радиус каверны  $R_0$ , который может получиться в генетическом алгоритме 140,4 нм. Целью оптимизации является получение структуры, которая обеспечивает как можно большее значение эффективности (отношение интенсивности сигнала на выходе элемента к интенсивности сигнала, поданного на вход). Для увеличения значения эффективности, следуя [24], будем менять радиусы каверн вблизи изгиба (рис. 6).

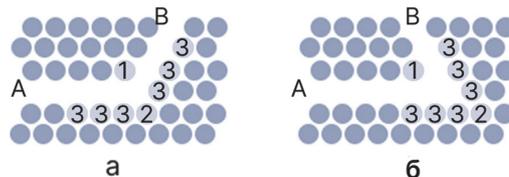


Рис. 6. Фрагменты изгибов волноводов: (а) на 120°, (б) на 60°

После применения генетической оптимизации удалось получить повышение эффективности для обоих структур до 99%. Результаты оптимизации представлены в табл. 1 и на рис. 7 и 8.

Табл. 1. 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	141	142	220
120°	0,09	>0,99	221	141	218

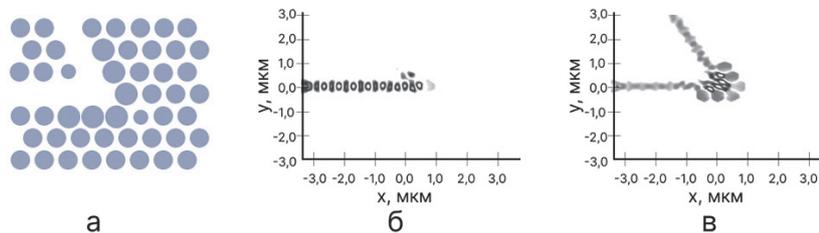


Рис. 7. Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на 60°: (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поля до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

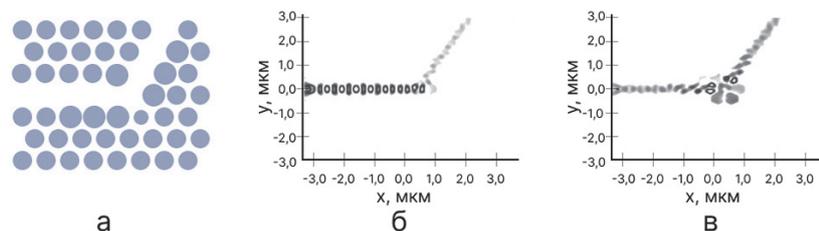


Рис. 8. Результат оптимизации модифицируемым алгоритмом изгиба волновода на 120°: (а) полученная топология, (б) распределение модуля магнитного поля до оптимизации, (в) распределение модуля магнитного поля после оптимизации

Из таблицы видно, что в результате работы алгоритма были получены топологии, обеспечивающие передачу сигнала практически без потерь. Также отметим, что полученные структуры характеризуются технологичностью в отличие от рассчитанных в [24].

**Заключение**

В ходе проведенного в настоящей работе исследования получены следующие результаты:

- 1) представлена математическая модель одного класса пространственно-вариативной структуры, основанная на решетке Браве. Особенностью предложенной модели является возможность учета

нелокальных и локальных дефектов в структуре, что делает возможным расчёт с помощью этой модели фотонно-кристаллических элементов;

2) предложен способ согласования генетического алгоритма и FDTD метода, заключающийся в выборе сеточной области в зависимости от значения радиусов каверн, полученных в генетическом алгоритме. Также при согласовании ставится дополнительное ограничение на размер каверны, обусловленное технологическими особенностями изготовления фотонно-кристаллических элементов;

3) разработан программный комплекс для расчета фотонно-кристаллических элементов. Программный комплекс включает в себя расчет по предложенным в работе моделям и состоит из четырех модулей, которые могут работать автономно и решать отдельные задачи (моделирование самого элемента, решение прямой задачи дифракции);

4) с помощью предложенной в работе модели рассчитаны фотонно-кристаллические изгибы волноводов на  $60^\circ$  и  $120^\circ$ . Полученные с помощью генетической оптимизации значения эффективностей составляют более 99% для обоих типов изгибов, что в 33 и 11 раз больше эффективностей без оптимизации изгиба в  $60^\circ$  и  $120^\circ$  соответственно.

