



Optimisation numérique de structures photoniques

Pauline Bennet

► To cite this version:

Pauline Bennet. Optimisation numérique de structures photoniques. Physique [physics]. Université Clermont Auvergne, 2022. Français. NNT: . tel-03948505

HAL Id: tel-03948505

<https://theses.hal.science/tel-03948505>

Submitted on 20 Jan 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

INSTITUT PASCAL
UNIVERSITÉ CLERMONT AUVERGNE

École doctorale École Doctorale des Sciences Fondamentales

Unité de recherche Institut Pascal

Thèse présentée par **Pauline BENNET**

Soutenue le **8 novembre 2022**

En vue de l'obtention du grade de docteur de l'Institut Pascal et de l'Université Clermont Auvergne

Discipline **Milieux dilués et optique**

Optimisation numérique des structures photoniques

Thèse dirigée par Antoine MOREAU

Composition du jury

<i>Rapporteurs</i>	Stéphane LANTERI Christophe SAUVAN
<i>Examineur</i>	Angela VASANELLI
<i>Directeur de thèse</i>	Antoine MOREAU

COLOPHON

Mémoire de thèse intitulé « Optimisation numérique des structures photoniques », écrit par Pauline BENNET, achevé le 24 novembre 2022, composé au moyen du système de préparation de document $\text{\LaTeX}$ et de la classe yathesis dédiée aux thèses préparées en France.

*Force lumineuse et bienveillante
Gratitude infinie pour celui qui guide
Respect.*

Le Pacte des Marchombres, Ellana
Pierre Bottero

OPTIMISATION NUMÉRIQUE DES STRUCTURES PHOTONIQUES**Résumé**

Cette thèse se situe à l'interface entre deux domaines, celui de la photonique et celui de l'optimisation numérique. Après avoir présenté un historique complet et détaillé des avancées en photonique et en optimisation, nous montrons qu'il est difficile de déterminer quel algorithme d'optimisation est le plus pertinent à utiliser pour optimiser des structures photoniques, si jamais il existe. Nous utilisons des algorithmes modernes d'optimisation inspirés de l'évolution pour retrouver des structures photoniques naturelles. Nous vérifions que les optimisations fonctionnent et nous avons identifié un algorithme, Differential Evolution (DE), comme étant le plus adapté à la résolution de problèmes en photonique. Nous nous intéressons ensuite à une variante de DE particulièrement efficace pour obtenir des structures photoniques modulaires. Une structure modulaire est une structure au sein de laquelle on peut identifier différentes parties et leur associer chacune un rôle spécifique dans la réponse optique globale. La modularité des structures permet de comprendre physiquement comment la structure opère et en quoi elle constitue une réponse au problème d'optimisation. Nous nous intéressons ensuite au problème de la couche anti-reflet idéale à poser sur du silicium pour limiter les pertes par réflexion sur des panneaux photovoltaïques. Plus particulièrement, nous étudions la reproductibilité de l'optimisation, et réalisons une analyse physique détaillée du fonctionnement de la structure optimisée. Nous appliquons notre méthode d'optimisation à différents cas d'optique guidée : un coupleur à plasmon de surface, un guide d'onde en transmission, et un démultiplexeur. À chaque fois, nous obtenons grâce à DE des structures régulières et intéressantes à exploiter pour déduire des règles de conception de structures photoniques. Finalement, nous présentons un outil avancé permettant de comparer des algorithmes d'optimisation sur une diversité de problèmes. Nous expliquons comment nous avons participé à l'élaboration de cet outil, et en quoi il nous semble particulièrement pertinent pour optimiser des structures photoniques prometteuses.

Mots clés : photonique, optimisation, algorithme évolutionnaire

Abstract

This thesis is located at the interface between two fields, that of photonics and that of numerical optimization. After presenting a complete and detailed history of advances in photonics and optimization, we show that it is difficult to determine which optimization algorithm is the most relevant to use to optimize photonic structures, if it ever exists. We use modern optimization algorithms inspired by evolution to find natural photonic structures. We verify that the optimizations work and we have identified an algorithm, Differential Evolution (DE), as being the most suitable for solving problems in photonics. We then focus on a variant of DE that is particularly efficient for obtaining modular photonic structures. A modular structure is a structure within which different parts can be identified and each associated with a specific role in the overall optical response. The modularity of the structures makes it possible to physically understand how the structure operates and how it constitutes an answer to the optimization problem. We are then interested in the problem of the ideal anti-reflective layer to be placed on silicon to limit losses by reflection on photovoltaic panels. More specifically, we study the reproducibility of the optimization, and perform a detailed physical analysis of the operation of the optimized structure. We apply our optimization method to different cases of guided optics: a surface plasmon coupler, a transmission waveguide, and a demultiplexer. Each time, we obtain, thanks to DE, regular and interesting structures to be exploited to deduce design rules for photonic structures. Finally, we present an advanced tool to compare optimization algorithms on a variety of problems. We explain how we participated in the development of this tool, and how it seems particularly relevant to us for optimizing promising photonic structures.

Keywords: photonics, optimization, evolutionary algorithms

Table des matières

Résumé	v
Table des matières	vii
Introduction générale	1
1 L'optimisation et la photonique	5
1.1 Définitions générales	5
1.2 L'optimisation de structures photoniques	7
1.2.1 L'optimisation de filtres optiques multicouches	9
1.2.2 L'optimisation de cristaux photoniques	10
1.2.3 Généralisation de l'optimisation en photonique	11
1.2.4 L'optimisation topologique	12
1.3 Sur l'optimisation globale	14
1.3.1 Le développement des algorithmes d'optimisation globale	14
1.3.2 La comparaison des algorithmes	15
Discussion	17
2 La régularité, indice d'optimalité	19
Introduction	19
2.1 Description des fonctions de coût utilisées	20
2.2 Description des algorithmes d'optimisation utilisés	21
2.3 Réflexion d'une longueur d'onde unique	23
2.3.1 Optimisation des indices et des épaisseurs optiques	23
2.3.2 Fixer le contraste d'indice	25
2.4 Réflexion de plusieurs longueurs d'onde	26
2.5 Diffusion du bleu par un réseau de diffraction complexe	29
2.6 Comparaison des algorithmes	32
2.7 De la difficulté de reproduire des résultats	38
Discussion	40
3 Hyper-optimisation de Differential Evolution	43
Introduction	43
3.1 Le miroir diélectrique à gradient pour optimiser DE	44
3.1.1 Differential Evolution, un algorithme simple et efficace	44

3.1.2 Rôle de la mutation	45
3.1.3 Rôle du croisement	46
3.1.4 Rôle de la population	47
3.1.5 Impact du choix de la fonction de coût	49
3.2 Comparaison des performance de DE avec Needle	50
Conclusion	51
4 Optimisation d'un anti-reflet pour le photovoltaïque	53
Introduction	53
4.1 Un anti-reflet (ARC) simplifié	54
4.1.1 Objectif de l'optimisation	54
4.1.2 Description générale de la structure optimisée : l'ARC simplifié	54
4.2 Émergence de la structure	57
4.2.1 Optimisation sous conditions standard	58
4.2.2 Imposer un nombre impair de couches	59
4.2.3 Première couche d'indice élevé	63
4.2.4 Grand contraste d'indice	64
4.2.5 Indices variables, petit contraste	64
4.2.6 Indices variables, grand contraste	66
4.2.7 Avec une couche d'argent	68
4.2.8 Substrat de silicium cristallin	71
4.3 Analyse physique détaillée de la structure	73
4.3.1 Le modèle de Fabry-Perot	73
4.3.2 Réflexion à longueur donnée en fonction de l'épaisseur de la cavité	74
4.3.3 Retrouver les paramètres du modèle	76
4.3.4 Étude de l'influence des couches adaptées sur le coefficient de réflexion du mode de Bloch dans la cavité Fabry-Pérot	78
4.4 Fabrication	81
4.5 Conclusion	82
5 Application à des problèmes pratique de photonique	85
5.1 Coupleur à plasmon de surface	85
5.1.1 Intérêt du problème	86
5.1.2 Paramètres d'optimisation	86
5.1.3 Résultats	86
5.2 Optimisation de divers composants optiques	88
5.2.1 Guide d'onde en transmission	89
5.2.2 Séparateur de polarisations	94
Conclusion	97
6 Nevergrad : un outil avancé de benchmarking intensif	99
Introduction	99
6.1 Module Photonics et optimisation structurée	100
6.2 Optimisation de couches anti-reflet	103
6.3 Optimisation discrète et structures pixelisées	104
Discussion	108
Conclusion générale	111
Postface	113

Bibliographie	115
A Formalisme des admittances	127
Equations de Maxwell et définition générale de l'admittance.	127
L'interface simple	130
L'incidence normale	131
L'incidence oblique	132
La réflexion d'une couche mince	134
La réflexion d'un ensemble de couches.	136

Introduction générale

Les hommes sont comme les nuages. Ils sont chassés en avant par un vent mystérieux et invisible face auquel ils sont impuissants. Ils croient maîtriser leur route et se moquent de la faiblesse des nuages, mais leur vent à eux est mille fois plus fort que celui qui souffle là-haut.

Le Pacte des Marchombres, Ellana
Pierre Bottero

Ma thèse se situe à l'interface entre deux domaines, celui de la photonique et celui de l'optimisation numérique. Nous allons voir comment ces deux domaines en sont venus à s'influencer au cours du temps mutuellement de plus en plus, et quelles questions ont finalement émergé qui imposaient d'utiliser les outils développés dans ces deux domaines.

Tout commence avec de l'optique – même si dès 1847, on trouve trace, avec Cauchy, d'une méthode de descente de gradient qui préfigure les algorithmes modernes d'optimisation. En 1865, James Clerk Maxwell écrit ses équations qui permettent de décrire les ondes électromagnétiques et qui sont la preuve que l'électricité et le magnétisme sont les deux faces d'une même pièce, le champ électromagnétique[1, 2]. On comprend alors que la lumière est une onde électromagnétique dont la longueur d'onde est visible, et qu'elle fait partie des nombreuses ondes électromagnétiques nous entourant mais dont la plupart nous sont complètement invisibles.

Si l'optique géométrique développée dès l'antiquité était jusqu'alors utilisée pour comprendre et construire tout type d'appareils optiques permettant de voir l'infiniment grand (télescope) ou l'infiniment petit (microscope) – et ne considérant que des systèmes dont la dimension est supérieure à la longueur d'onde de la lumière – l'optique ondulatoire permet alors de comprendre les phénomènes d'interférences et de diffraction. Elle permet par cela d'expliquer des phénomènes à l'échelle de la longueur d'onde. On comprend alors, notamment grâce aux travaux de Lord Rayleigh, que les couleurs de certains insectes sont en réalité des couleurs interférentielles – et non des couleurs dues à des pigments[3].

L'invention du transistor en 1947 permet de miniaturiser les circuits logiques, et par extension de voir émerger les premiers outils de calcul[4]. L'amélioration régulière des microprocesseurs permet petit à petit d'augmenter la capacité de calcul des ordinateurs, si bien que dans les années 1960 l'optimisation numérique commence à voir le jour. Développée au départ pour résoudre des problèmes comme celui du voyageur de commerce (posé dès 1930), l'optimisation est une problématique qui va finalement se répandre à énormément de domaines applicatifs[5].

L'idée qu'en copiant les processus de l'évolution sur des machines (essayer des combinaisons de gènes pour ne conserver que celles qui sont les plus adaptées) on doit pouvoir optimiser une solution est déjà présente dans les manuscrits de Turing[6]. Il faut attendre que les ordinateurs

aient fait suffisamment de progrès pour que John Holland en 1975 propose d'imiter la nature sur un ordinateur avec les premiers algorithmes génétiques[7].

En parallèle, l'invention du laser en 1963 marque sans doute la naissance de ce qu'on appelle maintenant la photonique. Grâce au laser, on peut alors utiliser la lumière comme sonde, comme vecteur d'information ou comme vecteur d'énergie, un peu comme on utilise les électrons pour assurer ce type de fonction. C'est ainsi que le concept de photonique a émergé. La photonique a envahi notre quotidien grâce au laser puisqu'on le retrouve dans nos imprimantes, nos photocopieuses, nos lecteurs CD et DVD, etc. C'est grâce à des lasers qu'on peut transmettre de l'information dans des fibres optiques entre ordinateurs. C'est aussi les progrès dans la fabrication des fibres optiques qui vont permettre le développement d'internet, dont l'embryon verra le jour à la fin des années 60[8].

Avec les progrès des ordinateurs, dans les années 1970, des méthodes de résolutions numériques des équations de Maxwell commencent à apparaître. Ces méthodes de résolution ne sont pas encore aussi puissantes que les méthodes les plus modernes, mais elles marquent un changement fondamental : l'outil numérique commence à prendre une grande importance en photonique, comme dans beaucoup de domaines, et il va très vite devenir incontournable pour imaginer de nouveaux dispositifs (sans avoir à les fabriquer) ou pour comprendre le résultat de certaines expériences.

Dès les années 1980 le développement de méthodes de nanofabrication basées sur le silicium permet de créer des dispositifs de la taille de la longueur d'onde. Les cristaux photoniques, notamment créés par structuration périodique du silicium et qui ont été imaginés à la fin des années 80, sont alors fabriqués. Ils permettent de tirer partie de la nature ondulatoire de la lumière et mieux la contrôler et deviennent des objets standards d'étude dans les années 1990[9].

En parallèle, les méthodes de résolution des équations de Maxwell s'améliorent : la Rigorous Coupled Wave Analysis, une méthode de référence en développement depuis les années 80 est complètement mise au point en 1996[10, 11]. C'est une méthode relativement rapide et ancrée dans la physique, particulièrement adaptée aux structures périodiques (réseaux de diffraction, cristaux photoniques).

Les années 2000 voient une sorte d'"explosion cambrienne" des algorithmes d'optimisation. Les algorithmes d'optimisation inspirés de la nature (PSO en 1995, DE en 1997, CMA-ES en 2001) se développent[12, 13, 14]. Les ordinateurs ont multiplié par un facteur énorme leur puissance de calcul et il devient envisageable de comparer les algorithmes entre eux de façon de plus en plus étendue et précise. L'intelligence artificielle, dont l'apprentissage repose sur une optimisation, commence à devenir plus largement exploitée.

Pendant ce temps, l'optimisation topologique se développe en mécanique pour optimiser des structures par descente de gradient[15] et se perfectionne.

Il devient de plus en plus évident, dans les années 2010 et notamment avec la multiplication des data centers et des super ordinateurs, que réussir à intégrer des dispositifs photoniques sur des puces électroniques offrirait des gains importants de performances, en terme de vitesse mais aussi de consommation d'énergie. L'idée principale est d'amener la communication par mode guidé au plus près des processeurs. Si les cristaux photoniques offrent une voie pour réaliser des composants parce qu'ils permettent une maîtrise de la lumière, ils demandent beaucoup de structuration. On commence à se demander alors s'il n'est pas possible de réaliser des composants bien plus petits et plus efficaces sur des substrats de silicium[16]. Ce qui manque alors cruellement, ce sont des règles de conception pour ces composants éventuels. La communauté n'a pas tellement d'idée sur leurs performances ultimes non plus.

C'est l'optimisation topologique venue de la mécanique mais appliquée aux dispositifs photoniques, qui va commencer à donner une idée de l'étendue du possible. Des équipes montrent que des dispositifs miniaturisés sont capables de performances insoupçonnées[17, 18,

19], suscitant un grand enthousiasme[20]. Mais les méthodes d'optimisation utilisées visent une amélioration graduelle des structures et risquent de passer à côté de dispositifs plus efficaces. La complexité des résultats empêchent pour l'instant la commercialisation de ces dispositifs[20], alors qu'il est raisonnable de penser que des structures plus simples ayant des performances équivalentes sont sans doute possibles.

Au moment où ma thèse débute, de nombreuses questions se posent concernant le potentiel de ces techniques d'optimisation appliquées à la photonique. Jusqu'où peuvent elles nous mener ? Seront-elles capables de générer des structures plus simples, mais suffisamment efficaces pour pouvoir être un jour intégrées sur des circuits électroniques ? Alors que nous disposons d'une puissance de calcul difficile à imaginer même dans les années 80, d'algorithmes d'une diversité relativement effrayante issus des derniers développements en optimisation, on peut se demander jusqu'où les techniques d'optimisation permettront d'aider la photonique – mais aussi dans quelle mesure la photonique peut aider à faire progresser les méthodes d'optimisation...

Ce manuscrit est organisé en 6 chapitres. Le premier présente un historique complet et détaillé des avancées en photonique et en optimisation, puis ce qui a déjà été obtenu grâce à l'optimisation de structures photoniques. Il permet de mettre en lumière à quel point il est difficile de déterminer quel algorithme d'optimisation est le plus pertinent à utiliser, si jamais il existe.

Dans le deuxième chapitre, nous utilisons des algorithmes modernes d'optimisation inspirés de l'évolution pour retrouver des structures photoniques naturelles. Depuis les travaux de Lord Rayleigh, ces structures présentes sur divers insectes ont été beaucoup étudiées et ont permis d'associer certaines structures caractéristiques (miroir de Bragg, réseaux) à des propriétés optiques spécifiques (réflexion d'une longueur d'onde spécifique, diffraction de la lumière). Nous avons ainsi pu bénéficier de structures à comparer aux optimisations, nous avons pu vérifier que les optimisations fonctionnent et nous avons identifié un algorithme, Differential Evolution (DE), comme étant le plus adapté à la résolution de problèmes en photonique.

Le troisième chapitre est consacré à l'hyper-paramétrisation de DE. Nous avons testé différentes variantes existantes pour déterminer laquelle est la plus efficace pour obtenir des structures photoniques modulaires. Une structure modulaire est une structure au sein de laquelle on peut identifier différentes parties et leur associer chacune un rôle spécifique dans la réponse optique globale. La modularité des structures permet de comprendre physiquement comment la structure opère et en quoi elle constitue une réponse au problème d'optimisation.

Dans un quatrième chapitre, nous nous intéressons au problème de la couche anti-reflet idéale à poser sur du silicium pour limiter les pertes par réflexion sur des panneaux photovoltaïques. Plus particulièrement, nous étudions la reproductibilité de l'optimisation, et réalisons une analyse physique détaillée du fonctionnement de la structure optimisée.

Le cinquième chapitre présente 4 applications différentes de notre méthode d'optimisation : le cas d'un coupleur à plasmon de surface, d'un guide d'onde en transmission, d'un démultiplexeur et enfin d'un séparateur de longueur d'onde. A chaque fois, nous obtenons grâce à DE des structures régulières et intéressantes à exploiter pour déduire des règles de conception de structures photoniques.

Finalement, le dernier chapitre présente un outil avancé permettant de comparer des algorithmes d'optimisation sur une diversité de problèmes. Nous expliquons comment nous avons participé à l'élaboration de cet outil, et en quoi il nous semble particulièrement pertinent pour optimiser des structures photoniques prometteuses.

L'optimisation et la photonique

- Crains-tu mon jugement ?
- Non.
- Pourquoi ?
- Parce que je m'offre à lui.
- Crains-tu le jugement des autres ?
- Non.
- Pourquoi ?
- Parce que je dénie aux autres le droit de me juger.

Le Pacte des Marchombres, La Prophétie
Pierre Bottero

1.1 Définitions générales

S'intéresser à l'optimisation de structures photoniques, c'est s'intéresser à ce qu'on appelle le problème inverse. Par opposition au problème direct qui consiste à étudier une structure photonique donnée pour en déduire son comportement optique, le problème inverse consiste à retrouver la géométrie et composition d'une structure photonique à partir de ses données optiques. Il s'agit d'un procédé hautement plus complexe que le problème direct, car pour une structure donnée nous avons nécessairement une réponse optique spécifique, alors qu'il peut exister plusieurs structures photoniques avec des géométries différentes qui permettent d'obtenir un comportement optique donné, au moins de façon approchée.

Pour résoudre le **problème inverse**, il existe deux catégories de méthodes. La première catégorie consiste à établir un système d'équations permettant de réaliser une approximation du problème à résoudre pour réduire le nombre de solutions possibles à une seule[21]. Des considérations physiques sur le problème à traiter sont utilisées pour le simplifier. Il s'agit de la toute première façon qui a été utilisée pour résoudre le problème inverse, avant que les méthodes d'optimisation ne soient répandues. La deuxième catégorie de méthodes consiste justement à résoudre un problème d'optimisation en définissant une fonction liée à la réponse optique souhaitée, et de minimiser ou maximiser cette fonction grâce à des algorithmes[22]. Cela ne

consiste plus à récupérer des paramètres opto-géométriques à partir d'une structure unique, mais à optimiser les mêmes paramètres afin de répondre au mieux à une propriété optique souhaitée. Dans ce dernier cas, il n'y a aucune garantie que la propriété optique souhaitée puisse réellement être obtenue. Tout au long de ce manuscrit, nous allons nous intéresser à cette approche des problèmes inverses basée sur l'optimisation : nous chercherons à optimiser les paramètres opto-géométriques d'une structure pour qu'elle réponde le plus efficacement possible à un objectif.

Pour s'approcher des propriétés optiques idéales, il faut pouvoir définir une mesure quantitative de la distance entre la réponse idéale et la réponse réelle d'une structure donnée. C'est un choix crucial, mais contenant en réalité une part d'arbitraire. Cette "distance" est en général appelée la **fonction de coût**. On peut aussi retrouver le nom de **fonction de mérite** ou de **fonction objectif**.

L'objectif de l'optimisation numérique est de **minimiser cette fonction de coût** en s'appuyant sur des algorithmes. Ces algorithmes peuvent être spécifiques au problème traité – c'est le cas par exemple de la méthode Needle[23], qui s'applique exclusivement aux structures multi-couches optiques. D'autres algorithmes, beaucoup plus nombreux, sont généralistes[24, 25, 26, 27, 28] : on peut les utiliser pour n'importe quel problème, photonique ou non, comme la minimisation du déplacement du personnel d'un hôpital ou l'optimisation de la gestion du trafic aérien[29].

Le résultat d'une optimisation est un ensemble de paramètres correspondant à une structure qui permet d'avoir la fonction de coût la plus faible possible.

Chaque structure photonique possible étant décrite par un ensemble (possiblement grand) de paramètres, l'ensemble de ces structures définit **l'espace des paramètres** ou le **domaine d'optimisation** qui est exploré par l'algorithme. Cet espace des paramètres admet autant de dimensions qu'il existe de paramètres à optimiser. Ces dimensions sont limitées par des contraintes imposées par l'utilisateur : si la dimension représente une épaisseur de couche, une contrainte pourra être que le paramètre concerné soit forcément positif – il semble en effet peu pertinent de tenter de fabriquer des structures avec des couches d'épaisseur négative. Le nombre de dimensions d'un problème est aussi appelé nombre de degrés de liberté d'une structure.

Lorsqu'on attribue une valeur de la fonction de coût en plusieurs points de l'espace des paramètres, on forme une sorte de paysage. Il est simple de visualiser (Fig 1.1) ce paysage comme une surface quand il n'y a que deux degrés de liberté. Quand il y en a plus, il est impossible de se représenter cette "surface", mais on continue à l'appeler paysage par analogie. Les différentes solutions proposées par l'algorithme d'optimisation renseignent sur ce paysage, sur la présence ou non de nombreux minima locaux, leur profondeur et leur bassin d'attraction. Même s'il est impossible de connaître le paysage avec précision à moins de tester toutes les solutions possibles, on peut s'en faire une représentation en regardant un grand nombre de solutions générées par les algorithmes.

Certains paramètres nécessitent des optimisations discrètes, car ils ne peuvent prendre que certaines valeurs disponibles dans une base de données. C'est le cas par exemple de la majorité des optimisations permettant de sélectionner les matériaux utilisés pour former la structure photonique. D'autres paramètres sont continus : l'épaisseur d'une couche optique, le diamètre d'un motif d'un cristal photonique, la distance entre deux guides d'onde, etc. Les paramètres continus et discrets ne sont pas tous optimisés avec les mêmes algorithmes, certaines méthodes sont spécifiquement conçues pour des paramètres discrets, d'autres pour des paramètres continus, et d'autres encore sont compatibles avec les deux types de paramètres.

Chaque méthode d'optimisation a sa propre manière d'explorer l'espace des paramètres.

Certains algorithmes explorent localement l'espace : un point dans cet espace est arbitrairement choisi comme solution initiale, et l'algorithme va explorer tout autour (localement) de ce point pour chercher un meilleur point (ce point présentera donc une fonction de coût plus faible, et sera associé à une structure photonique plus performante). Le risque avec ce type de méthodes locales est que si l'espace des paramètres est un espace qui présente de nombreux minima locaux, comme c'est très souvent le cas en photonique en raison des nombreuses résonances de cavité, l'optimisation risque de converger et de bloquer dans un minimum local, sans voir qu'un minimum global se situe ailleurs dans l'espace des paramètres. Les algorithmes globaux permettent en théorie de contourner ce problème. Souvent inspirés par la nature, ces algorithmes utilisent non pas un seul point de l'espace des paramètres, mais plusieurs à la fois. L'algorithme va utiliser d'une façon ou d'une autre l'information contenue dans cette distribution de points pour générer de nouvelles solutions plus pertinentes et ainsi chercher plus efficacement et largement la position d'un minimum global s'il existe. Le fait de reposer sur plusieurs points donne en effet une image incomplète mais utile du paysage de la fonction de coût. La figure 1.1 illustre la différence entre une optimisation locale et une optimisation globale dans le cas d'un espace des paramètres présentant de nombreux minima locaux, en deux dimensions.

L'une des méthodes d'optimisation locale les plus utilisées, et depuis au moins 1847 par Cauchy, est la descente de gradient. La fonction que l'on cherche à minimiser, lorsqu'elle est dérivable, est caractérisée par son gradient. Lorsque nous nous plaçons en un point de l'espace des paramètres, en ce point est attribué une certaine valeur de la fonction. Il est alors confortable d'utiliser le gradient de la fonction pour connaître la direction dans laquelle il faut explorer l'espace des paramètres afin de diminuer la valeur de la fonction, et ainsi obtenir une meilleure solution. Cette méthode de descente de gradient est facile à utiliser et peut être appliquée quel que soit le nombre de dimensions du problème à optimiser, ce qui en fait la méthode de référence. C'est une méthode locale d'optimisation qui permettra systématiquement d'obtenir un minimum local de la fonction à optimiser, mais qui ne pourra jamais s'approcher d'un minimum global à part pour les fonctions les plus simples. Or, les problèmes les plus simples de photonique ne sont pas des problèmes simples d'un point de vue mathématique et utiliser une descente de gradient pour optimiser des structures optiques est le meilleur moyen de se tenir éloigné d'un minimum global.

Le bassin d'attraction d'un minimum local est en réalité l'ensemble des points qui, si on y initie une descente de gradient idéale, donnent le minimum local. On peut en général considérer que l'espace des paramètres est scindé en un ensemble de bassins d'attraction.

1.2 L'optimisation de structures photoniques

La conception (appelée aussi *design* en anglais) de structures photoniques s'est indépendamment développée dans diverses communautés travaillant sur des géométries spécifiques. La communauté des filtres optiques, par exemple, et celle des cristaux photoniques, ont toutes deux mis en place des méthodes spécifiques de *design* consistant à améliorer des structures déjà existantes. L'optimisation s'est développée dans tous les domaines de la photonique et de nombreuses méthodes très différentes ont été appliquées. En 2018, Molesky[20] offre un état de l'art de l'optimisation en photonique, que nous nous proposons de résumer et de compléter dans la suite de ce chapitre.

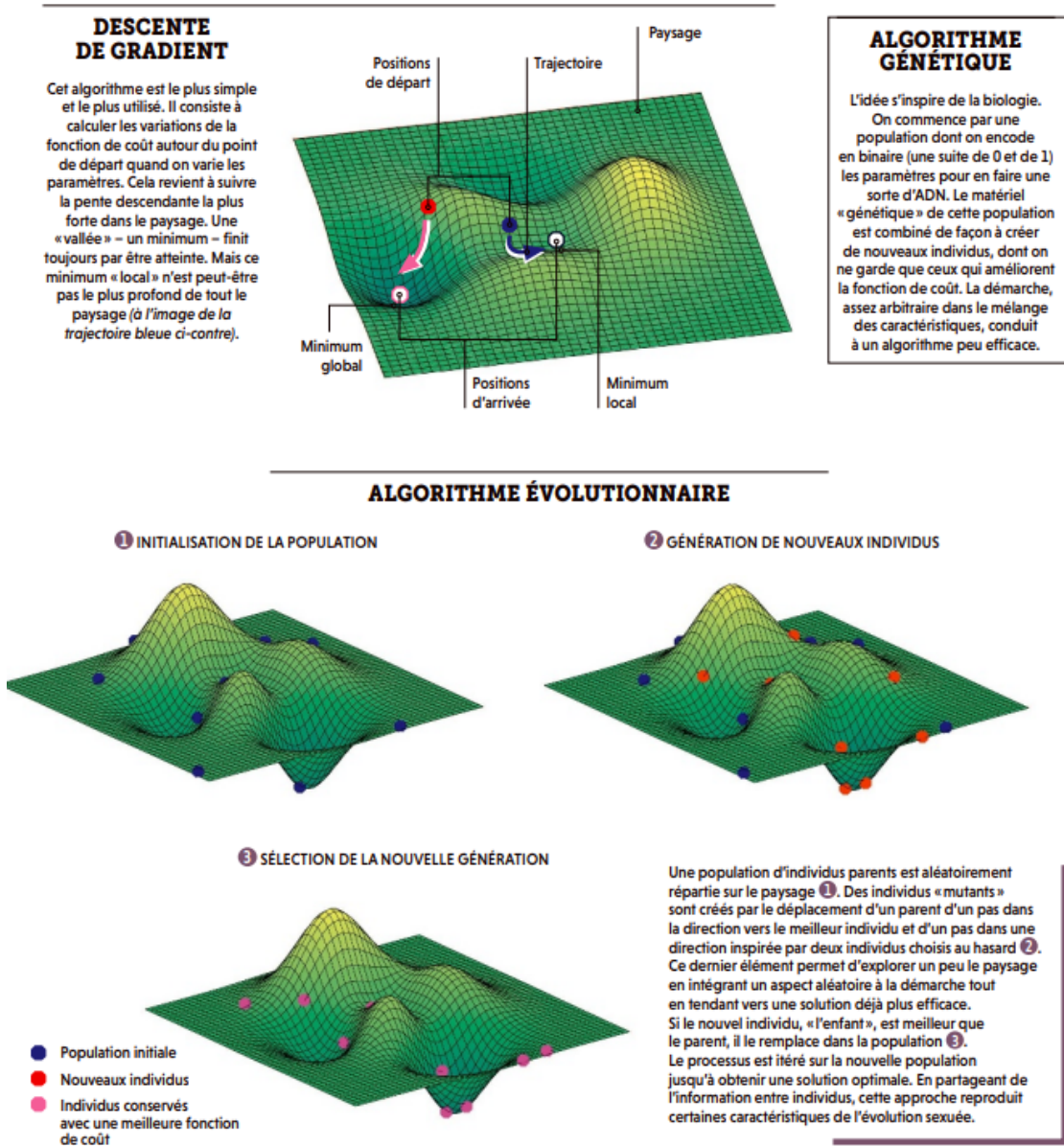


FIGURE 1.1 – Représentation d'une optimisation locale (haut) et globale (bas) dans un espace en deux dimensions présentant de nombreux minima locaux et un minimum global. Illustration issue de *Quand la photonique s'inspire du vivant*, Moreau Antoine et Bennet Pauline, Pour La Science, mai 2021.

1.2.1 L'optimisation de filtres optiques multicouches

Les filtres optiques multicouches sont particuliers dans le sens où la géométrie globale des structures ne peut pas être profondément modifiée : par définition ils consistent en un empilement de couches planes les unes sur les autres. L'optimisation de telles structures peut consister à sélectionner les meilleurs matériaux, les épaisseurs de chacune des couches et / ou le nombre de couches total dans la structure. La communauté de filtres optiques ayant mis au point des méthodes très efficaces pour résoudre le problème direct, le design de filtres optiques guidés par l'intuition physique s'est développé dès 1958[30], et a prospéré les années suivantes notamment grâce aux travaux de Thelen[31, 32, 33]. Le premier programme informatique permettant d'automatiser la conception des filtres optiques a été publié par Dobrowolski et Lowe, et ce dès 1978[34].

En 1994, Tikhonravov et Trubetskov proposent un logiciel qui permet d'optimiser une diversité de filtres optiques en tout genre[35]. On surnomme leur méthode *Needle* car elle consiste à ajouter une aiguille de matériau – d'épaisseur très fine – dans une couche pré-existante de la structure, avant d'optimiser l'épaisseur de cette nouvelle couche insérée. Deux ans plus tard, ces mêmes auteurs démontrent le potentiel de leur logiciel[36] en présentant plusieurs filtres optiques conçus grâce à Needle, tous extrêmement performants. La méthode de design génère des structures très précises et efficaces à condition de laisser le nombre de couches augmenter au fur et à mesure de la conception, ce qui, d'un point de vue optimisation, modifie l'espace des paramètres au fur et à mesure de l'exécution du programme. Les auteurs développent alors une méthode de *refinement* consistant à réduire le nombre de couches de leur structure finale sans perdre trop d'efficacité. La mise en place d'un tel procédé montre que la méthode Needle n'est pas au sens propre une méthode d'optimisation, puisqu'elle génère des multicouches qu'il est possible d'améliorer par la suite et qui ne constituent pas un optimum ni global ni local. Cette méthode reste cependant tellement efficace qu'elle est universellement considérée comme une référence pour concevoir des structures multicouches performantes.

En effet, dès 1989 une méthode globale d'optimisation, le recuit simulé (Simulated Annealing), est testée par Morf et Kunz[37, 38], puis elle est reprise par Chaton et al. en 1994[39], mais elle ne permet pas de générer des filtres optiques d'efficacité comparable à celles produites par Tikhonravov et son collègue. Les recherches en optimisation globale de multicouches continuent cependant, et en 1996 Boudet et al.[40] utilisent eux aussi le recuit simulé ; puis Yang et al. testent un algorithme évolutionnaire (inspiré de l'évolution naturelle d'une population) en 2001[41]. On peut également citer les travaux de Celanovic et al. de 2004[42], ceux de Ghebrebrhan et al. en 2009[43], ou encore ceux de Grosjean et al. en 2018[44], pour n'en citer que quelques-uns. Les méthodes utilisées par les derniers travaux cités ne semblent cependant pas arriver à concurrencer sérieusement la méthode Needle. Il est intéressant de remarquer que certains des derniers auteurs cités ne semblent même pas connaître la méthode de design Needle. Elle est globalement inconnue par les spécialistes de l'optimisation.

En 2004, Poitras et Dobrowolski proposent une théorie permettant d'obtenir des anti-reflets parfaits[45], en 2007 Tikhonravov et al.[23] proposent de nouveaux designs de multicouches obtenues grâce à leur méthode Needle, encore plus efficaces. La méthode est devenue un logiciel très utilisé dans l'industrie et qui est proposé pour un coût très élevé aux équipes de recherche. En 2008 Larouche et Martinu proposent un logiciel équivalent à celui de Tikhonravov[46].

Plusieurs équipes de recherches développent chacune de leur côté des méthodes d'optimisa-

tion de filtres optiques, en général basées sur Needle et complétées par d'autres méthodes, et des concours de design voient le jour pour stimuler les recherches et comparer les méthodes les unes aux autres[47]. Les techniques de design permettent d'obtenir des spectres de réflexion et de transmission tellement complexes que les concours prennent des formes parfois originales, comme par exemple une réflexion qui suit le contour du haut d'une tête de cerf alors que la transmission doit suivre le contour du bas de cette même tête de cerf[48].

En 2012 Elesin et al.[49] proposent une méthode pour concevoir des interrupteurs photoniques prenant la forme d'une structure multicouches, et en 2016 Lin et al.[50] optimisent une cavité elle aussi basée sur une structure multicouches, en utilisant les méthodes d'optimisation basées sur des descentes de gradient. Bien que convaincantes, ces méthodes ne permettent pas de détrôner Needle.

1.2.2 L'optimisation de cristaux photoniques

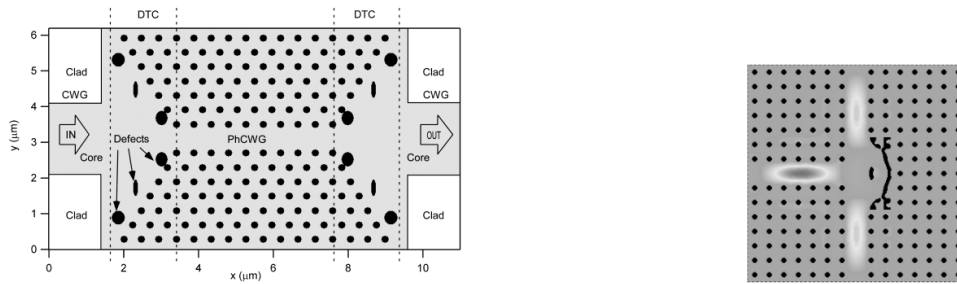
Le début des années 1990 voit l'émergence des cristaux photoniques[51]. Ces structures périodiques permettent de définir des bandes interdites dans lesquelles les ondes électromagnétiques ne se propagent pas. En introduisant des défauts périodiques dans des éléments photoniques, on fabrique des briques élémentaires capable de guider ou de confiner la lumière. On peut alors d'assembler ces briques élémentaires pour créer des structures plus complexes¹. Les cristaux photoniques apparaissent alors une solution pour miniaturiser tous les composants optiques[9]. En réalité, les cristaux photoniques sont des composants tellement complexes que de nombreuses pertes, notamment par réflexion quand on assemble les éléments, empêchent en pratique d'obtenir des composants efficaces. L'optimisation numérique a, dans ce cadre, été beaucoup utilisée, (i) soit pour optimiser directement certains éléments, (ii) soit pour rendre possible le passage de la lumière d'un élément à un autre en minimisant les réflexions.

Pour améliorer les cristaux photoniques, la communauté les a optimisé numériquement

- soit en cherchant à trouver les meilleures dimensions des motifs sans les déformer[52, 53, 54],
- soit en divisant l'espace en pixels et choisissant d'insérer ou non un motif dans chacun de ces pixels[55, 56, 57, 58],
- soit en déformant le motif en lui associant un certain nombre de paramètres et en appliquant une descente de gradient sur chacun de ces paramètres afin de minimiser la fonction de coût du cristal photonique[59, 60, 19, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71].

La dernière méthode, consistant à associer un certain nombre de paramètres au motif du cristal photonique et à optimiser chacun de ces paramètres, peut générer aussi bien des cristaux photoniques relativement simples et classiques – par exemple en déformant une sphère pour devenir une ellipsoïde si deux dimensions seulement sont optimisées[59, 62] – que des cristaux photoniques dans lesquels la zone optimisée perd toutes les caractéristiques propres au cristal photonique[19, 63]. On parle alors d'optimisation topologique et on obtient des structures photoniques avec des zones dans lesquelles aucun motif périodique n'apparaît, puisque ces motifs ont été remplacés par une géométrie complètement différente de celle du motif initial. La différence entre les deux techniques est représentée sur la figure 1.2.

1. Il n'y a pas d'âge pour avoir envie de jouer aux legos!



(a) Jianhua Jiang, Jingbo Cai, Gregory P. Nordin, and Lixia Li, "Parallel microgenetic algorithm design for photonic crystal and waveguide structures," *Opt. Lett.* 28, 2381-2383 (2003)

(b) Jensen, Jakob S., and Ole Sigmund. "Topology optimization of photonic crystal structures : a high-bandwidth low-loss T-junction waveguide." *JOSA B* 22.6 (2005) : 1191-1198.

FIGURE 1.2 – Différence entre l'optimisation classique (a) et l'optimisation topologique (b) de cristaux photoniques[59, 63]. L'optimisation classique consiste à déformer légèrement les motifs intrinsèques de la structure, alors que l'optimisation topologique permet de s'affranchir de toute contrainte géométrique.

1.2.3 Généralisation de l'optimisation en photonique

Les filtres multicouches et les cristaux photoniques ne sont pas les seuls types de structures photoniques à avoir bénéficié des techniques d'optimisation.

Mak et al.[72] utilisent en 2016 un algorithme PSO binaire (*BPSO, pour Binary Particle Swarm Optimization*), inspiré du déplacement des essaims (vol d'oiseau ou banc de poissons), pour optimiser des structures séparateurs de champ. Une structure photonique est alors représentée par un individu dans un groupe, et à chaque individu est attribué une position ainsi qu'une vitesse. Ces positions et vitesses sont mises à jour en fonction de la direction donnée par les meilleurs éléments du groupe, c'est-à-dire ceux qui ont une valeur de fonction de coût la plus basse. Itérations par itérations, l'algorithme privilégie une direction qui génère la solution optimisée. Les auteurs divisent leur structure en quatre parties, optimisent un quart de la cellule et imposent une symétrie pour constituer l'ensemble de leur structure. Le quart de cellule optimisée est divisé en pixels et chacun de ces pixels se voit attribuer une absence ou une présence de matériau. L'optimisation est effectuée en deux étapes, la première leur permet d'obtenir une structure dont le profil de matériau est continu, puis cette configuration continue est discrétisée pour obtenir une structure finale avec seulement deux matériaux.

De nombreuses études ont porté sur l'optimisation de structures photoniques à partir d'algorithmes inspirés de l'évolution naturelle d'une population. Dans la plupart des cas, les algorithmes représentent chaque paramètre à optimiser en tant que "gène", et chaque structure à évaluer en tant qu'individu appartenant à une population. Avec différents procédés de mutations et de croisements, une population initiale est amenée à évoluer en générant de nouveaux individus – donc de nouvelles structures photoniques – et une évaluation permet de conserver uniquement les individus les meilleurs – ceux ayant les fonctions de coût les plus basses. Plusieurs versions d'algorithmes génétiques, ou évolutionnaires, existent – une multitude en fait. Ces algorithmes ont été utilisés pour optimiser aussi bien des multicouches[73, 42, 44, 41, 74] que des structures 2D ou 3D plus complexes, comme des antennes optiques[75, 76], des metasurfaces[77], des cristaux photoniques[56, 53] ou des cavités optiques[78]. La plupart du temps ces structures comportent deux matériaux différents, et sont optimisées en divisant

l'espace en pixels, chacun de ces pixels se voyant attribuer l'un ou l'autre des matériaux[79, 55, 80, 58, 81]. Les méthodes permettant d'optimiser directement les dimensions des motifs de la structure sont plus rares[54].

Enfin, certaines études ont été menées sur la pertinence de combiner deux types de méthodes d'optimisation : une globale pour trouver la direction du minimum global de la fonction de coût, s'il existe, suivi d'une optimisation locale pour perfectionner la solution obtenue avec l'optimisation globale mais en gagnant du temps de calcul. C'est ce qu'ont par exemple choisi de faire en 2006 Jiao et al.[82] avec des cristaux photoniques divisés en pixels remplis – ou non – de motif, Ghebrebrhan et al. en 2009 pour optimiser des structures multicouches, et Oskooi et al. en 2012 en s'intéressant à des guides d'ondes[83].

L'optimisation s'est donc généralisée dans tous les sous-domaines de la photonique, avec un succès modéré et des résultats ou des méthodologies rarement très convaincantes, si on veut être réaliste. Chaque article publié fait mention d'un algorithme d'optimisation soit directement inventé par les auteurs, soit choisi un peu au hasard parmi tous les algorithmes existants. Quand l'algorithme n'est pas inventé, il est adapté à la main pour qu'il fonctionne mieux que l'algorithme original sur un cas précis testé[23, 41]. Il est donc difficile de comparer les méthodes les unes aux autres puisqu'elles n'ont pas été développées pour répondre aux mêmes problèmes et se concentrent spécifiquement sur un type très précis de structure photonique. Les résultats présentés manquent souvent de qualité et ce sur deux points en particulier. D'abord, beaucoup de travaux consistent à optimiser un nombre très restreint de paramètres (inférieur à 5) à partir d'une géométrie globale très contrainte[73]. On peut alors se demander en quoi l'utilisation d'algorithme global d'optimisation est pertinent, puisque les algorithmes globaux sont performants pour optimiser de l'ordre d'une centaine de paramètres. Pour un nombre de paramètres très restreint, il semble plus logique d'utiliser une descente de gradient ou de réaliser une optimisation à la main qui permet de sonder le paysage de la fonction de coût de façon précise. Ensuite, quand le nombre de paramètres est plus grand, les structures-solutions en elles-mêmes ne sont souvent pas convaincantes : les structures sont en général chaotiques, il n'est pas possible de comprendre physiquement pourquoi elles fonctionnent, et une légère modification de la structure ferait probablement chuter l'efficacité de la structure. Les structures obtenues par optimisation ne sont d'ailleurs en général ni utilisées ni fabriquées suite à leur publication[18, 84].

1.2.4 L'optimisation topologique

L'optimisation topologique est une approche qui s'est d'abord développée en mécanique, un domaine dans lequel elle a été utilisée avec succès pour élaborer des structures mécaniques variées (ponts, tours) par Bendsoe et Sigmund[85]. Cette méthode consiste tout d'abord à décrire la structure en la définissant par un très grand nombre de paramètres (par ses contours ou sa densité) et en limitant ainsi tous les biais liés à cette paramétrisation. Ensuite, on utilise une méthode assimilable à une descente de gradient parce que le calcul du gradient, malgré le très grand nombre de paramètres, reste peu coûteux grâce à la formalisation en problème adjoint[86]. En effet, une optimisation classique par descente de gradient nécessite de calculer, pour chaque paramètre à optimiser, la direction dans laquelle la fonction de coût décroît. Cela représente donc autant de calculs que ce qu'il existe de variables d'optimisation – typiquement plusieurs milliers – si on ne dispose pas d'information supplémentaire sur la fonction de coût. La méthode adjointe permet, à chaque évaluation de la fonction de coût, d'évaluer le gradient en utilisant seulement deux fois le coût d'une fonction de coût – et ce quelque soit le nombre de paramètres

total à optimiser. Cela diminue donc fortement le temps de calcul nécessaire à l'évaluation du gradient. L'optimisation topologique en mécanique permet alors d'obtenir des structures souvent assez complexes géométriquement, très surprenantes mais en général aussi très efficaces.

Encouragé par le succès de l'optimisation topologique en mécanique, Sigmund s'est ensuite intéressé à l'optimisation topologique appliquée à des problèmes multiphysiques tels que des systèmes micro-mécaniques couplés à des circuits électriques[15]. L'optimisation topologique s'est ensuite propagée dans quasiment tous les domaines de la photonique : les cristaux photoniques[19, 63, 67], les séparateurs d'onde[61], les fibres optiques[87], les antennes optiques[88], les commutateurs[49], la plasmonique[89], ou encore l'intégration sur silicium[90]. Jensen et Sigmund publient en 2011 un article dédié à l'optimisation topologique en nanophotonique, dans lequel ils expliquent leur méthode, et présentent de nombreuses applications en photonique, encourageant par cela toute la communauté de photonique à exploiter l'optimisation topologique[91].

L'optimisation topologique est une technique rapide et efficace de génération de structures photoniques en tout genre, et vient pour cela dominer toutes les autres techniques d'optimisation en quelques années. En 2011, Sigmund publie un article intitulé *On the usefulness of non-gradient approaches in topology optimization*[92] dans lequel il explique que les doctorants "*ne devraient pas passer trois ans de leur vie de recherche à travailler avec des méthodes qui sont de toute évidence inférieures à des méthodes existantes*"². Cette conclusion, à laquelle on peut adhérer pour ce qui concerne la mécanique, où les solutions générées semblent particulièrement satisfaisantes, doit sans doute être modulée pour ce qui est de la photonique – et l'auteur le fait légèrement en mentionnant que pour un problème avec un grand nombre de minimum locaux, la méthode pourrait se révéler moins adaptée.

L'optimisation topologique se présente pourtant comme un aboutissement de l'optimisation de structures photoniques[20]. Cependant, la nature chaotique des solutions générées par descente de gradient suscite une interrogation. Il est inévitable de tomber dans un minimum local (et non global) en utilisant une méthode intrinsèquement locale. Dès lors, est-ce qu'il n'existe pas une autre solution bien meilleure ailleurs dans l'espace des paramètres? Il est impossible de répondre à cette question sans utiliser des algorithmes d'optimisation globale permettant d'explorer plus largement l'espace des paramètres, ou bien sans analyser physiquement les solutions qui sont optimisées. Des critères comme la régularité d'une structure photonique, la récurrence de l'apparition de la solution lorsqu'on exécute plusieurs fois les algorithmes à partir de structure initiale différente, ou bien la possibilité de comprendre pourquoi la structure-solution est une réponse au problème posé sont des pistes à explorer pour savoir si les structures optimisées sont proches d'être optimales. Et pour l'instant, les quelques études qui portent sur la dépendance au point de départ pointent vers un très grand nombre de minima locaux, les tout meilleurs résultats étant rarement obtenus de façon systématique[93]. Cette grande différence entre les résultats de l'optimisation topologique en mécanique et les résultats en photonique peut sans doute s'expliquer pour une raison physique très fondamentale : en optique, la moindre structure, même la plus simple, est résonante. Cela implique que sa réponse optique, quelle qu'elle soit, oscille en fonction de ses dimensions ou de ses propriétés optiques, particulièrement dans le cas de résonances de cavité, extrêmement courantes. Une simple couche ou une simple sphère diélectrique se comportent comme des cavités.