### References

- [1] Rumpf Raymond C, Pazos Javier J, Digaum Jennefir L, Kuebler Stephen M. Spatially variant periodic structures in electromagnetics *Philos Trans A Math Phys Eng Sci.* 2015; 373(2049): 20140359. doi: 10.1098/rsta.2014.0359.
- [2] Aero EL. Micromechanics of a double continuum in a model of a medium with variable periodic structure. *Journal of engineering mathematics* 2006; 55(1): 81-95. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10665-005-9012-3>
- [3] Andrianov DE, Eremeev SV, Kovalev YuA, Titov DV. Methods for processing spatial structures in satellite images [In Russian]. *Journal of Instrument Engineering* 2021; 64(1): 21—31. DOI: 10.17586/0021-3454-2021-64-1-21-31
- [4] Hedberg, Hugo, Petr Dokladal, and Viktor Owall. Binary morphology with spatially variant structuring elements: Algorithm and architecture. *IEEE Transactions on Image Processing* 2009; 18(3): 562-572. DOI: <https://doi.org/10.1109/TIP.2008.2010108>
- [5] Sirotin YuI, Shaskolskaya MP. *Fundamentals of Crystallophysics* [In Russian]. Moscow: “Nauka” Publisher; 1979. ISBN: 978-5-0000-0000-0
- [6] Kirsh DV, Skirokanev AS, Kupriyanov AV. Algorithm of reconstruction of a three-dimensional crystal structure from two-dimensional projections. *Computer Optics* 2019; 43(2): 324-331. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-2-324-331.
- [7] Shirokanev AS, Kirsh DV, Kupriyanov AV. Research of an algorithm for crystal lattice parameter identification based on the gradient steepest descent method. *Computer Optics* 2017; 41(3): 453-460. DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-3-453-460
- [8] Liopo VA, Liavshuk IA, Ovchinnikov EV. Reciprocal lattice of nanocrystals [In Russian]. *Bulletin of Yanka Kupala Grodno State University. Series 2. Mathematics. Physics. Informatics, computing, and control* 2021; 11(1): 107-117.
- [9] Belikov AV, Bogdanova MV, Lozovik YuE. Calculation of the Band Structure of Metallic Photonic Crystals: A Modified Plane Wave Decomposition Method [In Russian]. *Math. Modeling* 2007; 19(4): 19–26.
- [10] Raymond C. Rumpf, Javier Pazos. Synthesis of spatially variant lattices. *Opt. Express* 2012; 20(14): 15263-15274 DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.20.015263>
- [11] Volk A, Rai A, Agha I. Development of spatially variant photonic crystals to control light in the near-infrared spectrum. *Sci Rep* 2022; 12: 16146. doi: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-20252-1>
- [12] Gnawali R, Volk A, Agha I. Bio-inspired spatially variant photonic crystals for self-collimation and beam-steering applications in the near-infrared spectrum. *Sci Rep* 2021; 11: 18767. doi: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-97608-6>
- [13] Jennefir L, Digaum, Javier J. Pazos, Jeffrey Chiles. Tight control of light beams in photonic crystals with spatially-variant lattice orientation. *Opt. Express* 2014; 22(21): 25788-25804. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.22.025788>
- [14] Taflove A, Hagness SC. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, Third Edition. Boston: “Artech House” Publisher; 2005. ISBN: 978-1580538329
- [15] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions Antennas and Propagation* 1966; 14(3): 302–307. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693
- [16] Dey S, Mittra R. A conformal finite-difference time-domain technique for modeling cylindrical dielectric resonators. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* 1999; 47(9): 1737–1739. DOI: 10.1109/22.788616
- [17] Yu W, Mittra R. A conformal finite difference time domain technique for modeling curved dielectric surfaces. *IEEE Microwave Components Lett.* 2001; 11(1): 25-27. DOI: <https://doi.org/10.1109/7260.905957>
- [18] Kang M., Jin H., Jeon H. Photonic crystal L3 cavity laser fabricated using maskless digital photolithography. *Nanophotonics* 2022; 11(10): 2283-2291. DOI: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2022-0021>
- [19] Watanabe Y, Sugimoto Y, Ikeda N, Ozaki N, Mizutani A, Takata Y, Kitagawa Y, Asakawa K. Broadband waveguide intersection with low-crosstalk in two-dimensional photonic crystal circuits by using topology optimization. *Opt. Express* 2006; 14(20): 9502 – 9507. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.14.009502>.
- [20] Watanabe Y, Ikeda N, Sugimoto Y, Takata Y. Topology optimization of waveguide bends with wide, flat bandwidth in air-bridge-type photonic crystal slabs. *Journal of Applied Physics* 2007; 101(11): 113108. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2739317>.
- [21] Shen B, Wang P, Polson R. An integrated-nanophotonics polarization beamsplitter with  $2.4 \times 2.4 \mu\text{m}^2$  footprint. *Nature Photon* 2015; 9: 378–382. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphoton.2015.80>
- [22] Krivosheeva YY, Golovashkin DL, Pavelyev VS. Comparison of two approaches to the design of interference optical elements on photonic crystal structures. *Computer Optics* 2025; 49(4): 549-559. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-1603
- [23] Kupriyanov AV. *Mathematical modeling, methods and software for texture analysis of images of crystalline structures* [In Russian]. Dissertation of a Doctor of Technical Sciences, Samara 2013.