2. Traduit de l'anglais par mes soins.

1.3 Sur l'optimisation globale

Aujourd'hui, il semble que l'optimisation topologique a écarté toutes les autres méthodes d'optimisation en photonique. Cependant les algorithmes d'optimisation globale qui ont été utilisés avant la domination de l'optimisation topologique ont bien évolué ces 20 dernières années sans qu'une remise en question de leur efficacité en photonique ne soit réalisée. Toute une diversité d'algorithmes globaux modernes intéressants ont pourtant vu le jour mais ont peu – ou parfois de façon discutable – été utilisés en photonique. Nous allons donc faire un point sur l'optimisation globale et ses progrès récents.

1.3.1 Le développement des algorithmes d'optimisation globale

Les algorithmes d'optimisation globale ont très souvent été créés en s'inspirant de comportements observés dans la nature ou d'analogies avec d'autres procédés.

Dès 1950, Turing a l'idée de s'inspirer de l'évolution pour tenter de générer des machines intelligentes[94]. Dans les années 1970, Holland et al. s'inspirent des idées de Turing et proposent une méthode d'optimisation basée sur l'évolution d'une population[7]. Cela donnera naissance plus tard à l'émergence de nombreux algorithmes génétiques et évolutionnaires, où plusieurs solutions représentent une "population" et le but de l'algorithme est de faire évoluer la population en créant de nouveaux "individus" à partir d'opérations de "croisements", de "mutations" et de "sélection" sur la population existante.

Kirkpatrick et al. proposent en 1983 une méthode d'optimisation qu'ils nomment *Simulated Annealing* (SA) (ou recuit simulé en français), qui est inspirée d'un procédé thermodynamique consistant à refroidir puis réchauffer par cycles un matériau, afin que les atomes de ce matériau puissent occuper l'état d'énergie le plus faible possible. En réalisant une analogie, le procédé thermodynamique peut s'adapter à l'optimisation de n'importe quel système, qu'il soit thermodynamique ou non. Une solution est alors l'ensemble des "états d'énergie" occupés par l'ensemble des "atomes" d'un "matériau", chacun des atomes représentant un paramètre du problème à optimiser. "L'énergie thermique" prend alors le rôle de la fonction de coût à minimiser[95].

En 1992, Dorigo s'inspire de l'organisation des colonies de fourmis pour créer un algorithme, nommé *Ant Colony Optimization*, dans lequel des "agents" partent explorer l'espace des paramètres à la recherche de "source de nourriture" et s'échangent des "phéromones" pour indiquer quelle est la direction la plus prometteuse[96].

En 1994, Radcliffe et Surry[97] proposent un algorithme génétique agrémenté d'une exploration locale des paramètres, concept qui sera repris en 2011 par Ai et Wang[98]. En 1995, Kennedy et Eberhart proposent l'algorithme *Particle Swarm Optimization*, cette fois inspiré du déplacement de bancs d'oiseaux, d'insectes ou de poissons. Les solutions sont des "individus" auxquels sont rattachés des "positions" et des "vitesses", qui sont mises à jour à chaque itération de l'algorithme pour "diriger" le banc d'individus dans la "bonne direction", guidée par la position et vitesse des individus pour lesquels la direction est la plus prometteuse[12].

En 2001, Geem et al. proposent un nouvel algorithme nommé *Harmony Search* cette fois en faisant une analogie avec l'improvisation en musique : les "notes" sont des paramètres à optimiser, l'itération est vue comme une "répétition" et la fonction objectif est devenue une "fantastique harmonie"[99]. Pour générer des nouvelles solutions, des combinaisons de solutions existantes sont générées et évaluées, ce qui est très similaire aux transformations ayant lieu dans les algorithmes évolutionnaires. En 2004, Nakrani et Tovey proposent un algorithme inspiré de l'organisation des abeilles, avec des "agents reproducteurs" et des "abeilles travailleuses"[100].

Suite aux travaux de Holland de 1992[7], une pléthore de variantes d'algorithmes génétiques ou évolutionnaires voient le jour. Dès 1997, Back et al. publient une revue sur les algorithmes évolutionnaires et leurs applications, tout en précisant que bien que nous sachions que ces algorithmes fonctionnent, nous ne savons pas pourquoi[101]. La même année, Storn et Price publient leur algorithme *Differential Evolution*, reprenant le concept de la reproduction sexuée d'une population[13], et qui va devenir une des références principales parmi les algorithmes évolutionnaires. Une multitude de variantes de cet algorithme est ensuite proposée, avec quelques modifications pour l'adapter à de l'optimisation discrète[102, 103, 104], ou simplement le perfectionner pour des problèmes spécifiques[105, 106]. En parallèle, les stratégies d'évolution inspirée de la reproduction non sexuée d'une population sont beaucoup étudiées. En 2001, Hansen et Ostermeier publient l'algorithme CMA-ES, pour *Covariance Matrix Adaption Evolution Strategy*, qui va lui aussi devenir l'un des principaux algorithmes utilisés, car efficace avec des petites populations – et nécessitant donc moins de temps de calcul. En 2002, Beyer et Schwefel publient une *review* sur les stratégies d'évolutions, les algorithmes évolutionnaires et les algorithmes génétiques, en présentant des variantes de stratégie d'évolution basée sur

- un seul parent et un seul enfant : $(1+1)$ -ES,
- plusieurs parents et un seul enfant : $(\mu+1)$ -ES,
- plusieurs parents et plusieurs enfants : $(\mu+\lambda)$ -ES, avec une sélection sur l'ensemble de la population,
- plusieurs parents et plusieurs enfants avec une sélection uniquement parmi les enfants : (μ, λ) -ES.

Plusieurs autres variantes de stratégies d'évolutions sont publiées les années suivantes[107, 108, 109, 110], ainsi que des variantes d'algorithmes génétiques[111, 112, 5].

Nous nous retrouvons ainsi avec une pléthore d'algorithmes d'optimisation globale inspirés par la nature. Bien qu'il soit passionnant d'étudier chacun des algorithmes et de constater la richesse de l'imagination humaine pour faire des analogies en tout genre, on aimerait savoir quel algorithme est le meilleur. Où plutôt, on aimerait déjà savoir s'il existe un algorithme meilleur que les autres, et comment juger qu'un algorithme est meilleur qu'un autre. Ces questions sont majeures pour toutes les communautés utilisant l'optimisation et représentent un domaine d'étude à part entière : le benchmarking.

1.3.2 La comparaison des algorithmes

Le benchmarking a émergé de la volonté de comparer les algorithmes d'optimisation entre eux et de savoir si chacun d'eux étaient capables de trouver le minimum (alors connu) de fonctions mathématiques connues, et lesquels parviennent à le faire le plus rapidement. Si les fonctions mathématiques étaient simples au départ, ne présentant par exemple qu'un seul minimum global, on les a petit à petit complexifiées pour tester la résilience des algorithmes d'optimisation. On a alors travaillé sur des fonctions présentant plusieurs minima locaux, et des problèmes de dimension de plus en plus grande. La majorité des problèmes d'intérêts présentaient alors un trop grand nombre de paramètres pour que la résolution par descente de gradient soit envisagée : il s'agit d'une méthode trop coûteuse en temps de calcul puisqu'il faut calculer autant de fois la fonction de coût que de degrés de liberté du problème, typiquement. En effet, la méthode adjointe que nous avons mentionnée précédemment n'est exploitable que dans le cadre de la résolution des équations de Maxwell, mais pas pour n'importe quel problème en général. Quand on fait du benchmarking sans avoir d'information spécifique sur les fonctions de coût, les méthodes basées sur le calcul du gradient ne sont donc souvent même pas considérées.

De nombreuses bibliothèques d'optimisation, regroupant plusieurs algorithmes, ont été implémentées et partagées avec la communauté scientifique[113, 114, 115]. Des références, appelées *benchmarks* et présentant les performances des différents algorithmes sur les différentes fonctions, ont vu le jour[116, 117, 118, 119]. Les différentes équipes de recherches peuvent alors utiliser les résultats des benchmarks pour

- Choisir l'algorithme qui leur semble le plus pertinent par rapport à leur propre fonction à optimiser ;
- Comparer de nouveaux algorithmes aux algorithmes existants, en les testant sur les mêmes fonctions[105, 120, 121, 122].

Des équipes de recherche ont également développé des algorithmes dont le but est de sélectionner le meilleur algorithme d'optimisation, en fonction des données du problème donné en entrée[123, 115]. Ces algorithmes appelés "Wizards" permettent de ne pas se poser trop de questions mais sont source de nouvelles interrogations : sur le budget total attribué à l'optimisation, quel pourcentage faut-il attribuer à la recherche de l'algorithme le plus adapté ?

Bien que tous ces outils soient très utiles, de nombreux biais peuvent cependant apparaître lors de l'exploitation des benchmarks et la question des bonnes pratiques de benchmarking se pose régulièrement[124, 125, 126].

1. La façon dont les résultats sont représentés graphiquement peut influencer les conclusions. Montrer l'intégralité des résultats peut être source de confusion et faire perdre tout intérêt à l'étude, la présentation des meilleurs résultats uniquement peut en revanche faire surévaluer un algorithme par rapport à un autre. Il faut donc choisir un compromis entre clarté et exhaustivité, compromis qui est loin d'être systématiquement adopté.
2. Les méthodes sont non déterministes, ce qui implique que nous ne sommes pas capable de prédire le résultat à partir des données initiales du problème. Il est donc nécessaire d'exécuter un grand nombre de fois les mêmes optimisations pour réaliser des études statistiques sur les résultats obtenus, afin de s'assurer de la reproductibilité et répétabilité des méthodes[127].
3. La plupart des algorithmes comportent des paramètres intrinsèques appelées **hyperparamètres**. Il est possible de fixer à l'avance ces hyperparamètres, ou bien de laisser le soin aux algorithmes de les adapter au fur et à mesure de l'exécution (c'est ce qu'on appelle des *self-adaptive parameters*). Lorsqu'un nouvel algorithme est implémenté puis testé sur des benchmarks existants, il arrive que l'algorithme soit sur-paramétré[112] : les valeurs des paramètres intrinsèques ont été réglées pour que l'algorithme génère les meilleurs résultats possibles sur les fonctions utilisées pour le test, alors que les algorithmes de référence auquel le nouvel algorithme est comparé ne bénéficient pas d'un réglage similaire[128].
4. Les algorithmes sont souvent comparés sur des fonctions tests mathématiques dont le minimum est situé à 0, et sur des problèmes qui sont invariant par translation ou par rotation. Lorsque nous entraînons des algorithmes sur ces problèmes, cela peut donc générer des algorithmes qui ne sont pas forcément efficaces pour trouver le minimum d'une fonction mais pour s'approcher de zéro. Or la plupart des fonctions correspondant à des problèmes réels ne voient pas leur minimum à zéro, et ne sont pas non plus invariant par translation ou rotation. Les résultats des comparaisons sont donc biaisés. Pour lutter contre ce biais, il est possible de translater la fonction objectif[122] ou bien il faut comparer les algorithmes directement sur des fonctions qui représentent des problèmes réels[129, 130], comme par exemple ceux de photonique.

Il est donc nécessaire, si nous souhaitons réaliser des optimisations globales, de réaliser une étude rigoureuse comparant différents algorithmes sur plusieurs fonctions de coût en évitant un maximum tous les biais mentionnés ci-dessus. Ce genre d'étude est très peu et assez mal réalisé en photonique. La pratique est plutôt de ne tester qu'un seul algorithme et d'étudier la structure optimisée par celui-ci. Il est alors souvent compliqué de justifier pourquoi un algorithme précis a été utilisé plutôt qu'un autre. Lorsque les études de comparaison d'algorithmes pour la photonique sont menées, la méthodologie est originale – au sens où elle ne respecte pas les standards de la communauté de l'optimisation, en se basant par exemple sur les courbes de convergence. Les conclusions obtenues[131] peuvent sembler aller à l'encontre des résultats de benchmarks plus précis[132, 133].

Discussion

En photonique comme dans d'autres domaines de la physique, on peut distinguer deux types très différents d'optimisation :

1. **L'optimisation topologique** qui s'affranchit de contraintes géométriques importantes en considérant de l'ordre du millier de paramètres à optimiser. Il est alors presque impossible d'utiliser autre chose que des méthodes à base de gradient, les algorithmes globaux étant inefficaces dans ce cadre. Les techniques à base de gradient fonctionnent bien en mécanique, dont est issue la philosophie d'optimisation topologique, car les paysages des fonctions sont relativement simples. Elles génèrent des structures régulières et compréhensibles. Ce n'est pas le cas en optique où le nombre très important de résonances de cavité provoque autant de minima locaux dans le paysage. Ces nombreux minima locaux expliquent le caractère généralement peu convaincant de l'optimisation topologique – à cause du désordre qui émerge systématiquement dans toutes les structures optimisées, les rendant difficiles à comprendre, et à cause de la sensibilité extrême au point de départ de l'optimisation[93].
2. Pour réduire le nombre de paramètres nécessaires et simplifier le problème d'optimisation, il faut trouver une description des structures qui n'introduit pas trop de biais tout en nous permettant de décrire une grande variété de structures. Il s'agit **d'optimisation paramétrique**, pour laquelle la structure est typiquement décrite par des blocs de matière dont les dimensions sont à optimiser. Le nombre de paramètres à optimiser est alors en général inférieur à la centaine. Dans ce cas, les algorithmes d'optimisation globale fonctionnent bien, et ils sont alors souvent préférés (et préférables) à des algorithmes d'optimisation locale.

Presque paradoxalement, alors qu'on a vu que les algorithmes basés sur le gradient sont quasiment absents des benchmarks, ce sont ces algorithmes qui se sont imposés via l'optimisation topologique en mécanique et en photonique.

Les travaux menés jusqu'à maintenant sur l'optimisation paramétrique de structures photoniques, en particulier à l'aide d'algorithme d'optimisation globale, semblent manquer d'un cadre rigoureux qu'il nous semble intéressant de tenter d'établir, du moins en partie. En utilisant moins d'une centaine de paramètres pour définir les structures photoniques que nous allons optimiser, nous garantissons à la fois (i) que l'utilisation d'algorithmes d'optimisation globale est pertinente et (ii) que les structures photoniques sont suffisamment diversifiées et libres pour répondre à des problèmes photoniques complexes tout en laissant la possibilité de voir émerger de la régularité – voire de la périodicité. C'est donc sur ce domaine de fonctionnement que nous

allons nous concentrer dans la suite, parce qu'il permet d'établir les choses plus fermement.

Il est courant d'utiliser des benchmarks pour comparer les algorithmes d'optimisation globale entre eux. Nous allons pouvoir réaliser une comparaison des algorithmes les plus classiques sur des fonctions de photonique en nous inspirant des recommandations issues de la pratique des benchmarks, ce qui n'a jusqu'alors presque pas été effectué en photonique – et qui est souvent mal réalisée dans les autres disciplines. L'explosion de métaphores pour inventer des nouveaux – parfois pas si nouveaux – algorithmes d'optimisation ou des variantes d'algorithmes déjà existants engendre de sérieux biais qui ont été très bien relevés par Sörensen en 2015[134]. De part la trop grande diversité d'algorithmes et le désir de montrer qu'on a trouvé ou inventé un algorithme qui fonctionne mieux que les autres, les auteurs s'empressent de paramétrer un algorithme pour qu'il soit le plus efficace possible sur certains problèmes spécifiques puis le comparent à d'autres algorithmes classiques ne bénéficiant pas du tout d'un tel réglage. Peut-on alors rigoureusement affirmer que l'algorithme présenté est meilleur que les autres? Par ailleurs, est-ce qu'un algorithme issu d'une analogie pas encore réalisée jusqu'alors est nécessairement un "nouvel" algorithme? Ou bien constitue-t-il une redite d'un algorithme existant depuis longtemps mais défini à travers une analogie différente? Reprenons par exemple le cas de l'algorithme Harmony Search, une "nouvelle" méthode d'optimisation publiée par Geem et al. et qui se voit citer plus de 6000 fois[99]. Fondée sur une analogie musicale, l'algorithme dispose de différents instruments jouant différentes notes de musique. Le but de l'algorithme est de trouver la meilleure harmonie possible qui lui permette de résoudre le problème en cours d'optimisation. Plusieurs harmonies sont initialement tirées au hasard, puis des transformations sur ces harmonies sont effectuées pour en générer des nouvelles, et si les nouvelles sont plus performantes que les anciennes, alors elles les remplacent. Bien que qualifiée de "nouvelle" méthode d'optimisation, l'algorithme décrit dans la publication est en réalité tellement similaire à un algorithme génétique qu'il devient compliqué d'expliquer quelles en sont les différences. Les auteurs de la méthode ont donc re-découvert environ 20 ans plus tard un algorithme déjà connu et bien utilisé, et beaucoup de personnes n'y ont vu que du feu comme en témoigne le nombre élevé de citations. Sörensen déplore que bien souvent, les analogies, au lieu de servir la cause, rendent plus difficile la compréhension du fonctionnement de l'algorithme, en particulier à cause du vocabulaire employé : utiliser une "harmonie" ou un "individu" plutôt qu'une "solution", et des "notes" ou des "gènes" plutôt que des "paramètres" n'a pas grand sens selon lui. Il insiste sur la nécessaire comparaison rigoureuse des algorithmes, et insiste sur le fait que dans l'idéal, plus aucun nouvel algorithme ne devrait être accepté par les éditeurs sans avoir passé un benchmark complet et rigoureux.

Au moment où cette thèse commence, nous avons alors connaissance (i) d'algorithmes d'optimisation qui sont les plus couramment utilisés dans les benchmarks (PSO, DE, Nelder-Mead...) mais sous-utilisés en photonique parce que liés à l'optimisation paramétrique, (ii) de la difficulté de comparer des algorithmes les uns aux autres en évitant les biais, (iii) du relatif échec de l'optimisation paramétrique à convaincre face à l'optimisation topologique, même si les résultats fournis par cette dernière sont discutables.

La régularité, indice d'optimalité

Une direction, tracée par un maître pour
son élève
Un souffle liant l'élève à son maître
Le Vent et la Voie.

Le Pacte des Marchombres, La Prophétie
Pierre Bottero

Introduction

Les structures régulières en photonique ont d'abord été inventées pour répondre à des besoins technologiques : nous nous sommes naturellement tourné vers des structures périodiques pour obtenir des composants photoniques capables de manipuler la lumière selon nos besoins. L'idée remonte aussi loin que Lord Rayleigh[3], qui présentait que ces structures étaient présentes dans la nature. Mais c'est après que la communauté s'est intéressée à la conception de cristaux photoniques en tout genre qu'elle a découvert à quel point ces structures étaient omniprésentes.

Les structures photoniques naturelles sont en effet très fréquentes autour de nous. Ce sont ces structures photoniques qui sont à l'origine de la couleur éclatante de certains scarabées ou papillons[135]. La particularité de ces structures sont qu'elles présentent systématiquement une forme de **régularité** : elles sont périodiques, semi-périodiques, ou varient graduellement en épaisseur.

Les structures régulières étant très représentées dans la nature, la régularité des structures photoniques semble être une caractéristique qui émerge spontanément et qu'il est normal de retrouver. Dès lors, on pourrait s'attendre à ce que les méthodes d'optimisation, en particulier celles qui sont inspirées de la nature, génèrent des structures elles aussi régulières.

Pourtant, les structures optimisées ne présentent que rarement une telle régularité. Martin et al. publient en 1995 des structures multicouches optimisées avec un algorithme génétique. Ils réalisent différents tests, en essayant par exemple d'optimiser un antireflet dans l'infrarouge, ou un filtre optique permettant de réfléchir une bande du spectre électromagnétique visible[73]. Les structures optimisées qu'ils obtiennent alors ne sont ni régulières, ni très performantes.

Gondarenko et al. présentent en 2006 les premiers travaux d'optimisation photonique laissant émerger spontanément de la régularité, à notre connaissance[78] – même si on peut détecter

certain motifs dans les structures obtenues grâce à Needle[36]. En souhaitant obtenir une structure capable d'amplifier et de confiner la lumière, Gondarenko *et al.* obtiennent grâce à un algorithme évolutionnaire une cavité rappelant un miroir de Bragg mais avec des couches semi-circulaires plutôt que planes. Les travaux de Gondarenko et ses collègues s'inscrivent dans le cadre de l'optimisation topologique dans la mesure où ils divisent leur structure en une multitude de pixels. Chacun des pixels est ensuite rempli, par optimisation, par un matériau parmi deux possibilités : un matériau d'indice bas ($n_1 = 1.15$) ou un matériau d'indice haut ($n_2 = 3.5$). La structure étant divisée en des pixels suffisamment petits et nombreux, il est possible d'obtenir toute forme de topologie de structure.

Ces travaux sont les premiers, à notre connaissance, témoignant que de la régularité peut émerger spontanément à l'issue d'une optimisation. En effet tous les autres travaux présentent soit des structures chaotiques, soit la régularité apparente des structures optimisées est en réalité imposée. On retrouve par exemple des travaux d'optimisation topologique imposant une symétrie à la structure et optimisant uniquement une petite partie de la structure globale[63]. On retrouve aussi des travaux d'optimisation paramétrique dans lesquels la périodicité – des cristaux photoniques par exemple – est imposée et seules les dimensions des périodes sont optimisées par des descentes de gradient ou des méthodes globales d'optimisation[136].

La rareté de structures optimisées régulières interroge. Est-ce que la régularité n'apparaît pas parce que les algorithmes ne fonctionnent pas assez bien ? Est-ce le problème à optimiser qui est trop complexe pour pouvoir être résolu par les algorithmes d'optimisation ? Est-ce que les structures régulières ne sont finalement pas des structures proches d'être optimales, et que le désordre des structures permettrait d'obtenir de meilleures propriétés ? Les résultats de Gondarenko et ses collègues laissent penser qu'obtenir des structures optimisées régulières est le signe qu'une optimisation est réussie. Le fait de ne pas réussir à retrouver les structures photoniques naturelles serait donc une preuve que les méthodes d'optimisation utilisées ne sont pas suffisamment efficaces.

Afin d'établir une stratégie d'optimisation paramétrique de structures photoniques efficaces, nous proposons dans ce chapitre de rechercher par optimisation des structures photoniques naturelles. Il faut tout d'abord traduire notre intuition physique en fonction de coût, et vérifier que les solutions espérées émergent alors de façon systématique, notamment en menant une étude statistique sur les résultats. Nous proposons de plus de comparer l'efficacité de 6 algorithmes d'optimisation les plus classiques. En nous appuyant sur les méthodes de comparaison habituellement utilisées pour évaluer les performances de différents algorithmes d'optimisation[122], nous allons en fait construire un benchmark permettant de comparer quelles sont les performances relatives de chacun des algorithmes testés, sur chacun des problèmes photoniques identifiés.

2.1 Description des fonctions de coût utilisées

Les fonctions de coût que nous avons utilisées sont une traduction directe de notre intuition physique sur le rôle des structures photoniques que l'on trouve dans la nature.

1. Le miroir de Bragg est connu pour être la structure multicouche la plus efficace pour réfléchir une longueur d'onde spécifique[137]. Les miroirs de Bragg sont, de plus, souvent présents sur les carapaces des scarabées et sont à l'origine des couleurs éclatantes de ces insectes. On peut donc penser qu'en prenant une fonction de coût permettant de maximiser la réflexion à une longueur d'onde, on pourrait retrouver ces structures. Nous

avons pris, de plus, la fonction de coût la plus simple possible

$$cf_1 = 1 - R(\lambda_0),$$

où λ_0 est la longueur d'onde de travail.

2. Le miroir diélectrique à gradient d'épaisseur constitue une autre structure naturelle retrouvée sur les carapaces de certains scarabées. Ce sont des structures qui ont la particularité de réfléchir une partie différente du spectre électromagnétique en fonction de la profondeur de la structure. Les endroits où les couches sont les plus fines réfléchissent des longueurs d'onde plus courtes que les couches les plus épaisses. Pour retrouver ces structures, nous avons donc imaginé une fonction de coût permettant de maximiser la réflexion de plusieurs longueurs d'onde d'une large bande du spectre électromagnétique. La fonction est définie par

$$cf_2 = 1 - \frac{1}{8} \sum_{n=0}^7 r(\lambda_n)$$

avec $r(\lambda_n)$ le coefficient de réflexion de la structure calculé pour la longueur d'onde $\lambda_n = \{500, 550, 600, 650, 700, 750, 800, 850\}$ nm. Ces différentes longueurs d'ondes sont espacées de manière à couvrir une plage plus large que la bande interdite naturelle d'un miroir de Bragg avec le même contraste d'indice, afin qu'il ne constitue pas une solution évidente.

3. Les ailes du papillon *Morpho Rethenor* sont constituées de motifs qui ressemblent à des sapins en coupe transversale et qui forment un réseau de diffraction. Ce réseau est connu pour diffuser la lumière bleue. Nous avons donc pensé qu'une fonction de coût maximisant la réflexion d'une longueur d'onde de 450 nm dans les ordres +1 et -1 de diffraction, tout en minimisant la réflexion d'ordre 0 des autres longueurs d'onde du spectre électromagnétique visible permettrait de retrouver les structures emblématiques du Morpho. La fonction de coût prend alors la forme

$$cf_3 = 1 - \frac{1}{2}(r_{+1}(450) + r_{-1}(450) - r_0(450)) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_0(\lambda_i)$$

avec $\lambda_i = \{300, 400, 500, 600, 700, 800\}$.

Pour calculer les coefficients de réflexion des structures multicouches nous avons utilisé un logiciel de simulation pour l'électromagnétisme appelé Moosh[138] qui est disponible en libre accès, basé sur les matrices de scattering pour une stabilité numérique assurée. Pour calculer les coefficients de réflexion spéculaires et non spéculaires des structures en réseaux nous avons utilisé un code standard de décomposition modale des ondes RCWA (pour Rigorous Coupled Wave Analysis)[11].

2.2 Description des algorithmes d'optimisation utilisés

Toutes les fonctions de coût que nous considérons sont des problèmes pour lesquels le calcul du gradient est coûteux. Nous nous tournons donc vers des algorithmes modernes d'optimisation qui ne soient pas basés sur le gradient pour effectuer les optimisations. Nous avons sélectionné six algorithmes les plus couramment utilisés dans la littérature et s'avérant efficaces pour résoudre des problèmes comprenant entre une dizaine et une centaine de paramètres.

1. **(1+1)-ES[122]** est un algorithme classique de stratégie d'évolution basé sur la reproduction d'une population un peu similaire à une colonie de bactéries. Il s'agit donc d'une reproduction asexuée au sens où si les individus évoluent, il échangent peu d'information. Un seul parent et un seul enfant sont considérés pour réaliser les transformations ;
2. **Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMAES[139])** est un algorithme également basé une stratégie d'évolution. Le principe est de générer aléatoirement une population de solutions candidates à partir d'une distribution normale, puis d'adapter les paramètres de la distribution (alors stockés dans une matrice de covariance) en fonction de la qualité des solutions obtenues, pour ensuite générer une nouvelle population.
3. **DCMAES** est une variante de CMAES. Les deux méthodes diffèrent par la nature de la distribution normale qui contrôle les mutations de la population. Avec CMAES les solutions sont indépendantes et distribuées identiquement, et sont complètement renouvelées à chaque itération de l'algorithme. DCMAES permet de tenir compte des anciennes générations de populations pour adapter les paramètres de la distribution normale qui servira à générer la prochaine population[140].
4. **Nelder-Mead[141] (NM)** est une méthode locale (la seule que nous étudions) pour laquelle un simplexe (l'équivalent d'un triangle dans un espace à N dimensions) est considéré. Seul un point de l'espace des paramètres est déplacé à chaque itération de l'algorithme, sauf si aucune meilleure solution ne peut être générée à partir du déplacement de ce point, auquel cas tous les points du simplexe sont déplacés. C'est un algorithme considéré comme plutôt local et qui, bien que n'étant pas un algorithme évolutionnaire, leur ressemble par un certain nombre de points ;
5. **Differential Evolution[13] (DE)** est l'algorithme basé sur la reproduction sexuée d'une population, avec la mutation définie par $DE/currToBest/1$. Chaque mutation est ainsi le produit d'un croisement entre trois individus et le meilleur de la population actuelle. DE diffère des stratégies d'évolution classique par ce processus de croisement, absent des ES. ;
6. **Particle Swarm Optimization[12] (PSO)** est un algorithme inspiré par le déplacement d'essaims (vol d'oiseaux, bancs de poissons, etc) pour lequel les individus évoluent selon leur vitesse, qui est influencée par les positions des meilleurs individus connus.

Tous ces algorithmes comportent des paramètres intrinsèques – aussi appelés hyperparamètres – qu'il est possible de faire varier. Chaque variation des hyperparamètres implique que nous utilisons en réalité une variante légèrement différente d'un même algorithme : les transformations effectuées sur les structures en cours d'optimisation ne respectent plus tout à fait les mêmes règles. Pour limiter les biais de comparaison que nous avons mentionné dans le chapitre précédent, nous avons donc paramétré tous les algorithmes cités au dessus avec les valeurs classiques les plus souvent utilisées.

Par ailleurs, ces algorithmes se sont révélés efficaces pour résoudre des problèmes comprenant entre une dizaine et une centaine de variables à optimiser. Si nous voulons les utiliser dans les meilleures conditions, il faut donc pouvoir définir les structures photoniques avec un nombre typiquement inférieur à la centaine de paramètres. Cette contrainte laisse en réalité une assez grande marge de manoeuvre. Les structures multicouches sont typiquement caractérisées par le nombre de couches, et chaque couche est constituée d'une épaisseur et d'un indice optique, donc nous avons deux paramètres à optimiser par nombre de couches dans la structure. Nous pouvons ainsi optimiser des structures allant jusqu'à 50 couches.

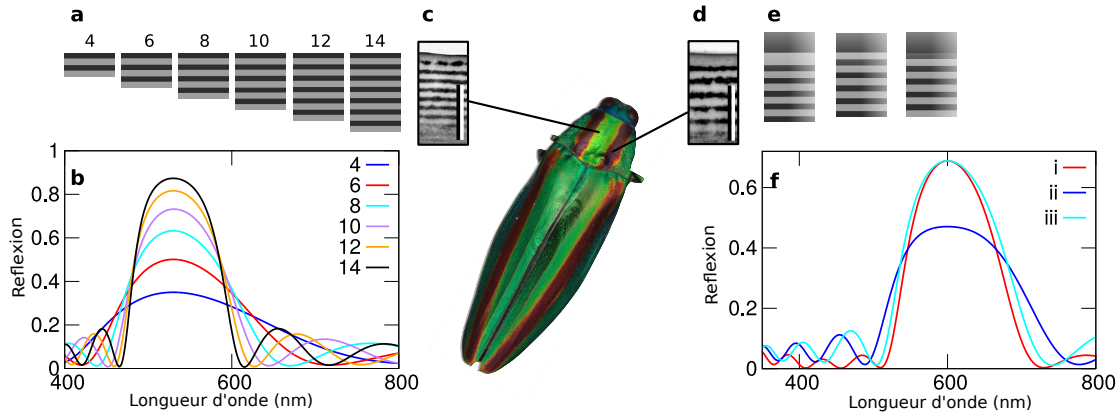


FIGURE 2.1 – L’optimisation de structures multicouches réfléchissant une longueur d’onde spécifique génère des miroirs de Bragg parfaits (a, e) qu’on retrouve dans la nature, notamment sur le scarabée *Chrysochroa fulgidissima*[135] (c, d). Les spectres de réflexion des structures optimisées montrent que la longueur d’onde réfléchie dépend de la taille de la période du miroir de Bragg (b,f). Illustration issue de [133].

2.3 Réflexion d'une longueur d'onde unique

2.3.1 Optimisation des indices et des épaisseurs optiques

Le miroir de Bragg est sans doute l’une des structures photoniques les mieux comprises. Cette structure multicouches est constituée d’un empilement de couches de deux matériaux différents ayant des épaisseurs optiques d’un quart de longueur d’onde (dans le milieu considéré). Elle permet ainsi de réfléchir très efficacement cette longueur d’onde. Plus le nombre de périodes du miroir de Bragg est important, plus la réflexion de la longueur d’onde est grande.

Les miroirs de Bragg émergent naturellement dans la nature. Ils sont par exemple présents sur les cuticules du scarabée *Chrysochroa fulgidissima*[135]. En fonction de la taille des couches, une longueur d’onde spécifique est réfléchie : verte pour des couches plus fines, et rouge pour des couches plus épaisses, comme montré sur la figure 2.1.

Il nous a semblé naturel de commencer les optimisations par les problèmes les plus simples possibles. Nous avons donc cherché à retrouver, par optimisation, les miroirs de Bragg. La fonction de coût correspondant à ce problème a été décrite par la formule

$$cf_1 = 1 - R(\lambda_0) \quad (2.1)$$

où $R(\lambda_0)$ est le coefficient de réflexion en amplitude d’une structure multicouches calculé à la longueur d’onde $\lambda_0 = 600$ nm.

Les structures multicouches sont définies par le nombre de couches qui les constituent ainsi que par les épaisseurs et indices optiques de chacune des couches. Nous avons choisi dans un premier temps d’optimiser à la fois les épaisseurs et les indices de réfraction. Nous nous sommes limités à des matériaux diélectriques, d’indice optique compris entre 1.4 et 1.7, ce qui correspond à des matériaux typiques biologiques de chitine et de mélanine souvent retrouvés sur les insectes[135]. Nous avons également limité les épaisseurs de chacune des couches dans un intervalle de 10 à 300 nm, afin de délimiter un espace des paramètres qui soit réaliste et

adapté aux capacités des algorithmes. Par ailleurs, les couches constituant les carapaces des scarabées ont des épaisseurs comprises dans cet intervalle. Un miroir de Bragg réfléchissant une longueur d'onde de 600 nm et constitué des deux matériaux utilisés devrait en effet présenter des couches de 88 et 107 nm. En prenant des valeurs beaucoup plus élevées, on introduit beaucoup plus de résonances potentielles dans chaque couche, et on complique beaucoup le problème.

Comme le nombre de couches d'une structure est fixé et ne constitue pas un paramètre d'optimisation, nous avons choisi d'optimiser des structures allant de 4 à 40 couches, soit entre 8 et 80 paramètres. Nous nous assurons ainsi que l'utilisation des algorithmes d'optimisation choisis est pertinente. Il est inutile de considérer des structures inférieures à 4 couches car l'émergence d'un miroir de Bragg est alors impossible. Il nous semble inutile également de nous intéresser à des structures comportant plus de 40 couches pour deux raisons. D'abord, dépasser 40 couches revient à demander l'optimisation de plus de 80 paramètres et nous allons voir que les algorithmes d'optimisation que nous utilisons ne sont plus adaptés. Le problème d'optimisation devient trop complexe. Ensuite, l'ajout de couches au delà de 40 couches n'apporte plus qu'une amélioration mineure au miroir de Bragg, vu les contrastes d'indice que nous utilisons. Les structures naturelles présentes sur les scarabées comportent typiquement une vingtaine de couches, ce qui constitue le centre de notre domaine d'optimisation.

Nous ne nous contentons pas d'optimiser des structures de 20 couches car il nous semble intéressant d'évaluer l'influence du nombre de couches sur les performances des algorithmes. Peut-être que certains motifs n'apparaîtront que si un nombre suffisamment grand, ou au contraire petit, de couches est disponible? Par ailleurs, optimiser directement le nombre de couches dans la structure pose une difficulté supplémentaire d'optimisation. Il ne s'agit pas de simplement rajouter un paramètre d'optimisation à ceux qui existent déjà, mais de déformer l'espace des paramètres à chaque fois que le nombre de couches change. Il est probable que les précédentes recherches n'aient pas permis de retrouver des structures régulières justement pour cette raison précise : ne pas fixer le nombre de couches de la structure complique beaucoup trop l'optimisation[73].

Une partie des meilleures structures obtenues pour réfléchir une longueur d'onde de 600nm est présentée sur la figure 2.2a à côté de leurs spectres de réflexion respectifs (Fig. 2.2b).

Jusqu'à 12 couches, les structures que nous obtenons sont systématiquement des miroirs de Bragg parfaits. Les structures présentent une alternance de deux matériaux d'indice optique 1.4 et 1.7 et d'épaisseurs optiques $\lambda/4$. La première couche est d'indice élevé. Le contraste d'indice est maximal par rapport aux limites que nous avons délimitées

Lorsque le nombre de couches dépasse 12, les résultats sont moins parfaits et certaines couches présentent des épaisseurs optiques de $3\lambda/4$ au lieu de $\lambda/4$. Les propriétés de ces structures restent excellentes car une couche d'épaisseur triple est rigoureusement équivalente à une couche classique pour réfléchir la longueur d'onde d'intérêt. Une couche d'épaisseur $\lambda/2$ est appelée "couche absente" en synthèse de filtre, mais ça n'est vrai qu'à une longueur d'onde donnée bien sûr[31]. Une couche $3\lambda/4$ est donc une couche $\lambda/4$ plus une couche absente. Notre limite haute d'épaisseur étant de 300 nm, cela laisse la possibilité aux algorithmes de trouver cette solution. Cependant, un tel changement rend la largeur de la bande spectrale réfléchie plus étroite, et ce ne serait donc probablement pas favorisé dans la nature. Une plus large bande spectrale de réflexion signifie que les algorithmes ont plus de chances de trouver les structures car le bassin d'attraction est plus grand. C'est probablement pour cette raison que des couches plus épaisses ne sont pas trouvées quand le nombre de couches de la structure est faible, mais qu'elles émergent lorsque le nombre de paramètres à optimiser s'agrandit, impliquant un plus grand espace des paramètres et ainsi un problème plus complexe à résoudre.

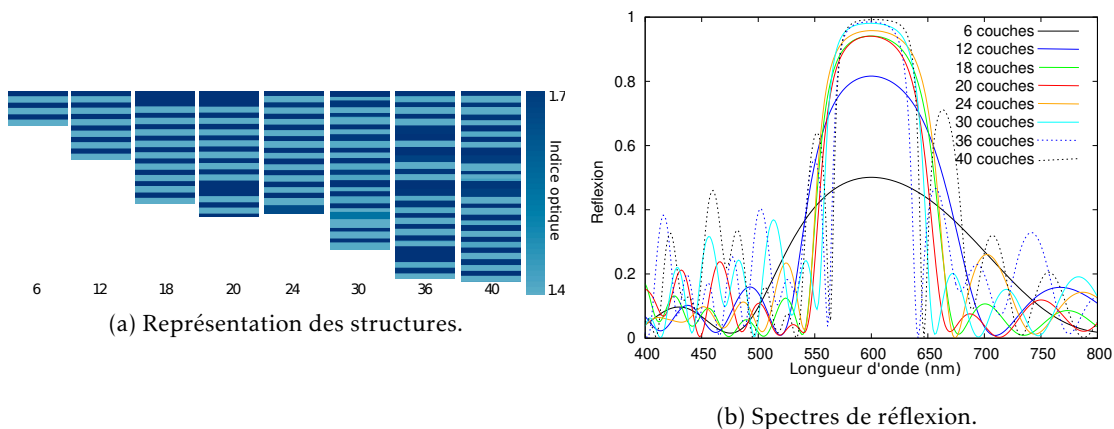


FIGURE 2.2 – Résultats des optimisations effectuées pour réfléchir une longueur d'onde de 600 nm à partir d'une structure multicouche dont le contraste d'indice maximal est fixé entre 1.4 et 1.7. Le contraste d'indice maximal est presque toujours atteint. Plus le nombre de couches augmente, plus des couches équivalentes à celle d'un miroir de Bragg, de dimension $3\lambda/4$, apparaissent, témoignant de la complexité grandissante des optimisations.

Lorsque le nombre de couches de la structure dépasse 24, nous commençons à observer des couches d'indices de réfraction intermédiaires. La présence de couches d'épaisseurs triples de celles attendues est de plus en plus fréquente. Cela témoigne de la complexité grandissante de l'optimisation, bien que les solutions présentent toujours d'excellentes propriétés optiques, comme nous pouvons le voir sur les spectres représentés sur la figure 2.2b.

Nous obtenons donc des structures parfaitement périodiques tant qu'elles comprennent moins de 24 couches. Au delà de cette limite, des structures plus ou moins régulières émergent. Enfin, il faut souligner que les structures sont meilleures avec un contraste d'indice maximal, ce qui est cohérent avec ce qui est fait en synthèse de filtres optiques depuis très longtemps[32].

2.3.2 Fixer le contraste d'indice

Puisque les résultats précédents montrent que le contraste d'indice maximal est quasiment systématiquement atteint par les algorithmes, nous avons choisi de fixer ce contraste. Nous parvenons ainsi à diviser par deux le nombre de variables à optimiser puisque les indices de réfraction sont maintenant imposés. Toutes les autres caractéristiques de l'optimisation sont strictement les mêmes que dans la section précédente : même fonction de coût, même domaine d'optimisation pour les épaisseurs des multicouches, même budget, même nombre d'exécutions des algorithmes, etc. Dans le cas où la première couche est d'indice élevé, les résultats sont sans équivoque : nous obtenons systématiquement des miroirs de Bragg parfaits, et ce jusqu'à 40 couches, voire plus. Les structures et leurs spectres respectifs sont montrés sur la figure 2.3. Nous pouvons constater que dans ces conditions, plus aucune couche de triple épaisseur n'émerge, toutes les couches ont exactement des épaisseurs $\lambda/4$ typiques du miroir de Bragg. C'est le signe que le problème est facile à résoudre pour les algorithmes, sans doute aussi parce que les paramètres optimaux ne se situent plus en bord de domaine comme dans le cas précédent à cause du contraste d'indice maximum.

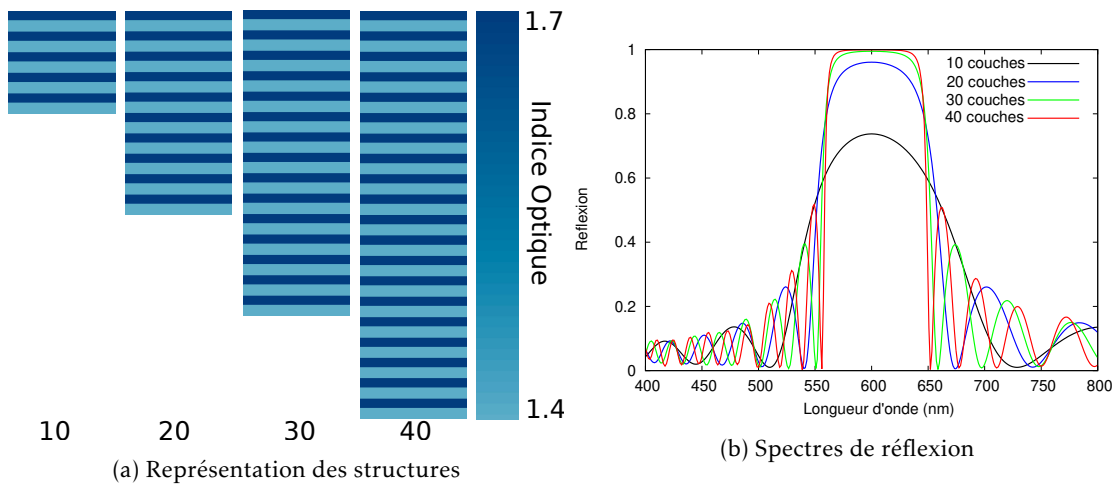


FIGURE 2.3 – Résultats des optimisations effectuées pour réfléchir une longueur d'onde de 600 nm en imposant une alternance de deux matériaux d'indice optique 1.7 et 1.4, en commençant par une couche d'indice élevé. Des miroirs de Bragg parfaits sont systématiquement obtenus.

Dans le cas où la première couche est d'indice bas, cependant, les résultats diffèrent légèrement du miroir de Bragg pur. Nous obtenons des structures dont la première couche est d'épaisseur doublée par rapport aux autres couches de même indice optique (Fig. 2.4). Pour ces optimisations, la fonction de coût reste la même que dans le cas précédent mais nous avons ajouté une contrainte sur l'épaisseur de la première couche afin qu'elle soit nécessairement supérieure à 30 nm. Sans cette contrainte, puisqu'ils ont exactement les mêmes performances, les algorithmes trouvent la moitié du temps le miroir commençant par la couche la plus épaisse et d'indice inférieur, et l'autre moitié du temps le miroir de Bragg pur – mais commençant par l'indice bas de réfraction. Il existe des structures naturelles, chez le scarabée *Chrysochroa fulgidissima*, respectant le principe exact de première couche d'indice bas, mais d'épaisseur doublée par rapport à celle d'un miroir de Bragg, pour constituer une "couche absente".

Ces travaux constituent une preuve qu'il est possible de générer des structures ordonnées par optimisation. Pour ce problème précis de réflexion d'une seule longueur d'onde par une structure multicouche, nous n'avons jamais trouvé de structures désordonnées qui fonctionnent mieux que le miroir de Bragg. Nous sommes donc capables de dire que le problème devient progressivement trop difficile à résoudre pour les algorithmes quand le nombre de couches augmente, puisqu'on est sûr qu'ils ne trouvent pas l'optimum.

Le problème défini ici est très pratique pour tester les algorithmes pour plusieurs raisons. D'abord, on peut facilement changer la dimension de l'espace des paramètres simplement en modifiant le nombre de couches total de la structure. Ensuite, la solution optimale, bien que nous ne pourrions jamais le prouver, est probablement le miroir de Bragg. Nous pouvons donc estimer la qualité d'une structure-solution par sa ressemblance avec le miroir de Bragg.

2.4 Réflexion de plusieurs longueurs d'onde

Maintenant que nous avons montré que nos algorithmes sont capables de retrouver la structure du miroir de Bragg, qui est à notre sens la plus simple possible, nous pouvons nous

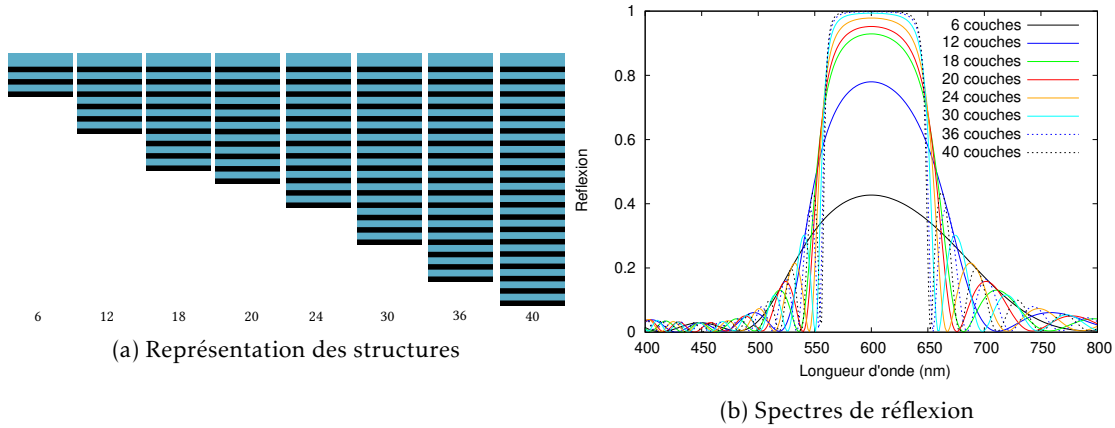


FIGURE 2.4 – Résultats des optimisations effectuées pour réfléchir une longueur d'onde de 600 nm en imposant une alternance de deux matériaux d'indice optique 1.4 et 1.7, en commençant par une couche d'indice bas. Des miroirs de Bragg avec une première couche d'épaisseur optique doublée surgissent de façon quasi systématique à l'issue des optimisations.

permettre de nous intéresser à des problèmes légèrement plus complexes.

Les miroirs de Bragg permettent de réfléchir une bande spectrale fixe et étroite, déterminée par le contraste des indices de réfraction et le nombre de couches de la structure. Nous avons donc essayé, dans un second temps, d'optimiser une structure multicouche capable de réfléchir non pas une seule mais plusieurs longueurs d'onde, afin d'obtenir un filtre réflectif à large bande spectrale. Les miroirs diélectriques à gradient d'épaisseurs (aussi appelés *chirped dielectric mirrors*) sont connus pour répondre à ce besoin. Ces structures sont, comme les miroirs de Bragg, constituées d'une alternance de couches de deux matériaux, mais ne sont pas périodiques. Les épaisseurs de chacune des couches varient graduellement, devenant de plus en plus fines, et nous obtenons ainsi une structure qui réfléchit des longueurs d'onde différentes à différentes profondeurs. Cette structure est présente dans la nature, en particulier chez le scarabée *Aspidomorpha tecta*[135]. La couleur dorée de ce scarabée est provoquée par les interférences entre les différentes ondes qui se réfléchissent à différentes épaisseurs de leur carapace, comme présenté sur la figure 2.5.

La fonction de coût que nous avons définie pour caractériser ce nouveau problème prend alors la forme

$$cf_2 = 1 - \frac{1}{8} \sum_{n=0}^7 r(\lambda_n) \quad (2.2)$$

avec $r(\lambda_n)$ le coefficient de réflexion de la structure calculé pour la longueur d'onde $\lambda_n = 500, 550, 600, 650, 700, 750, 800, 850\text{nm}$.