- [24] Krivosheeva YY, Golovashkin DL. Design of waveguide photonic-crystal structures with bends using a genetic algorithm [In Russian]. Proceedings of the XVII International Conference on Mathematical and Computer Modeling of Natural-Science and Social Problems, Penza, Russia, 1–4 June 2023; 151-156.
- 

*Сведения об авторе*

**Кривошеева Юлиана Юрьевна**, ассистент кафедры прикладной математики Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва. Область научных интересов: моделирование оптических элементов на фотонных кристаллах и их оптимизация. E-mail: [krivosheeva.yuyu@ssau.ru](mailto:krivosheeva.yuyu@ssau.ru)

---

*Поступила в редакцию 06 ноября 2025 г. Окончательный вариант – 22 декабря 2025 г.*

---

---

# Modeling and optimization of one class of spatially variable structures

Yu.Yu. Krivosheeva<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Samara National Research University, Moskovskoye Shosse 34, Samara, 443086, Russia

## Abstract

A mathematical model of a class of spatially variable structures based on the Bravais lattice model is presented. The model takes into account the possibility of introducing nonlocal and local defects into the structure, which enables its use in modeling and optimizing photonic crystal elements. Particular attention is paid to the combined use of a genetic algorithm and the FDTD method. The proposed solution takes into account technological limitations on the radii of calculated caverns in the crystal and imposes additional conditions on the selection of the grid domain size when changing the cavity radii values in the genetic algorithm, thereby determining the coordination of the methods. A software package for solving the inverse diffraction problem in the calculation of photonic crystal elements has been developed. To calculate the elements, this software package uses the model and solution proposed in the article for matching the genetic algorithm and the FDTD method. Using the software package, bends of 60° and 120° photonic crystal waveguides are calculated in this study. The structures obtained as a result of genetic optimization are characterized by efficiency values of 99 %, which is 33 and 11 times higher than the efficiencies without bending optimization of 60° and 120°, respectively.

**Keywords:** manuscript formatting, manuscript submission, Computer Optics, diffractive optics, information optical technologies, image processing, hyperspectral data analysis, intelligent video stream analysis.

**Citation:** Krivosheeva YuYu. Modeling and optimization of one class of spatially variable structures. Computer Optics 2026; 50(1): 1889. DOI: 10.18287/COJ1889.

---

## About authors

**Yuliana Yuryevna Krivosheeva**, assistant at the Department of Applied Mathematics, Samara National Research University. Research interests: modeling of optical elements on photonic crystals and their optimization.

E-mail: [krivosheeva.yuyu@ssau.ru](mailto:krivosheeva.yuyu@ssau.ru)

---

*Received November 06, 2025. The final version – December 22, 2025.*

---