Nous n'avons pas rencontré de difficultés particulières lors des optimisations. Les structures produites par les algorithmes sont, comme attendu, des miroirs diélectriques avec des épaisseurs qui varient lentement, dans lesquelles les différentes longueurs d'onde sont réfléchies à différentes profondeurs.

Nous n'avons pas eu besoin de demander de la transparence dans la partie bleue du spectre - elle a été obtenue naturellement pour toutes les structures que nous avons trouvées. La plupart des résultats sont présentés sur les Fig. 2.6 et 2.7. Les structures non représentées sont totalement

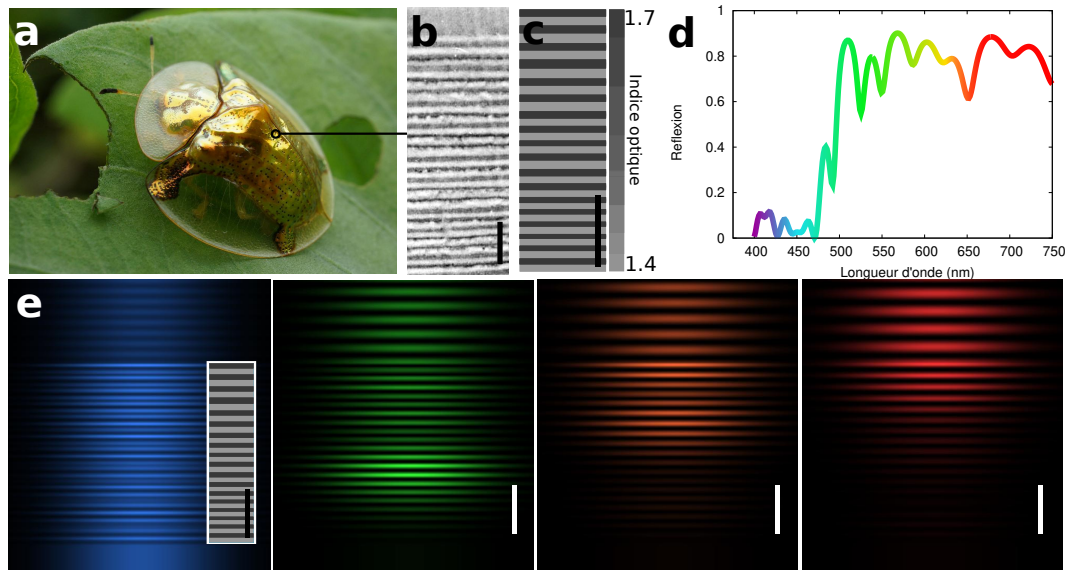


FIGURE 2.5 – **Récupération des miroirs diélectriques à gradient d'épaisseur.** **a** *Aspidomorpha tecta*, "Scarabée d'or des fous", photographie d'Indri Basuki. **b** Image TEM de la structure sur la cuticule, extraite de [142]. **c** Résultat de l'optimisation par des algorithmes évolutionnaires avec une plus grande période en haut qu'en bas. **d** Spectre de réflexion de la structure. **e** Carte de distribution du champ électrique sous éclairage à incidence normale, obtenue à l'aide de Moosh[138], montrant comment différentes longueurs d'onde (et donc des couleurs) sont réfléchies (ou non) à différentes profondeurs dans le miroir diélectrique à gradient d'épaisseur. De gauche à droite : bleu (400 nm), vert (530 nm), orange (600 nm) et rouge (700 nm). Dans la région bleue du spectre (à gauche), on voit la lumière traverser toute la structure sans aucun amortissement et se propager à nouveau dans le substrat. Échelle : 1 μm .

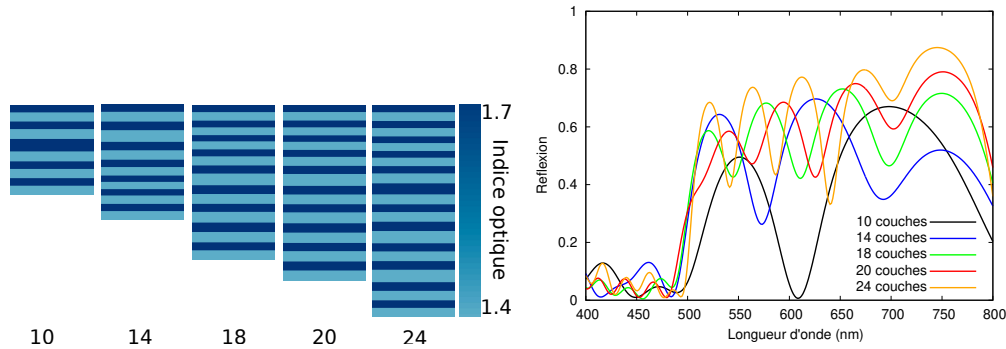


FIGURE 2.6 – Résultats des optimisations effectuées pour réfléchir 8 longueurs d’ondes équidistantes entre 400 et 800 nm, pour des structures de 10 à 24 couches. Plus le nombre de couches augmente, plus un gradient d’épaisseur des couches se manifeste.

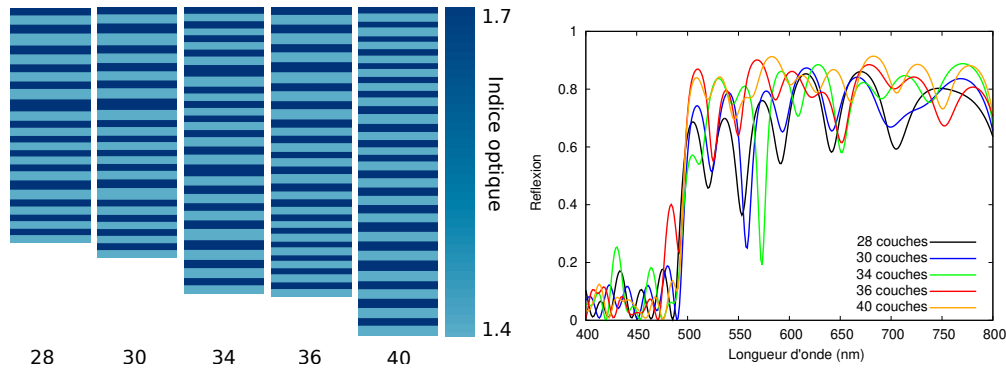


FIGURE 2.7 – Résultats des optimisations effectuées pour réfléchir 8 longueurs d’ondes équidistantes entre 400 et 800 nm, pour des structures de 28 à 40 couches. Les structures à 36 et 40 couches présentent un joli gradient d’épaisseur au fur et à mesure que le nombre de couches augmente dans la structure.

similaires. Les structures ressemblent étroitement à un miroir de Bragg, sauf que les épaisseurs varient lentement dans la structure. Certaines structures (comme pour 40 couches) ont une plus petite période en haut, d’autres (comme pour 36 couches) ont une plus grande période en haut. Les deux types de structures présentent finalement des performances optiques similaires. Comme on peut le voir, plus le nombre de couches est grand, plus la variation des épaisseurs est douce et plus la bande spectrale d’intérêt est réfléchi.

Ces résultats montrent clairement que des structures régulières mais non périodiques, plus complexes que les miroirs de Bragg, peuvent être générées à l’aide d’algorithmes évolutionnaires.

2.5 Diffusion du bleu par un réseau de diffraction complexe

L’une des structures photoniques les plus emblématiques des structures photoniques naturelles est sans aucun doute l’architecture que l’on retrouve sur les ailes du papillon *Morpho rethenor* [143, 144, 145]. Chez ces papillons *Morpho*, les ailes sont constituées de motifs qui

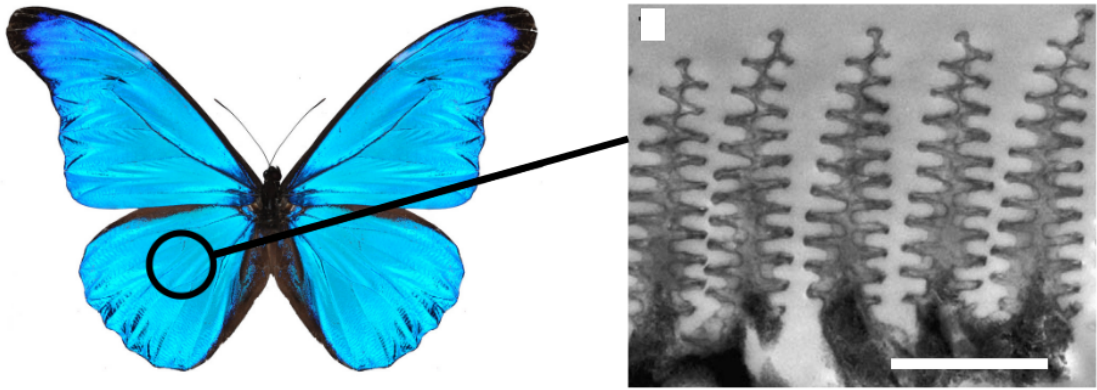


FIGURE 2.8 – Photographie du papillon *Morpho rethenor* réalisée par John Nielsen et image obtenue au microscope électronique en transmission de la surface cuticulaire du *Morpho rethenor* [image issue de [143]]. La couleur bleue du papillon semble obtenue grâce à une structure périodique dans deux directions : un réseau formé par les "sapins" provoque une diffraction de la lumière alors que les "branches de sapins" forment un miroir de Bragg permettant de diffracter uniquement la lumière bleue.

ressemblent à des sapins en coupe transversale, comme montré sur la Fig. 2.8.

Une structure multicouche est incapable de diffuser la lumière car la lumière entrante est réfléchiée par la structure en suivant les lois de la réflexion, ce qui produit un résultat optique très similaire à la réflexion sur n'importe quelle surface métallique. Une telle réflexion spéculaire peut clairement être vue chez les insectes représentés sur les Fig. 2.1 et 2.5. Au contraire, la structure sur l'aile des papillons *Morpho* présente une périodicité horizontale, même approximative, constituant ainsi un réseau de diffraction capable de diffuser la lumière dans différentes directions[146]. On suppose généralement que le rôle de l'architecture illustrée à la Fig. 2.8 est de diffuser efficacement la lumière bleue dans d'autres directions que celle de la réflexion spéculaire.

Les outils numériques capables de calculer la réponse optique d'une structure aussi compliquée que celle présente sur les ailes de papillon *Morpho* peuvent être extrêmement coûteux en temps de calcul. Ici, nous utilisons une méthode modale de Fourier[10, 11] (ou RCWA) qui a l'avantage d'être extrêmement rapide pour résoudre des problèmes horizontalement périodiques.

La structure consiste donc en un nombre fixe de couches, contenant chacune un bloc de chitine. Une période de $d = 600$ nm a été fixée pour la constitution du réseau. Chaque bloc dans une couche est défini par son épaisseur (allant de 0 à 150 nm), son décalage par rapport à l'origine (de 0 à 600 nm, la période complète), sa largeur (de 0 à 600 nm), et l'espace entre cette couche et la suivante (de 0 à 75 nm).

La méthode modale fournit les coefficients de réflexion r_{-1} , r_0 et r_{+1} dans les différents ordres de diffraction -1 , 0 et $+1$. Le coefficient r_0 est le coefficient de réflexion pour la réflexion spéculaire – la réflexion similaire au miroir – obéissant aux lois de Snell-Descartes. La réflexion dans les ordres diffractés est directement liée à la façon dont chaque motif diffuse la lumière. Les $r_{\pm 1}$ ne sont pas nuls uniquement si $\lambda < d$ car seule la réflexion spéculaire se produit pour $\lambda > d$.

La fonction de coût utilisée pour tenter de retrouver les structures de type *Morpho* est donc

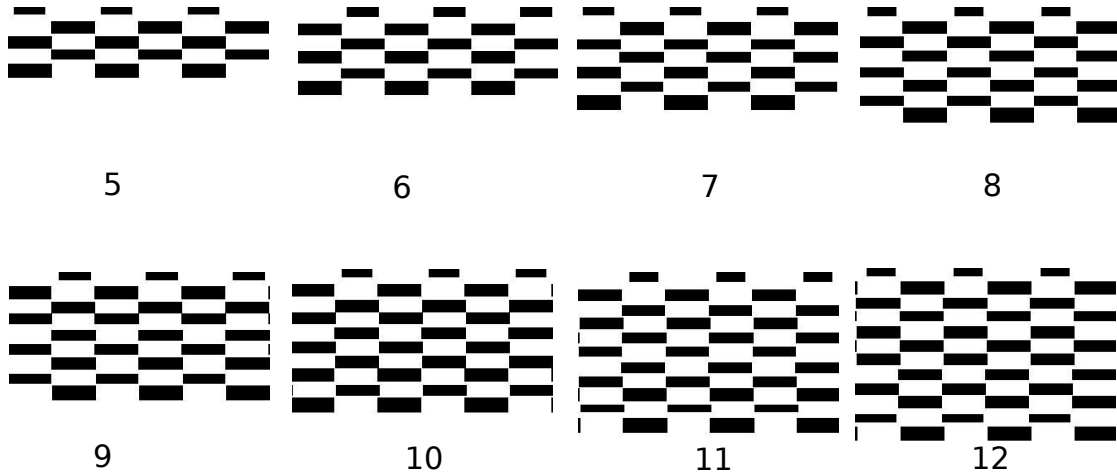


FIGURE 2.9 – Représentation des structures optimisées pour réfléchir les ordres de diffraction +1 et -1 d'une longueur d'onde de 450 nm tout en minimisant la réflexion spéculaire de six autres longueurs d'onde équidistantes entre 300 et 600 nm. Les caractéristiques principales de la structure du Morpho sont retrouvées : les blocs ont des épaisseurs correspondant au miroir de Bragg pour le bleu, et une interdigitation entre ces blocs se retrouve spontanément suite aux optimisations.

définie par

$$1 - \frac{1}{2}(r_{+1}(450) + r_{-1}(450) - r_0(450)) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_0(\lambda_i) \quad (2.3)$$

avec $\lambda_i = \{300, 400, 500, 600, 700, 800\}$, ce qui assure la maximisation de la réflexion aux premiers ordres de diffraction à 450 nm, et la minimisation de la réflexion spéculaire pour une large gamme de longueur d'onde.

Les résultats obtenus sont présentés sur la Fig. 2.9 et les spectres de réflexion correspondants sur la Fig. 2.10. Nous obtenons des structures en damier ayant la particularité de présenter une double périodicité. Si la périodicité horizontale est imposée par construction (nous voulons en effet obtenir un réseau), la périodicité verticale formée par les blocs les uns au dessus des autres est plus surprenante car elle émerge spontanément lors de l'optimisation. Ces solutions sont particulièrement efficaces d'un point de vue optique, meilleures en fait que des structures plus proches de celle du Morpho, pour ce qui est de la diffraction du bleu. Nous attribuons cette efficacité à l'interdigitation des structures, que l'on peut aussi décèler sur les ailes du Morpho.

L'architecture du Morpho ne peut donc être réduite à son seul rôle optique puisque nous avons la preuve qu'une structure en damier est plus efficace qu'une structure en sapins pour diffuser la lumière bleue. Nous avons donc ajouté un terme à la fonction de coût, correspondant à un facteur de remplissage a , pour tenter de retrouver la structure naturelle, en partant de l'hypothèse que des contraintes de légèreté mécanique de la structure étaient sans doute à l'origine de cette différence. Pour chaque couche, ce facteur de remplissage est compris entre 0

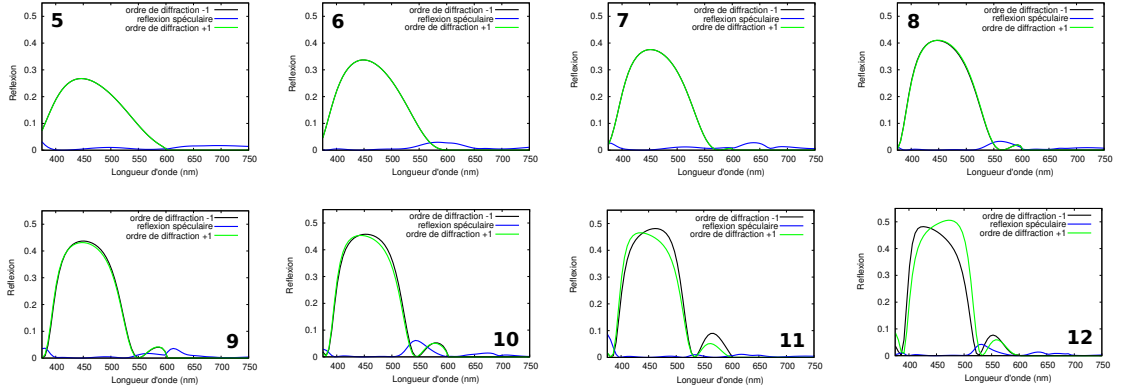


FIGURE 2.10 – Spectre de réflexion des structures optimisées pour réfléchir les ordres de diffraction +1 et -1 d'une longueur d'onde de 450nm tout en minimisant la réflexion spéculaire de six autres longueurs d'onde équidistantes entre 300 et 600 nm.

et 1. La fonction de coût s'écrit maintenant

$$1 - \frac{1}{2}(r_{+1}(450) + r_{-1}(450) - r_0(450)) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_0(\lambda_i) + \frac{a}{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} \frac{w_j}{d} \quad (2.4)$$

où n_b est le nombre de blocs total de la structure et w_j la largeur de la couche j . Le paramètre a contrôle le poids de la contrainte sur la quantité de matière. Les résultats présentés sur la Fig. 2.11 sont obtenus en utilisant $a = 0.5$.

Cette fonction de coût pénalise les structures avec beaucoup de matière, dans le sens où plus la structure comporte de la matière, plus la fonction de coût sera élevée. Comme l'ajout de cette seule contrainte donne des structures extrêmement similaires aux premières, mais avec des blocs plus étroits, nous avons ajouté une contrainte de fabrication supplémentaire : que les blocs soient tous à la verticale d'un point choisi. Cela fait émerger des architectures qui ressemblent beaucoup aux structures réelles des ailes Morpho. Les structures solutions et les spectres de réflexion correspondants sont respectivement représentés sur les figures 2.11 et 2.12. La double périodicité des structures est conservée par rapport aux structures en damier, et les structures en sapins présentent des fonctionnalités optiques excellentes même si moins bonnes que celles en damier.

Nous pouvons conclure sans risque que si la réponse optique de la structure régit essentiellement l'architecture, les contraintes environnementales en jeu (les contraintes de fabrication et le besoin de structures plus légères) expliquent les autres caractéristiques des agencements de la structure réelle du Morpho.

2.6 Comparaison des algorithmes

Les algorithmes utilisés étant des méthodes non déterministes, chaque exécution fournit une solution a priori différente, même si la convergence est atteinte pour chaque exécution. La convergence d'un algorithme d'optimisation ne garantit alors pas la qualité de la solution. Une solution ne peut être considérée comme acceptable que si plusieurs exécutions convergent vers le même résultat, c'est-à-dire que cette solution n'a pas été atteinte par pure chance. Ici, nous avons effectué 100 fois les optimisations avec un budget de 10^4 évaluations de la fonction de

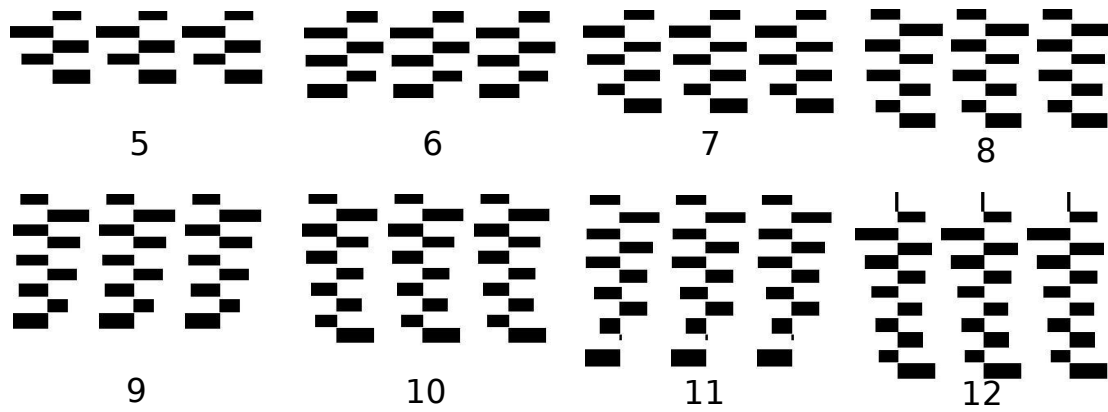


FIGURE 2.11 – Représentation des structures optimisées pour réfléchir les ordres de diffraction +1 et -1 d'une longueur d'onde de 450 nm tout en minimisant la réflexion spéculaire de six autres longueurs d'onde équidistantes entre 300 et 600 nm et en minimisant la quantité de matière constituant la structure.

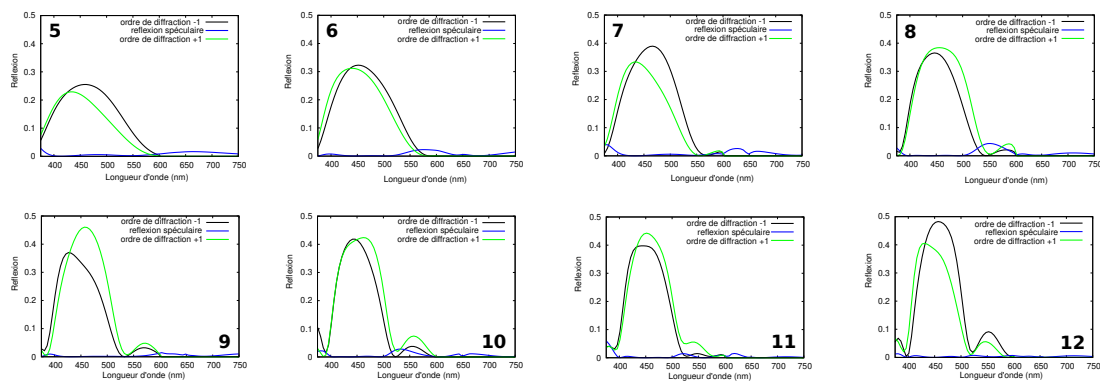


FIGURE 2.12 – Spectre de réflexion des structures optimisées pour réfléchir les ordres de diffraction +1 et -1 d'une longueur d'onde de 450 nm tout en minimisant la réflexion spéculaire de six autres longueurs d'onde équidistantes entre 300 et 600 nm et en minimisant la quantité de matière constituant la structure.

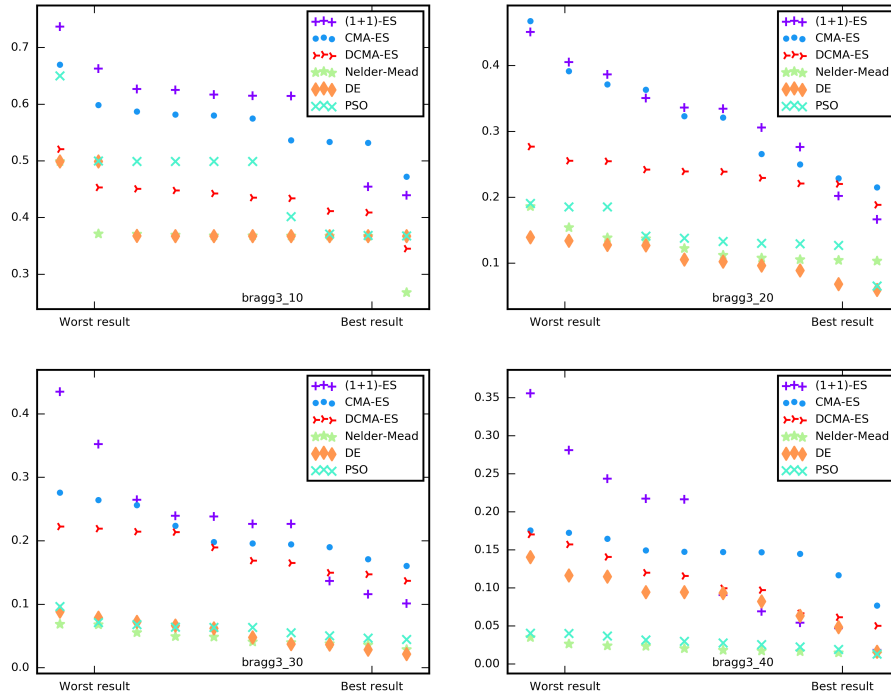


FIGURE 2.13 – Résultats d’optimisation pour un simple miroir de Bragg avec 10, 20, 30 et 40 couches quand le contraste d’indice maximal est imposé ainsi qu’une première couche d’indice élevé. Avec dix couches, le problème semble assez simple, mais dans des dimensions plus élevées, il existe des différences de performances visibles entre les algorithmes. Dans l’ensemble ce sont NM, DE et PSO qui sont les plus performants, toutes les autres méthodes basées sur des stratégies d’évolution générant des structures moins convaincantes. Illustration issue de [133].

coût. Les résultats ont ensuite été triés de la fonction de coût la plus élevée à la plus faible, et peuvent être affichés graphiquement pour comparer les algorithmes.

La figure 2.13 présente une comparaison entre les résultats des différents algorithmes testés dans le cas où nous optimisons un miroir de Bragg. En regardant les résultats de chaque algorithme, nous pouvons remarquer les bonnes performances globales de Nelder-Mead (NM), Differential Evolution (DE) et Particle Swarm Optimization (PSO). Jusqu’à vingt couches, le problème semble être assez bien résolu par ces trois algorithmes : au moins la moitié du temps, ils atteignent la solution présentant la valeur la plus basse de fonction de coût. Les trois autres algorithmes parviennent à s’approcher de cette solution pour dix et vingt couches, mais leurs performances se dégradent quand l’espace des paramètres s’agrandit. Pour quarante couches, il existe un facteur deux entre les meilleurs résultats des moins bons algorithmes (tous basés sur des stratégies d’évolution différente de DE) et les meilleurs résultats des meilleurs algorithmes (PSO, DE et NM).

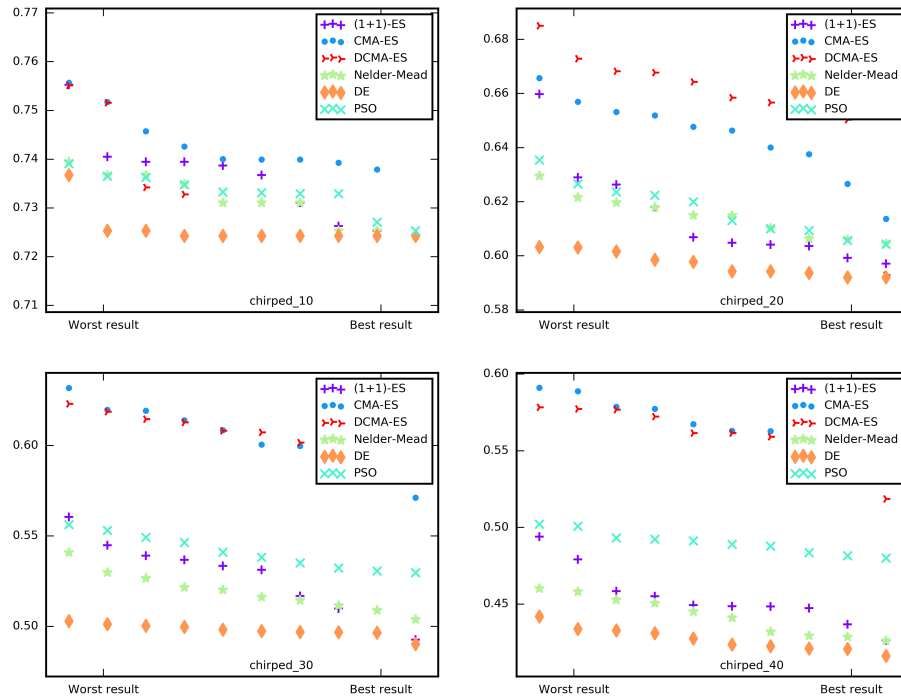


FIGURE 2.14 – Optimisation des miroirs diélectriques large bande. Chaque point est une optimisation indépendante. Résultats obtenus lorsque l’on recherche un miroir diélectrique de 6 à 40 couches, réfléchissant tout le spectre visible. L’axe des abscisses correspond à un tri des résultats du pire (à gauche) au meilleur (à droite). Pour une faible dimension, DE semble avoir plus de facilité à trouver la meilleure structure générée parmi tous les essais. Plus la dimension augmente, plus DE surpasse tous les autres algorithmes. Seuls les multiples de 10 couches sont présentés. Illustration issue de [133].

La figure 2.14 présente les meilleures fonctions de coût obtenues avec chacun des algorithmes dans le cas du miroir diélectrique à gradient d’épaisseur. Ces optimisations révèlent que DE est, de loin, l’algorithme le plus efficace sur ce problème puisqu’il génère systématiquement les structures présentant les fonctions de coût les plus basses.

En augmentant le nombre de couches, nous pouvons à première vue remarquer que CMAES et DCMAES commencent à être sensiblement moins cohérents : leurs meilleures structures sont nettement moins performantes que les pires générées par DE.

DE est l’algorithme le plus constant : il atteint la fonction de coût la plus basse dans tous les cas, et en général ses pires résultats sont meilleurs que les meilleures solutions générées par les autres algorithmes. Il était déjà parmi les algorithmes les plus performants dans le cas du miroir de Bragg.

La comparaison des algorithmes dans le cas du Morpho avec une fonction de coût qui ne

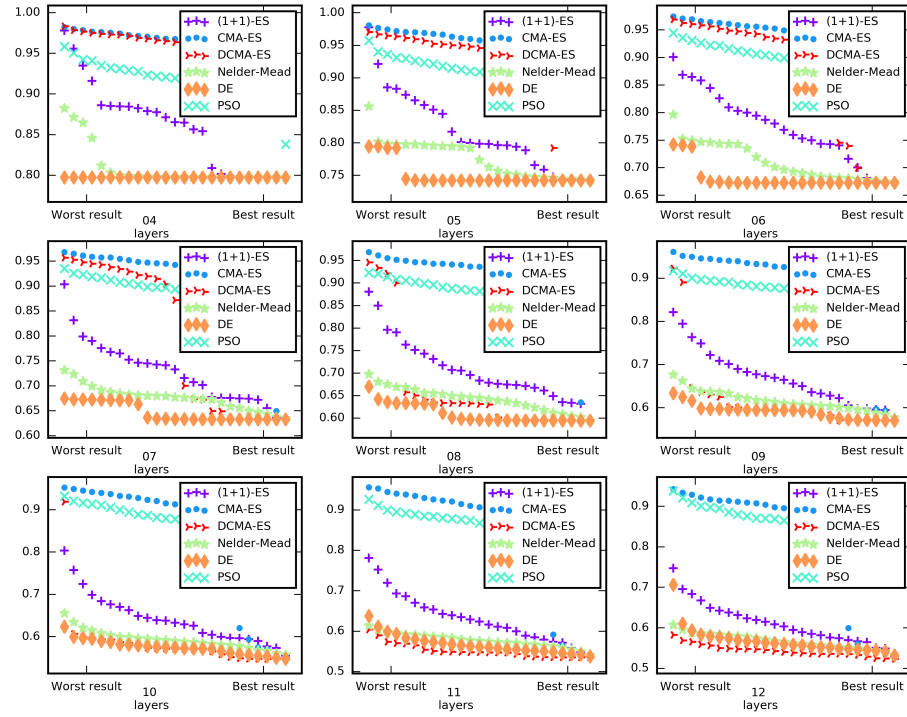


FIGURE 2.15 – Performances des différents algorithmes sur le problème du Morpho sans pénalisation (plus la fonction de coût est basse meilleure est la solution. L'axe des abscisses représente les différentes exécutions (triées : les meilleurs résultats sont à droite). DE domine pour la plupart des dimensions mais est moins robuste que NM et DCMA (c'est-à-dire que les résultats les plus à droite sont les mêmes mais les résultats les plus à gauche sont pires pour DE.) Illustration issue de [133].

pénalise pas les structures comportant beaucoup de matière sont présentés sur la figure 2.15. Il est clair que DE domine les autres algorithmes. DE est cependant légèrement battu par DCMAES et NM quand les structures comportent 11 et 12 couches. La méthode $(1+1)-ES$ est légèrement moins performante et ne fonctionne pas aussi bien sur ce problème que sur les précédents. CMAES et PSO obtiennent des performances médiocres : ils parviennent à approcher, sans l'atteindre, la meilleure solution trouvée avec 4 et 5 couches. Au delà de ce nombre de couches, ils sont surpassés par tous les autres algorithmes.

Les résultats obtenus pour le Morpho et la fonction de coût avec pénalisation sont montrés, eux, sur la figure 2.16. Dans le cas de la fonction de coût avec pénalisation, donc celle qui permet de retrouver des structures en sapins similaires à celles présentes sur le Morpho, DE domine clairement tous les autres algorithmes et ce quelque soit le nombre de couches de la structure.

Pour conclure, nous avons identifié l'algorithme Differential Evolution comme étant le plus efficace sur l'ensemble des fonctions de coût photoniques que nous avons testé. Il permet de

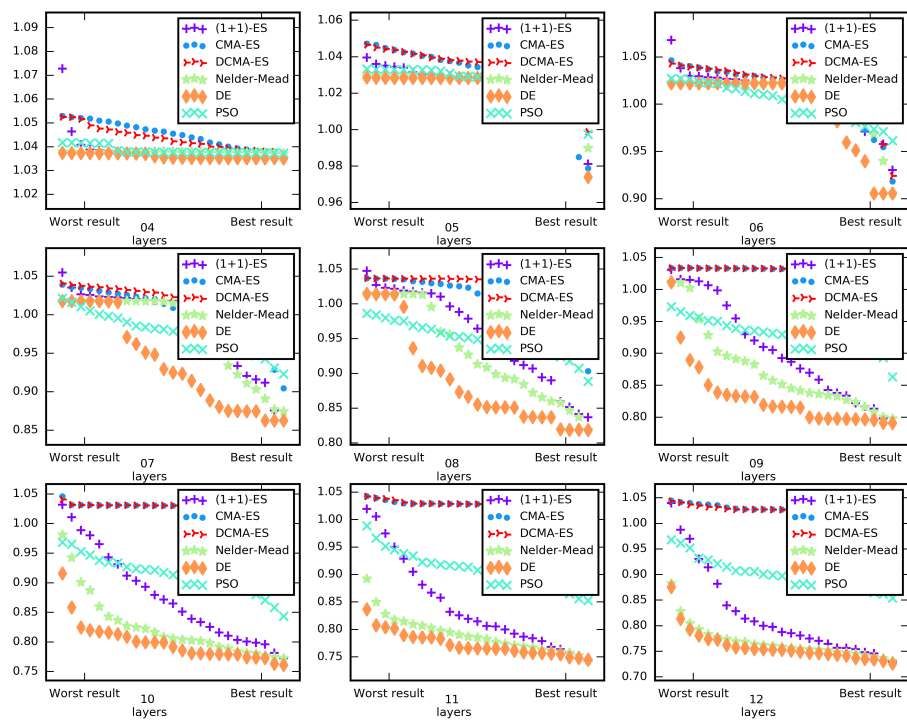


FIGURE 2.16 – Performances des différents algorithmes sur le problème du Morpho avec pénalisation (plus la fonction de coût est basse, meilleure est la solution). L'axe des abscisses représente les différentes exécutions (triées : les meilleurs résultats sont à droite). DE domine quel que soit le nombre de dimensions. Illustration issue de [133].

générer avec le plus de récurrence les meilleures structures-solutions optimisées. Quand DE ne parvient plus à optimiser de manière satisfaisante les structures optimisées – nous nous en rendant compte lorsque sur 100 optimisations, la meilleure structure est obtenue de façon unique et non récurrente – tous les autres algorithmes ne parviennent pas non plus à générer des résultats satisfaisants. Cela arrive en général lorsque les problèmes à optimiser comportent 60 paramètres ou plus.

Il est intéressant de noter que parmi tous les algorithmes inspirés de la nature que nous avons, c'est celui qui est inspiré (d'assez loin, il est vrai) de la reproduction sexuée d'une population (DE) qui nous permet de retrouver le plus facilement possible des structures naturelles et régulières – elles aussi obtenues dans la nature par procédé de reproduction sexuée.

2.7 De la difficulté de reproduire des résultats

Les résultats présentés ici ont été initialement obtenus par Vincent Berthier et Olivier Teytaud, au sens où nous leur avons fourni les fonctions de coûts programmées en Matlab, qu'ils ont interfacées avec des codes Python. D'une certaine façon, c'est l'assurance d'avoir des résultats particulièrement fiables, au sens où nos fonctions de coût ont réellement fonctionné comme des boîtes noires, et où seule l'analyse physique ou la comparaison aux structures naturelles que nous étions seuls à connaître permettait de valider ou non l'optimisation. La plupart de ces résultats ont été obtenus peu avant mon arrivée dans l'équipe.

Rapidement cependant, à la fin de la thèse de Vincent Berthier, nous nous sommes aperçus que nous n'avions pas les compétences pour faire tourner nous mêmes les codes. Il ne suffit pas, en réalité, de dire qu'on a utilisé l'algorithme DE si on ne spécifie pas la version, les valeurs des hyper-paramètres ou même la façon dont on traite les points qui sortent du domaine d'optimisation.

Le désir de contribuer aussi à la plateforme Nevergrad[132], en Python, nous a poussé à recoder l'intégralité des fonctions de coût en Python, à les accélérer au maximum en utilisant les techniques de calcul développées pour les multicouches. Si les matrices de diffusion utilisées dans Moosh[138] ou en RCWA sont parfaitement stables, elles sont bien plus lentes. Et dans le contexte de l'optimisation c'est un inconvénient. Nous avons donc optimisé les codes au maximum en utilisant notamment le formalisme des admittances détaillé en annexe A, et nous les avons mis au format très exigeant nécessaire pour qu'ils soient compatibles avec Nevergrad. La plupart des fonctions de coût, optimisées, ne demandent maintenant que quelques lignes de code.

Nous avons calculé la durée moyenne nécessaire à l'optimisation d'une structure d'abord en utilisant le logiciel Moosh, puis en calculant le coefficient de réflexion grâce au formalisme des admittances. Les résultats, regroupés dans le tableau 2.1, sont sans appel : s'il faut en moyenne 37 secondes pour optimiser une structure grâce à Moosh, il en faut seulement 7 pour le faire avec le formalisme des admittances.

Ensuite, afin d'être parfaitement autonomes, nous avons recodé nos propres versions de DE, et nous avons tenté de reproduire l'intégralité des résultats (y compris les statistiques sur les performances de DE) obtenus et décrits dans ce chapitre en utilisant les nouvelles fonctions de coût. Là aussi, en apparence, la tâche est aisée.

En utilisant DE et les fonctions de coût implémentées en Python, nous avons immédiatement retrouvé les miroirs de Bragg et les miroirs diélectriques à gradient d'épaisseur en maximisant d'abord la réflexion d'une, puis de plusieurs longueurs d'onde. En revanche, retrouver la structure en damier permettant de maximiser la diffusion de la longueur d'onde de 450 nm dans les premiers ordres de diffraction d'un réseau s'est avéré beaucoup plus délicat.

	Formalisme des admittances	Moosh
Fonction de coût optimale	0.26285	0.26495
Temps moyen nécessaire à l'optimisation (s)	6.7561	37.045

TABLEAU 2.1 – Comparaison des fonctions de coût calculées grâce au formalisme des admittances ou au programme Moosh. Les matrices de monodromie permettent de gagner un facteur 7 sur le temps de calcul de la fonction de coût de structures multicouches.

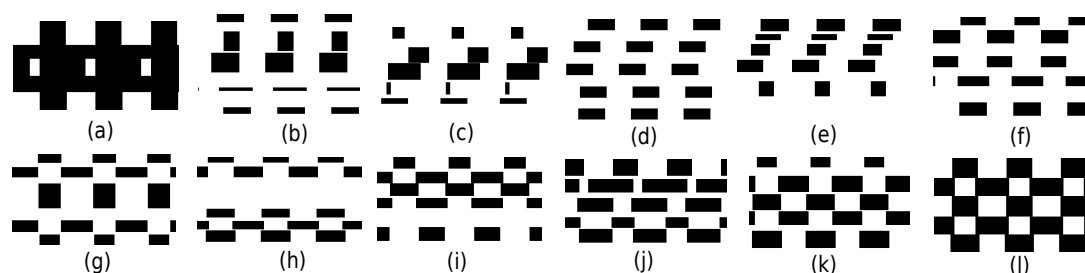


FIGURE 2.17 – Représentation des diversités de structures obtenues lors des expériences pour reproduire l'optimisation du damier maximisant la diffusion non spéculaire du bleu tout en minimisant la réflexion spéculaire d'autres longueurs d'onde du spectre visible. Les structures ont été obtenues à partir de fonctions de coût et des domaines d'optimisation qui diffèrent légèrement. Certains résultats sont très éloignés de l'objectif et présentent des valeurs de fonction de coût élevées (a-e), d'autres sont moyennement efficaces (f-j) et finalement nous parvenons à retrouver les damiers attendus (k-l).

Après de nombreuses expériences en utilisant des domaines d'optimisation différents, et de nombreuses modifications de la fonction de coût, nous avons finalement réussi, après plusieurs mois, à retrouver la structure en damier tant recherchée. Nous avons représenté certaines des structures obtenues sur la Figure 2.17. Les premiers résultats étaient très éloignés de l'objectif, les fonctions de coût étaient mauvaises. Nous avons réussi petit à petit à nous rapprocher des résultats attendus en affinant le domaine d'optimisation. Il est à noter que nous avons remarqué à travers nos différents tests qu'il n'était pas nécessaire de minimiser la réflexion spéculaire des longueurs d'onde autres que le bleu pour obtenir une structure photonique en forme de damier. En effet, lorsque nous simplifions la fonction de coût pour qu'elle ne prenne en compte plus que la maximisation de la diffusion du bleu dans les premiers ordres de diffraction du réseau, nous obtenons des damiers similaires à ceux obtenus avec les premières optimisations. En général, simplifier au maximum l'écriture des fonctions de coût est suffisant pour générer des structures pertinentes.

Cette anecdote permet d'insister sur le fait qu'obtenir des solutions optimisées cohérentes et satisfaisantes demande en réalité une grande quantité de travail. Nous avons identifié, en tentant de reproduire ces résultats (même les plus simples) un grand nombre de facteurs qui peuvent perturber l'optimisation et empêcher de retrouver les résultats attendus. Si le domaine d'optimisation est trop grand, les algorithmes peuvent rater le minimum global et ne génèrent pas des solutions similaires quand on les exécute plusieurs fois. Si le domaine d'optimisation est trop petit, nous allons au contraire passer à côté de certaines possibilités et ne pas trouver de structures très efficaces. Les limites basses et hautes attribuées à chacun des paramètres à optimiser influe grandement les performances des algorithmes. En fonction de la façon dont nous représentons les données d'optimisation, pour les analyser, nous pouvons générer des biais

important : regarder la convergence moyenne de 100 optimisations différentes ou bien observer chacune des courbes de convergence des simulations ne permet pas de conclure de la même manière. Extraire et analyser des données Python avec des codes, pourtant similaires, écrits en Python ou en Matlab ne génèrent pas exactement les mêmes analyses, il faut donc faire très attention lorsque nous les utilisons pour réaliser des comparaisons entre optimisations : les comparaisons ne peuvent se faire alors que de façon relative. Il n'est pas très étonnant que la science, et particulièrement le domaine de l'optimisation, souffre de problème de reproductibilité quand on voit la difficulté qu'on peut avoir à obtenir les résultats les plus simples. C'est dans cette optique qu'il est en réalité très important de diffuser ses codes, et pas juste de décrire la méthode au travers d'un article.

Discussion

Nous avons montré que les algorithmes d'optimisation choisis étaient capables de générer des structures photoniques régulières lorsque les structures comportent moins de 60 paramètres. L'algorithme Differential Evolution s'est montré le plus efficace en générant de façon quasi-systématique les meilleures structures optimisées. Il s'agit d'un algorithme inspiré de la reproduction sexuée d'une population, il n'est pas local et permet, contrairement à de l'optimisation topologique, de réaliser des optimisations paramétriques.

DE permet notamment de générer des structures qu'on peut qualifier de **modulaires**, c'est-à-dire que les structures peuvent être décomposées en sous-partie et que chacune de ces sous-parties a un rôle optique spécifique identifiable. Toutes les structures photoniques optimisées par nos algorithmes se révèlent être modulaires. L'exemple type de structure modulaire est le miroir diélectrique. On conçoit bien que les différentes parties sont chargées de réfléchir différentes longueurs d'ondes. Cependant, les différentes parties ne sont pas indépendantes pour autant. C'est typique d'une structure modulaire. Nous verrons par la suite d'autres exemples de structures comportant des miroirs de Bragg et des ensembles de couches permettant par exemple une sorte d'adaptation d'impédance. Ce sont aussi des structures modulaires. C'est peut-être parce que ces structures sont modulaires que DE est l'algorithme le plus efficace pour les retrouver – autrement dit DE, qui n'est pas reconnu pour être systématiquement le meilleur en question d'optimisation en général, est peut-être simplement un algorithme particulièrement efficace pour trouver des solutions périodiques et ou modulaires. Du point de vue de l'algorithme, d'ailleurs, il n'y a probablement pas de grande différence entre une structure périodique et une structure modulaire, mais nous continuerons de la faire dans les discussions.

Si depuis les débuts de l'optimisation numérique, on s'inspire énormément de la nature et notamment de l'évolution, il n'est en général pas possible de demander à un algorithme de réellement reproduire cette évolution. Dans le cas des structures photoniques, on voit qu'on peut au moins demander aux algorithmes de retrouver les mêmes structures. Le fait de savoir que ces structures émergent dans la nature spontanément renforce alors la confiance que l'on peut avoir dans les solutions proposées par les algorithmes. Au delà de la reproductibilité des résultats, c'est un point très important. On peut en effet commencer à parler de la qualité d'une solution, suivant qu'on peut lui accorder un plus ou moins grand degré de confiance. Voir qu'on retrouve une solution naturelle donne forcément confiance dans une solution donnée.

Il est intéressant de noter que parmi tous les algorithmes inspirés de la nature que nous avons, c'est celui qui est basé sur la reproduction sexuée d'une population (DE) qui nous permet de retrouver le plus facilement possible des structures naturelles et modulaires – elles aussi obtenues dans la nature par procédé de reproduction sexuée.

Nous avons la chance, en photonique, de disposer d'un cas très pratique pour évaluer les

performances des algorithmes d'optimisation. Il s'agit du miroir de Bragg. Ce problème est à la fois simple d'un point de vue optique - le seul objectif est de maximiser la réflexion d'une longueur d'onde par une structure multicouches - et très bien défini d'un point de vue mathématique. Nous sommes presque sûrs, bien que nous ne pouvons pas le prouver, que le miroir de Bragg est la structure la plus efficace pour résoudre l'objectif optique : nous n'avons jamais trouvé de structures qui fonctionnent mieux, et toutes les optimisations convergent vers ce résultat. Retrouver avec nos algorithmes le miroir de Bragg montre que ceux-ci fonctionnent. De plus, le miroir à gradient d'épaisseur est une structure parfaitement modulaire qui va nous permettre de nous assurer que les algorithmes, s'ils sont capables de le générer, sont capables de produire des structures modulaires et dont nous pouvons par conséquent comprendre le fonctionnement physique.

Nous avons grâce à un benchmarking rigoureux sur tous nos cas, identifié un algorithme, DE, qui nous permette de produire des résultats solides. C'est rassurant car nous avons vu qu'en photonique c'est rarement le cas.

Comme nous l'avons déjà dit, il est impossible de s'assurer de l'optimalité d'une solution, mais on peut discuter de à quel point on peut avoir confiance en elle, à quelle point on peut en être satisfait. Nous estimons que nous sommes satisfaits des structures optimisées lorsque :

- les résultats sont reproductibles. Cela signifie que la solution est située, au minimum, dans un minimum local avec un gros bassin d'attraction, ce qui garantit qu'elle émerge fréquemment.
- les structures optimisées sont similaires aux structures générées par la vraie évolution. C'est un critère très fort mais qui n'est que rarement atteint.
- les solutions sont périodiques ou bien régulières, et présentent par cela une forme de modularité. On peut alors comprendre en détail le fonctionnement physique de la structure optimisée et en quoi elle répond à la problématique soulevée.

Il apparaît finalement qu'il est essentiel, à toutes les étapes de l'optimisation, de faire appel à une analyse physique. C'est vrai pour la définition de la fonction de coût, qui traduit notre intuition physique, mais aussi pour la définition de l'espace des paramètres, qui peut rendre le problème beaucoup trop difficile s'il est choisi trop grand. Et c'est crucial pour l'analyse des solutions, pour savoir dire si les optimisations semblent satisfaisantes (ce qui est le cas si on comprend les raisons ayant conduit à l'émergence de ces structures) et éventuellement en déduire de nouvelles règles de conception.

Ces travaux ont été publiés dans Scientific Report[133].

Hyper-optimisation de Differential Evolution

Il y a une différence énorme entre celui qui cherche à se dépasser et celui qui veut être le meilleur. Le premier travaille sur lui le second par rapport aux autres.

Le Pacte des Marchombres, L'Envol
Pierre Bottero

Introduction

Nous avons vu que DE était le plus efficace des algorithmes d'optimisation globale que nous avons étudiés pour les structures photoniques. Certains paramètres de DE (appelés les hyperparamètres) permettent de modifier le déroulement de l'évolution de la population, comme le taux de croisement ou de mutation. Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé les paramètres standards de DE, pour pouvoir le comparer aux autres algorithmes eux aussi paramétrés avec les valeurs standards. Nous pouvons cependant modifier les valeurs des hyperparamètres afin d'essayer d'améliorer la convergence de DE spécifiquement pour nos problèmes, c'est à dire d'adapter DE aux problèmes de photonique - en supposant qu'ils partagent tous un certain nombre de caractéristiques, ce que laissent penser nos résultats précédents. Nous comparerons donc dans ce chapitre des variantes de DE, chacune des variantes faisant référence à un certain choix de valeurs des hyperparamètres. Le but des travaux menés dans cette thèse étant de proposer une méthode d'optimisation opérationnelle générant des structures photoniques régulières et modulaires, nous avons fait le choix d'optimiser les hyperparamètres de DE afin qu'il donne les meilleurs résultats possibles sur le miroir diélectrique à gradient d'épaisseur (noté HRC dans la suite du chapitre).

Comme il ne suffit pas de s'assurer que DE est l'algorithme d'optimisation globale le plus adapté pour produire des structures photoniques régulières, nous comparons ensuite les résultats obtenus grâce à DE avec des structures de références obtenues par design inverse très différentes des méthodes d'optimisation globale étudiées jusqu'ici. Cela nous permettra de discuter de la pertinence d'utiliser un algorithme global plutôt qu'une technique de design spécifique, telle Needle pour les structures multicouches.

3.1 Le miroir diélectrique à gradient pour optimiser DE

3.1.1 Differential Evolution, un algorithme simple et efficace

L'optimisation par *Differential Evolution* (DE) est basée sur l'évolution "génétique" d'une population contenant un nombre NP d'individus, chacun d'eux étant un vecteur constitué de NL paramètres. Chaque individu est une réalisation possible de structure photonique. Dans le cas de structures multicouches, les paramètres sont les épaisseurs et éventuellement les indices de réfraction des couches. La population va évoluer à travers trois processus qui sont la *mutation*, le *croisement* et la *sélection*. La *fonction de coût* permet d'évaluer chacun des individus de la population. Le but de l'optimisation est d'utiliser les trois processus d'évolution pour générer un individu dont la fonction de coût est minimale.

La mutation consiste à générer un individu mutant y à partir d'individus déjà présents dans la population. L'étape de croisement permet de constituer un individu noté z , qui est *l'enfant*, et donc le "croisement génétique", d'un individu x et du mutant y . Les paramètres de z sont ainsi issus soit de x , soit de y . L'individu z n'est pas systématiquement intégré dans la population mais est d'abord soumis à une sélection basée sur le calcul de la valeur de sa fonction de coût. Si cette valeur est inférieure à celle correspondant à l'individu x , alors x est écrasé et remplacé par z . Dans le cas contraire, z est éliminé et un nouvel individu x est choisi pour être le parent. Ces étapes sont ainsi répétées pour chaque parent x , formant ainsi toute une nouvelle *génération*. Le pseudo-code présenté sur l'algorithme 1 résume toutes les étapes de l'optimisation par DE. La simplicité apparente de l'algorithme est surprenante, les étapes sont peu nombreuses et une dizaine de lignes de code seulement permettent d'implémenter l'algorithme sous sa forme la plus basique.

Algorithme 1 : Pseudo-code de l'algorithme DE pour une optimisation sur 400 générations d'une population de $NP = 30$ individus, chacun d'eux constitués de NL paramètres[147]

```

Génération aléatoire de la population  $x_1, \dots, x_{30}$  dans l'espace de travail ;
pour chaque  $g$  de 1 à 400 faire
  pour chaque  $x$  dans la population faire
    Génération du mutant  $y$  (mutation);
    pour chaque  $i$  dans  $\{1, \dots, NL\}$  faire
      (croisement)
      si  $i < CR$  alors
        |  $z(i) = y(i)$  ;
      sinon
        |  $z(i) = x(i)$  ;
      fin
      si  $z$  a une valeur de fonction de coût plus faible que  $x$  alors
        (sélection)
        |  $x$  est remplacé par  $z$  dans la population ;
      fin
    fin
  fin
   $g = g + 1$ 
fin

```

Nom de la mutation	Formule
rand 1	$y(x)=a+F1(b-c)$
best 1	$y(x)=best-F1(a-b)$
rand to best 1	$y(x)=c+F1(a-b)+F2(best-c)$
current to best 1	$y(x)=x+F1(a-b)+F2(best-x)$
rand 2	$y(x)=a+F1(a-b+c-d)$
best 2	$y(x)=best + F1(a-b+c-d)$

TABLEAU 3.1 – Liste des différentes mutations de l'algorithme Differential Evolution étudiées. Une structure mutante y d'une structure x présente dans la population est générée à partir de plusieurs autres structures. Les structures a , b , c et d sont choisies aléatoirement parmi celles existantes dans la population. la structure $best$ est celle qui présente la fonction de coût la plus basse dans la population existante.

De nombreux paramètres, dans DE, peuvent être modifiés, comme la taille de la population, la formule de mutation, ou encore l'influence des parents dans la conception de l'enfant. Pour étudier le rôle de chaque mécanisme de l'algorithme, nous avons effectué des tests statistiques permettant d'évaluer l'impact de chacun de ces mécanismes sur la capacité de DE à trouver les solutions les meilleures possibles.

Tous les travaux présentés dans la suite de ce chapitre ont été effectués en se basant sur l'optimisation sur 400 générations d'une structure photonique particulière, un miroir diélectrique à gradient d'épaisseur (HRC dans la suite du texte) de 29 couches, car il s'agit du problème qui nous semble être le plus modulaire que nous ayons identifié. C'est l'expression de la fonction de coût qui permet de définir quelle structure est en cours d'optimisation. La structure HRC désirée correspond à une structure dont le coefficient de réflexion est maximal pour 81 longueurs d'onde équiréparties entre 400 et 700 nm.

3.1.2 Rôle de la mutation

La mutation consiste à générer un individu mutant y à partir d'individus déjà présents dans la population, plus précisément en effectuant la différence de ces individus. Différents processus de mutation sont couramment utilisés dans les algorithmes d'évolution différentielle[28], qui diffèrent par le nombre d'individus utilisés pour la mutation, et par la présence ou non du meilleur individu (voir tableau 3.1).

L'individu y est créé à partir d'individus x , a , b , c et $best$ de la population. Si les individus a , b , et c sont choisis aléatoirement parmi tous les membres de la population, ce n'est pas le cas de x et de $best$. En effet, x représente l'individu parent qui permet de générer l'individu enfant z à partir de son croisement avec l'individu y . De son côté, $best$ représente l'individu admettant la fonction de coût la plus faible parmi toute la population. L'utilisation de $best$ permet d'accélérer la convergence de DE vers un minimum, avec le risque, en contrepartie, d'atteindre un minimum local plutôt que global. Des pondérations $F1$ et $F2$ sont apportées aux différences des individus pour influencer la mutation.

Après avoir comparé les différents mécanismes de mutation, à coefficients $F1$ et $F2$ égaux à 0.8, nous avons sélectionné la meilleure formule et nous avons fait varier les coefficients de pondération afin d'étudier leurs impacts sur le déroulement de l'optimisation. L'étude s'appuyant sur l'optimisation de la structure HRC a montré que c'est la mutation **rand to best** qui donne le meilleur résultat.

A la suite de ces études sur les mutations, nous avons sélectionné la formule *rand to best* et nous avons fait varier les coefficients $F1$ et $F2$ entre 0.5 et 0.9. Les résultats indiquent que les

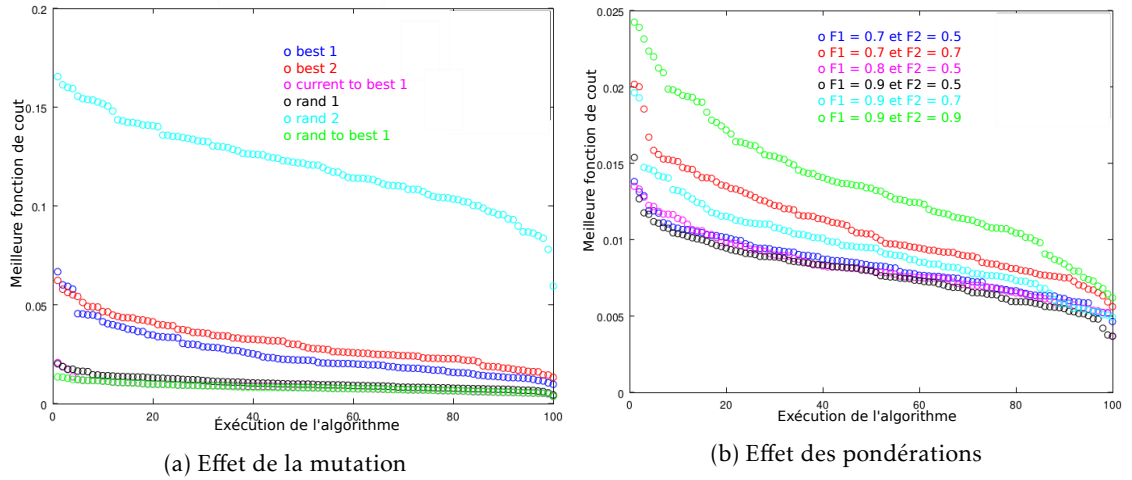


FIGURE 3.1 – Comparaison des meilleures optimisations obtenues avec différentes variantes de DE, sur une structure multicouche dont le but est de maximiser la réflexion sur toute une plage de longueur d'onde (HRC). Les moins bons résultats sont à gauche du graphe, les meilleurs à droite. La mutation *rand to best 1* avec les pondérations $F1 = 0.9$ et $F2 = 0.5$ donnent les meilleurs résultats.

valeurs $F1 = 0.9$ et $F2 = 0.5$ sont les plus efficaces pour minimiser les fonctions de coût de nos structures. En analysant l'ensemble des résultats, nous constatons que DE fonctionne mieux lorsque la différence impliquant l'individu *best* est de moindre impact sur la mutation que la différence impliquant des individus totalement aléatoires.

3.1.3 Rôle du croisement

L'individu z est le résultat du croisement entre l'individu x et l'individu mutant y . Pour réaliser ce croisement, un hyperparamètre CR est fixé ($0 < CR < 1$). Pour chaque paramètre i de l'individu z , un nombre aléatoire entre 0 et 1 est tiré. Si la valeur est inférieure à celle de CR , alors le paramètre est choisi chez y , sinon il est choisi chez x . Ainsi si nous fixons $CR=0$ l'individu z est exclusivement constitué des paramètres de x . Au contraire, l'initialisation de $CR=1$ implique que l'individu z est l'exacte copie du mutant y . Dans ces deux cas, aucun croisement n'a réellement été effectué. La valeur idéale de CR est difficile à estimer mais l'expérience montre que l'algorithme fonctionne mieux si nous utilisons une valeur de $CR=0.8$, comme présenté sur la figure 3.2a. Nous comprenons alors qu'il est plus efficace de favoriser la transmission des paramètres mutants plutôt que ceux du parent x dans l'élaboration de l'individu enfant.

Les études statistiques présentées précédemment ont montré quelles valeurs sont à privilégier pour les hyperparamètres CR , $F1$ et $F2$. Ces valeurs sont valables uniquement dans le cadre de la structure HRC, et sont susceptibles de devenir non optimales dès que nous modifierons la fonction de coût. De nombreuses recherches[26] ont été menées pour tenter d'améliorer DE, en particulier en instaurant des mécaniques d'auto-adaptation des hyperparamètres CR et F dans l'algorithme.

Nous avons donc intégré dans l'algorithme DE un comportement auto-adaptatif des hyperparamètres CR et F en utilisant la méthode appliquée par les développeurs de l'algorithme

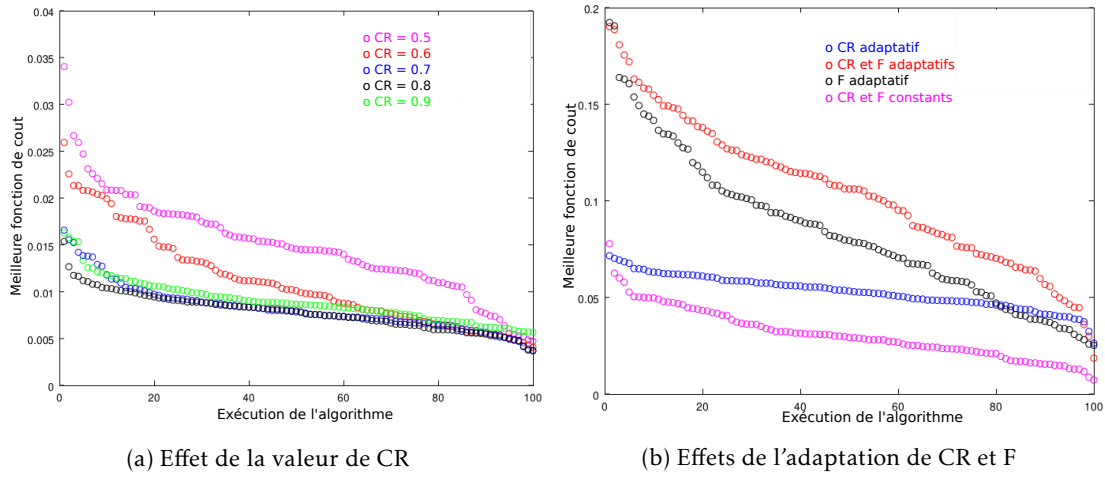


FIGURE 3.2 – Comparaison de variantes de DE utilisant ou non une auto-adaptation des hyperparamètres CR et F en cours d’optimisation. Chaque point est le résultat d’une optimisation complète. Les meilleures optimisations sont représentées à droite, les moins bonnes à gauche. Le facteur de croisement CR = 0.8 et le fait de ne pas faire varier les facteurs de croisement et de mutation donnent les meilleurs résultats.

JADE [24]. Pour chaque membre i de la population, des hyperparamètres $CR(i)$ et $F(i)$ vont être pseudo-aléatoirement sélectionnés pour élaborer l’individu enfant $z(i)$. Le hyperparamètre $CR(i)$ sera généré selon une loi normale de moyenne μ_{CR} et d’écart-type 0.1. Au début de l’optimisation, la moyenne μ_{CR} est fixée égale à 0.5. A chaque fois que les étapes d’évolution aboutissent à un individu z meilleur que l’individu parent x , la valeur de l’hyperparamètre $CR(i)$ qui a servi à l’élaboration de cet enfant va être sauvegardé dans un vecteur S_{CR} . Une fois qu’une génération complète a été formée, c’est-à-dire que les NP individus de la population ont servi de parent x , la moyenne μ_{CR} est mise à jour selon la formule :

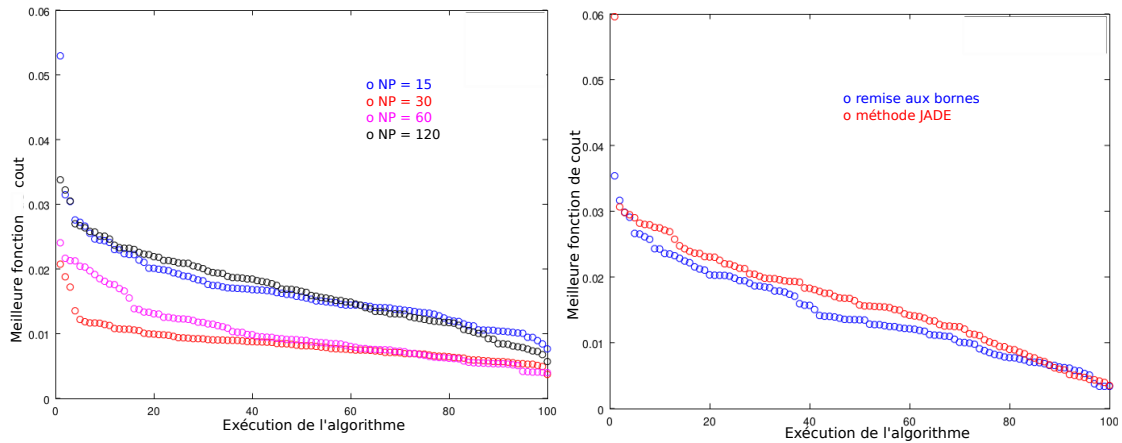
$$\mu_{CR} = (1 - c)\mu_{CR} + c.mean(S_{CR}), \quad (3.1)$$

où c est une constante positive comprise entre 0 et 1. Un processus équivalent est appliqué à l’hyperparamètre F , au détail près que F n’est pas généré selon une loi normale mais selon une distribution de Cauchy. Si cette méthode permet de ne pas avoir à contrôler les hyperparamètres CR et F de DE, elle introduit la gestion de deux nouveaux paramètres : c ainsi que l’écart-type des distributions normale et de Cauchy.

Nous avons comparé DE paramétré avec les valeurs $CR = 0.8$, $F1 = 0.9$, et $F2 = 0.8$ à des DE pour lesquels nous avons instauré un comportement auto-adaptatif soit de CR, soit des F, soit des deux en cours d’optimisation. Les résultats présentés en figure 3.2 nous permettent de conclure que notre algorithme de base, en gardant CR, F1 et F2 constants, donne de bien meilleures structures que les algorithmes auto-adaptant ces mêmes hyperparamètres.

3.1.4 Rôle de la population

Il est difficile de savoir quelle taille de population NP choisir pour que l’algorithme soit le plus efficace possible. Plus la population est grande, plus DE aura la possibilité d’explorer l’espace des paramètres et de s’approcher de la solution optimale. En revanche il aura de plus



(a) Comparaison de variantes de DE utilisant différentes tailles de population. (b) Comparaison de variantes de DE utilisant différentes contraintes sur la génération des enfants.

FIGURE 3.3 – Comparaison de différentes versions de DE. Chaque point est le résultat d'une optimisation complète. Les meilleures optimisations sont représentées à droite, les moins bonnes à gauche.

en plus de mal à converger rapidement. Selon notre objectif et le temps de calcul que nous accordons à DE, il faut choisir la taille de la population avec soin. Les tests statistiques montrent qu'une population de 30 individus semble être un compromis raisonnable, comme présenté sur la figure 3.3a.

Nous pouvons agir sur DE en imposant des contraintes sur les individus pour qu'ils puissent faire partie de la population. Par exemple, nous avons imposé pour chacune de nos simulations des épaisseurs de couches positives dans la création de la population initiale. Lors de la création du mutant y , il se peut que ce nouvel individu ne respecte pas les contraintes imposées à la population initiale. Il en va de même pour l'enfant z .

Afin de ne pas considérer d'enfant ne respectant pas les contraintes exigées pour la population initiale, plusieurs options s'offrent à nous. Tout d'abord, nous pouvons simplement vérifier si z respecte les conditions et si ce n'est pas le cas, l'éliminer, puis passer à l'étape suivante de l'algorithme : choisir un nouveau parent x . Cette démarche implique de nombreux calculs (mutation et croisement en particulier) qui n'aboutiront à aucun résultat puisque z ne sera même pas considéré au final. Pour éviter cela, et accélérer la convergence de DE, nous avons testé deux méthodes pour que z soit modifié afin de systématiquement respecter les contraintes de la population initiale. Ainsi, tous les individus z générés verront leur fonction de coût évaluée. La première méthode, nommée méthode JADE car c'est celle utilisée par les développeurs de l'algorithme JADE [24], consiste à modifier directement l'individu mutant y . Si l'un des paramètres de l'individu y ne correspond pas aux contraintes, alors la moyenne de ce paramètre et du paramètre qualifié "limite" (représentant la contrainte) est choisie pour remplacer le paramètre. Dans le cas de la structure HRC à 29 couches, la limite supérieure d'épaisseur a été fixée à 300 nm et la limite inférieure à 10 nm.

La deuxième méthode consiste à modifier l'enfant z et non le mutant y . Si un paramètre de z ne correspond pas aux contraintes, alors on attribue automatiquement la valeur limite à ce paramètre. L'avantage de la méthode JADE, par rapport à la deuxième méthode, est que l'on va garder une certaine biodiversité dans les paramètres puisque c'est la moyenne du paramètre

limite et du paramètre initial qui est prise en compte. En revanche, dans la deuxième méthode, tous les paramètres non conformes seront remplacés par un même paramètre limite. L'étude statistique de ces deux méthodes a été réalisée et les résultats sont présentés en figure 3.3b. Il semble que la seconde méthode, celle qui consiste à automatiquement remplacer les paramètres défaillants par la valeur limite, donne en moyenne de meilleurs résultats que la méthode JADE pour l'élaboration de nos structures.

3.1.5 Impact du choix de la fonction de coût

Pour produire une structure HRC, jusqu'à maintenant nous avons utilisé la fonction de coût suivante :

$$cf_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (R_c(\lambda_j) - R(\lambda_j)), \quad (3.2)$$

avec $R_c = 1$ la réflectance cible et N le nombre de longueur d'onde considéré (fixé à 81 jusqu'ici) entre 400 et 700 nm. Cette fonction de coût a été choisie car elle est la plus simple possible, mais d'autres fonctions existent et sont compatibles avec notre objectif, comme la fonction cf_2 détaillée ci après :

$$cf_2 = \left[\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\frac{R(\lambda_j) - R_c(\lambda_j)}{\Delta R} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.3)$$

avec ΔR les tolérances en chaque longueur d'onde, paramétrées égales à 0.01 dans notre cas (toutes les longueurs d'ondes ont le même poids dans la fonction de coût). C'est d'ailleurs sous cette forme que Tikhonravov et ses collègues optimisent leurs filtres optiques[36].

Nous avons effectuée l'optimisation de 100 populations en minimisant la fonction cf_1 et les 100 meilleures structures obtenues représentent la population s_1 . De la même manière, la minimisation de cf_2 de 100 populations a permis de générer la population s_2 . Pour chacune des deux populations, nous pouvons calculer la valeur des deux fonctions de coût de chaque individu. L'image de gauche de la figure 3.4 montre que si nous comparons les populations en nous basant sur la fonction de coût cf_1 , la population s_1 est une meilleure population : toutes les valeurs de cf_1 sont inférieures à celles de cf_2 . Ce résultat n'est pas étonnant, puisque s_1 a été optimisée pour que cf_1 soit la plus petite possible. En revanche, l'image de droite de la figure 3.4 présente un résultat beaucoup plus intéressant : si nous comparons les deux populations en nous basant sur la fonction de coût cf_2 , c'est encore la population s_1 qui sort gagnante ! Ce résultat est plus étonnant car la population s_2 a justement été créée avec l'objectif que la fonction cf_2 soit la plus petite possible. Cette expérience montre qu'il est préférable d'utiliser la fonction de coût cf_1 plutôt que cf_2 pour optimiser nos structures photoniques, et que le choix de la fonction de coût est réellement impactant sur le résultat de DE. Ce résultat rappelle que nous avons, lors du chapitre précédent, déjà remarqué qu'il n'était pas nécessaire d'alourdir la fonction de coût du morpho pour obtenir une structure en damier capable de diffuser la lumière bleue. Demander explicitement dans la fonction de coût à minimiser la réflexion spéculaire des longueurs d'onde autre que le bleu n'a en effet pas permis de générer plus facilement les structures optimales en damier. Dans la suite des travaux, nous utiliserons donc l'écriture la plus simple possible d'une fonction de coût qui permette de répondre à l'objectif fixé.

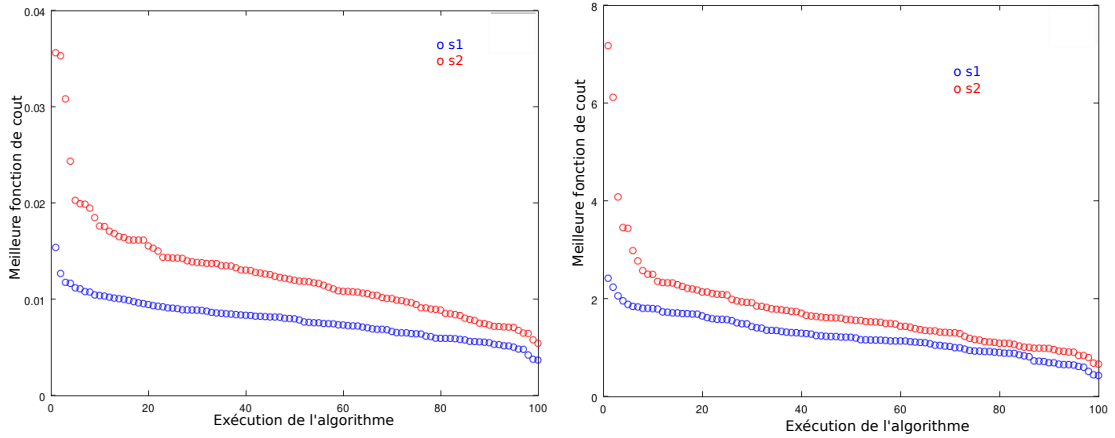
(a) Évaluations de la fonction de coût cf_1 .(b) Évaluations de la fonction de coût cf_2 .

FIGURE 3.4 – Comparaison des meilleures structures obtenues en optimisant une fonction de coût d'écriture simple (points bleus, s_1) avec les meilleures structures obtenues en optimisant une fonction de coût complexe (points rouges, s_2). Les deux fonctions de coût répondent au même objectif optique. Gauche : comparaison à partir des valeurs cf_1 calculées pour s_1 et s_2 . Droite : comparaison à partir des valeurs cf_2 calculées pour s_1 et s_2 . Chaque point est le résultat d'une optimisation complète. Les meilleures optimisations sont représentées à droite, les moins bonnes à gauche.

3.2 Comparaison des performance de DE avec Needle

La technique Needle est un algorithme spécifique aux multicouches basé sur un ensemble discret d'indices de réfraction. Dans sa version originale, Needle ajoute une couche d'épaisseur quasi nulle (une aiguille) à l'endroit qu'il a déterminé comme ayant le plus d'impact sur les performances, puis il optimise l'épaisseur pour cette couche et ainsi de suite. Grâce à cette technique, il est possible d'atteindre une réflectance ou une transmittance pour un filtre optique qui peut être arbitrairement proche des spectres souhaités[35, 36, 23]. Needle n'est donc pas à proprement parler un algorithme d'optimisation qui cherchera généralement une solution avec un nombre fixe de couches - et son principe ne peut être étendu à aucun autre problème, notamment à des géométries plus complexes comme la structure Morpho. Mais vu l'importance de Needle pour la communauté des filtres optiques, nous avons dû essayer de comparer Needle avec des algorithmes d'optimisation globale, en particulier DE.

Étant donné que tout algorithme d'optimisation globale aura de plus en plus de difficultés à converger lorsque le nombre de couches devient trop grand (comme indiqué dans le chapitre précédent, au-dessus de 60 degrés de liberté, les algorithmes d'optimisation globale échouent à plusieurs reprises pour trouver l'optimum), Needle est capable de surpasser n'importe quel algorithme d'optimisation globale. Cependant, il est bien connu aussi que les solutions apportées par Needle ne sont pas optimales pour un nombre de couches donné. Lorsque le nombre de couches est suffisamment faible, des algorithmes d'optimisation globale efficaces comme DE peuvent être en mesure de fournir de meilleures solutions que Needle. Encore une fois, Needle fonctionne en ajoutant des couches, de sorte qu'aucune comparaison ne peut être juste pour les deux types d'algorithmes. Nous avons simplement essayé de voir si Differential Evolution pouvait au moins rivaliser avec Needle d'une manière ou d'une autre, en utilisant des cas test

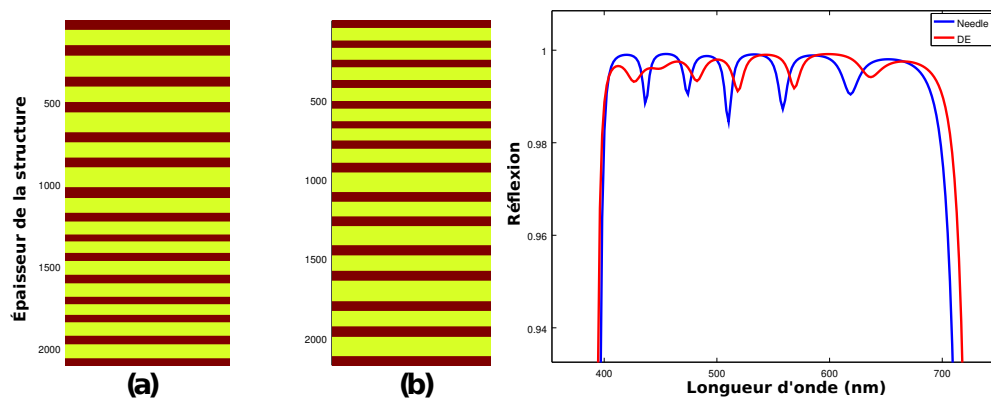


FIGURE 3.5 – Gauche : (a) Structure générée à l’aide de Needle[36], contenant 29 couches (b) Meilleure structure trouvée à l’aide de DE pour 29 couches. Droite : Comparaison des deux spectres de réflectance montrant que le miroir diélectrique proposé par DE est en fait légèrement meilleur que la structure proposée par Needle.

standard[36], en particulier le plus modulaire : le miroir à gradient d’épaisseur.

DE a réussi à apporter une solution au problème légèrement meilleure que Needle pour un nombre de couches qui peut être considéré comme assez élevé (29 couches). Les structures respectivement obtenues par Needle et DE sont présentées sur la figure 3.5 et ont une allure similaire. Si celle générée par Needle (à gauche) fait apparaître des couches de plus en plus épaisses, celle générée par DE fait apparaître des couches de plus en plus fines, mais les deux structures semblent régies par un gradient d’épaisseur similaire. En observant les spectres de réflexion de ces deux structures, on s’aperçoit que non seulement les structures sont très efficaces car les coefficients de réflexion pour les longueurs d’onde comprises entre 400 et 700 nm sont très proches de 1, mais aussi que l’allure des deux spectres est similaire. En comparant les valeurs des fonctions de coût des deux structures, il s’avère que celle correspondant à la structure générée par DE est plus basse que celle générée par Needle, mais d’un facteur trop faible pour considérer qu’une des deux structures est réellement meilleure que l’autre.

Nous ne prétendons pas ici que DE est meilleur que Needle, ce qui n’a aucun sens, mais au moins qu’il peut produire des solutions pouvant concurrencer Needle sur le problème de conception des filtres optiques - ce qui est déjà un exploit.

Conclusion

Pour résumer, la version de DE que nous avons identifié comme étant la plus prometteuse pour générer des structures modulaires est définie par

- La mutation **rand to best 1**,
- Les pondérations $F1=0.9$ et $F2=0.8$,
- Le coefficient de croisement $CR=0.8$,
- Une population de 30 individus.

Il doit être précisé que

- Le budget de l’optimisation (nombre de fois où la fonction de coût est calculé) est ré-évalué pour chaque nouveau problème, pour s’assurer de la convergence de l’algorithme systématiquement ;

- Les fonctions de coût choisies sont systématiquement écrites de la manière la plus simple possible ;
- Chaque problème est optimisé 50 ou 100 fois (selon si la fonction de coût prend beaucoup de temps ou non à être calculée) pour s'assurer de la récurrence de la solution obtenue, et ainsi de la fiabilité de la méthode d'optimisation pour se rapprocher d'un minimum global – ou du moins d'un minimum local avec un fort bassin d'attraction.

Nous obtenons grâce à cette version de DE et cette méthodologie d'optimisation des très bons résultats pour ce qui concerne l'optimisation d'un miroir à gradient d'épaisseur – une structure qui présente une grande forme de modularité. Nous nous attendons ainsi à générer grâce à ce même algorithme et cette même méthodologie des structures avec des caractéristiques similaires à celles du HRC – à savoir, une structure modulaire dont nous pouvons facilement comprendre le fonctionnement physique *a posteriori* de l'optimisation, et dont nous pourrions nous inspirer pour établir de nouvelles règles de design de structures photoniques.

Optimisation d'un anti-reflet pour le photovoltaïque

Le doute est une force. Une vraie et belle force. Veille simplement qu'elle te pousse toujours en avant.

Le Pacte des Marchombres, L'Envol
Pierre Bottero

Introduction

Dès les années 1950, on a souhaité s'inspirer de la nature pour créer une machine capable de faire comme la Nature, c'est-à-dire d'inventer toute sorte de choses[6]. Ce sont les idées de Turing qui sont à l'origine de l'apprentissage automatique – donc par extension de tout ce qui se rapporte à l'intelligence artificielle – mais aussi de la programmation génétique de Koza[148]. Si Koza espérait détenir entre ses mains une "machine à invention", dont il fait beaucoup la publicité en tant que "prophète"[149], il s'avère qu'en réalité ses programmes se sont faits progressivement surpasser par à peu près toutes les autres méthodes de programmation développées. La machine à invention, incapable d'inventer, est alors peu à peu tombée dans l'oubli au profit d'algorithmes d'optimisation ou d'apprentissage automatique ne se revendiquant pas capable de concurrencer la nature.

Mais maintenant que nous disposons d'un algorithme, Differential Evolution, qui s'est montré capable de générer des structures que l'on retrouve dans la nature, nous sommes en droit de nous demander si nous n'avons pas, sans le faire vraiment exprès, effectué un pas dans la direction que souhaitait Koza. Maintenant que nous maîtrisons le domaine de fonctionnement de l'algorithme, nous allons donc pouvoir voir si l'on est capable de générer des nouvelles structures, les comprendre, et peut-être même, qui sait, en déduire des règles de conception? Nous rappelons que notre méthode d'optimisation ne permet pas de s'assurer que l'algorithme génère des structures optimales. Aucune méthode d'optimisation ne le peut, en réalité. En revanche, nous avons défini trois critères de satisfaction qui nous permettent d'évaluer la qualité d'une solution optimisée : (i) sa reproductibilité, (ii) sa périodicité ou régularité apparente, et (iii) le fait que la structure existe dans la nature.

Nous nous sommes intéressé au problème de la couche anti-reflet idéale à poser sur du silicium pour limiter les pertes par réflexion sur des panneaux photovoltaïques. En utilisant des indices de réfraction comparables à ceux déjà utilisés pour retrouver des structures naturelles, nous avons observé qu'une structure en particulier surgit spontanément et de façon systématique. Cette structure est constituée d'un miroir de Bragg complété par des couches externes d'adaptation d'impédance. Elle est donc régulière et par cela elle remplit une première condition de satisfaction.

Dans ce chapitre, nous allons voir plus en détail quelles sont les conditions de son émergence afin de s'assurer de la qualité de la solution. C'est la question de la fiabilité de la solution, une deuxième condition de satisfaction, qui sera ici évaluée. Pour ce qui est de la troisième condition de satisfaction, à savoir si la structure est similaire à une structure naturelle, nous ne pourrions pas le vérifier puisque par définition il n'existe pas dans la nature une structure anti-reflet spécialisée pour maximiser l'absorption du spectre solaire. En revanche, nous allons nous demander si nous comprenons son fonctionnement. Si c'est le cas, une nouvelle condition de satisfaction sera remplie.

4.1 Un anti-reflet (ARC) simplifié

4.1.1 Objectif de l'optimisation

L'objectif de l'optimisation présentée dans ce chapitre est de trouver le meilleur multicouche qui agisse comme un anti-reflet sur un substrat de silicium pour une application photovoltaïque. Les couches sont planes, leurs épaisseurs sont optimisées, les matériaux sont imposés et l'objectif est de maximiser l'absorption dans la couche active de silicium des photons qui peuvent être convertis en électricité lorsque la structure est illuminée en incidence normale par une onde plane. L'optimisation est réalisée grâce à l'algorithme Differential Evolution (DE), plus précisément la variante décrite dans le chapitre 3.

La fonction de coût qui est minimisée par DE s'écrit

$$f = 1 - \frac{j_{sc}}{j_{max}}, \quad (4.1)$$

où j_{sc} est le courant de court-circuit, défini par l'expression

$$j_{sc} = \int A(\lambda) \frac{dI}{d\lambda} \frac{e\lambda}{hc} d\lambda, \quad (4.2)$$

avec A l'absorption dans la couche active en silicium, e la charge élémentaire, h la constante de Planck, c la vitesse de la lumière dans le vide, I la densité spectrale d'intensité lumineuse donnée par le spectre solaire AM1.5 [150], et j_{max} le maximum théorique de courant de court-circuit lorsqu'on considère des photons de longueur d'onde dans un intervalle de 375 nm à 750 nm.

La fonction de coût ainsi décrite est comprise entre 0 et 1.

4.1.2 Description générale de la structure optimisée : l'ARC simplifié

Les premières optimisations [133] ont mené à une structure constituée d'un miroir de Bragg central entouré de quatre couches, deux de chaque côté du miroir de Bragg, ne présentant pas la périodicité du miroir et qu'on appellera *couches externes* dans la suite du chapitre puisqu'elles sont externes au miroir de Bragg.

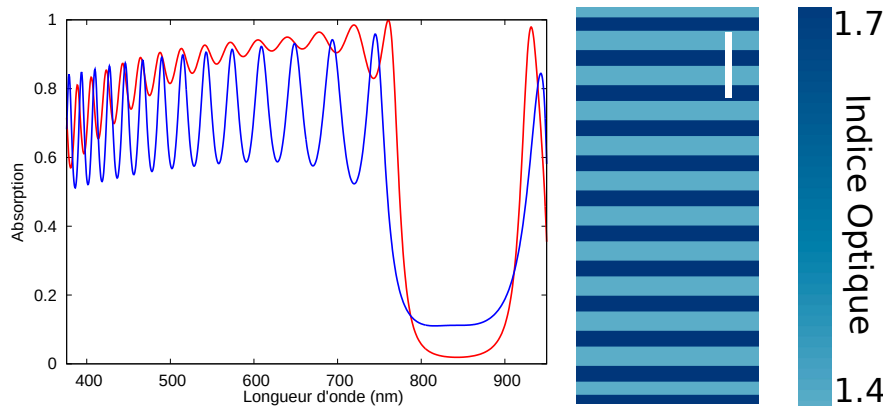


FIGURE 4.1 – Spectre d’absorption dans la couche de silicium de la structure optimisée (rouge) et d’un miroir de Bragg parfait (bleu). La structure optimisée minimise le *ripple* - l’amplitude des oscillations de l’absorption - dans le spectre visible. La ligne blanche représente 500nm.

Cette structure-solution, qu’on appellera *l’ARC simplifié*, est donc constitué d’un miroir de Bragg ayant une bande interdite centrée sur 835 nm, complété par deux couches externes au dessus de la structure (en contact avec l’air) de respectivement 79 nm et 102 nm, et de deux couches externes en dessous (en contact avec le silicium) de respectivement 100 nm et 70 nm. Cette structure est obtenue quel que soit le nombre de couches constituant l’anti-reflet. En effet, modifier le nombre de couches de la structure dans le procédé d’optimisation n’a une influence que sur le nombre de périodes constituant le miroir de Bragg central, qui augmente avec le nombre de couches. Les couches externes, elles, sont toujours les mêmes et ne voient pas leur nombre augmenter.

L’ARC simplifié, ainsi que son spectre d’absorption, sont montrés sur la figure 4.1. Ce spectre est comparé au spectre d’absorption d’une structure photovoltaïque où l’anti-reflet est un miroir de Bragg parfait (sans les deux couches externes de chaque côté). Le rôle des couches additionnelles peuvent alors être facilement compris : elles réduisent les oscillations de l’absorption dans le spectre visible, et ainsi maximisent l’absorption dans le domaine spectral où le silicium est justement le plus absorbant. Le comportement général de la structure est encore mieux compris quand on regarde le spectre de réflexion de la structure, car la réduction des oscillations de réflexion, ainsi que la haute réflexion provoquée par la bande interdite du miroir de Bragg, apparaissent clairement dans la figure 4.2. Lorsqu’on augmente le nombre de couches de la structure, le spectre de réflexion résultant présente les mêmes amplitudes de réflexion en dehors de la bande interdite que pour une structure avec moins de couches, comme le présente la figure 4.3.

La structure évoque des miroirs de Bragg équipés de couches de réduction d’oscillations, une technique classique utilisée en synthèse de filtres optiques pour des miroirs de Bragg déposés sur un substrat de verre[137, 151, 152, 153]. Une telle technique n’est cependant habituellement pas utilisée pour générer des couches anti-reflets, car ce n’est généralement pas l’objectif visé.

L’émergence d’une telle solution, partiellement périodique, peut paraître surprenante. En effet, les cristaux photoniques – dont font partie les miroirs de Bragg [151] – présentent en général des bandes interdites, des régions spectrales pour lesquelles les ondes électromagnétiques ne se propagent pas, et peuvent alors se comporter comme des sélectionneurs de fréquences. Les cristaux photoniques apparaissent donc en général quand la réflexion, plutôt que la transmission, est maximisée.

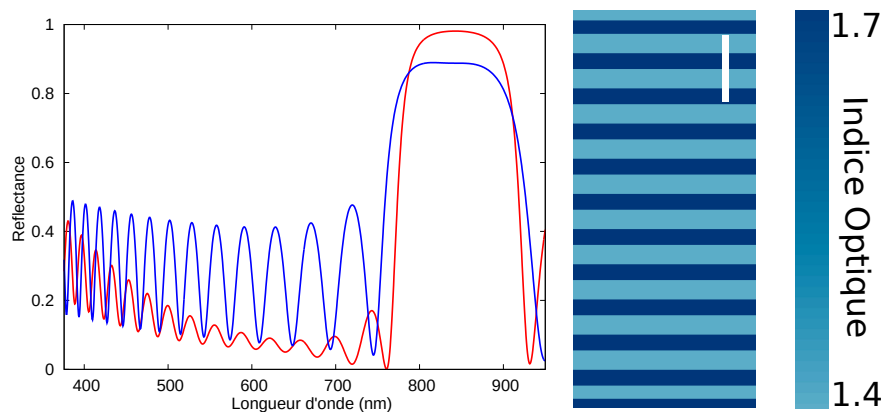


FIGURE 4.2 – Spectre de réflexion de la structure optimisée (rouge) et d'un miroir de Bragg parfait (bleu). La structure optimisée minimise le *ripple* - l'amplitude des oscillations de la réflexion - dans le domaine visible. La ligne blanche représente 500nm.

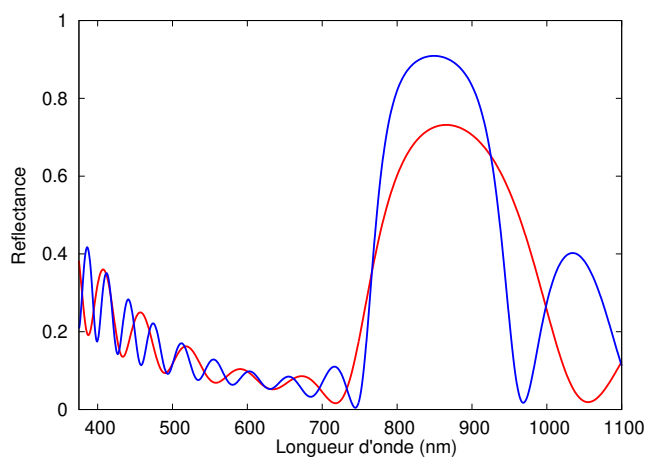


FIGURE 4.3 – Spectre de réflexion de l'ARC simplifié avec 6 couches (rouge) et 12 couches (bleu) dans le miroir de Bragg central. Le nombre de couches n'impacte pas l'amplitude du *ripple*.

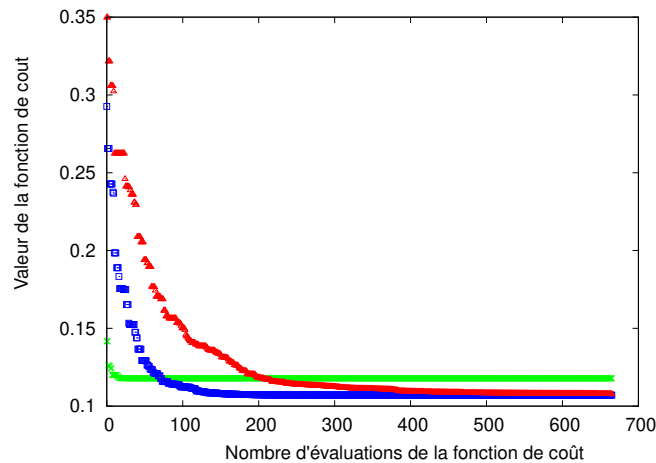


FIGURE 4.4 – Courbes de convergence obtenues avec DE et en évaluant 2×10^4 la fonction de coût pour 3 situations, la première avec 2 couches (vert), une autre avec 26 couches (bleu) et la troisième avec 50 couches (rouge), en optimisant un ARC sur du silicium. La figure montre que le budget est largement suffisant pour que l'algorithme converge dans chaque situation. Cependant, cela ne signifie pas que l'optimum est atteint, c'est pourquoi nous avons effectué plusieurs optimisations similaires de chaque situation.

4.2 Émergence de la structure

Les résultats préliminaires et prometteurs présentés dans ce début de chapitre interrogent : à quel point cette structure basée sur un cristal photonique est-elle une solution efficace ? Est-elle apparue à cause de conditions très spécifiques, ou bien est-ce une solution plus générale qui peut se retrouver dans un grand nombre de cas, même en modifiant les paramètres d'optimisation ? Pour répondre à cette question, nous avons réalisé une étude détaillée se basant sur plusieurs cas, chaque cas correspondant à des conditions d'optimisation différentes. Nous avons lancé 50 fois les optimisations pour chacun des cas, pour étudier l'efficacité de l'algorithme : si une solution apparaît de façon récurrente alors que la population initiale de structures est différente à chaque fois, alors nous pouvons accorder un fort degré de confiance au résultat.

Pour chaque optimisation, le nombre de couches dans la structure est imposé. Nous avons étudié l'impact du nombre de couches sur le résultat de l'optimisation en faisant varier entre 4 et 50 le nombre de couches.

Chaque optimisation utilise un budget de 2×10^4 évaluations de la fonction de coût, ce qui est suffisant pour que l'algorithme converge quel que soit le nombre de couches de la structure et donc le nombre de paramètres à optimiser, comme le montre la figure 4.4.

Imposer les indices de réfraction des couches, leur alternance, ou un nombre pair de couches pour constituer l'ARC sont des choix arbitraires qui peuvent introduire des biais et qui peuvent être responsables de l'émergence de la structure. Nous avons donc testé différentes contraintes sur les paramètres d'optimisation, et la plupart du temps nous avons obtenu comme solution un cristal photonique avec deux couches adaptées de chaque côté, similaire à l'ARC simplifié. Les parties suivantes du chapitre détaillent les résultats obtenus pour chaque conditions d'optimisation.

4.2.1 Optimisation sous conditions standard

Les conditions standard d'optimisation sont celles qui ont été paramétrées lors de l'étude préliminaire, en étudiant quel algorithme d'optimisation est le plus efficace[133]. Le nombre de couches, pair, est imposé, ainsi qu'une alternance de couches d'indices de réfraction 1.4 puis 1.7. Ces indices ont été choisis car ils correspondent à la fois à des matériaux biologiques[154] apparaissant sur des structures photoniques naturelles, ainsi que des matériaux typiques d'un silicium oxynitruré que nous avons utilisé pour la fabrication des couches anti-reflet (présenté à la fin du chapitre)[155]. Ces couches anti-reflet sont placées sur un substrat de silicium amorphe oxygéné.

Nous avons tracé en rouge sur la figure 4.5 la meilleure fonction de coût optimisée en fonction du nombre de couches dans la structure, et en bleu la fonction de coût correspondant à l'ARC simplifié tel qu'il est décrit dans la section précédente. On sait que lorsqu'on réalise un filtre optique constitué de multicouches, plus la structure comporte de couches, plus il est facile d'obtenir la fonction optique souhaitée [156]. On s'attend donc à ce que la fonction de coût diminue avec le nombre de couches dans la structure. On sait également que plus le nombre de paramètres à optimiser est important, plus il est difficile pour l'algorithme d'optimisation de trouver une solution qui se rapproche du minimum global de la fonction de coût. On comprend donc que si la fonction de coût augmente avec le nombre de couches, cela signifie que le nombre de paramètres à optimiser devient trop grand pour l'algorithme et que l'optimisation n'a pas abouti à une structure optimale, puisque normalement en augmentant le nombre de couches on trouve forcément une fonction de coût plus faible. Or dans la figure 4.5 on constate que les valeurs des fonctions de coût commencent par diminuer jusqu'à une quinzaine de couches, avant de remonter puis d'osciller plutôt que de remonter en continu, et que les valeurs des fonctions de coût des structures optimisées et des ARC simplifiés ont le même comportement. Cela suggère que ce n'est finalement pas parce que le nombre de paramètres à optimiser devient trop important pour l'algorithme que la fonction de coût augmente, mais bien parce que la structure solution basée sur un cristal photonique avec des couches adaptées fait naturellement apparaître des oscillations.

On remarque également que les valeurs de la fonction de coût de l'ARC simplifié sont à peine plus élevées que celles des structures optimisées. Cela signifie que l'optimisation apporte des petits changements par rapport à la structure simplifiée, pour l'améliorer davantage. Ces changements apportent des modifications mineures mais présentes. On peut donc déduire que l'ARC simplifié prend en compte les caractéristiques principales des structures optimisées, moins quelques détails.

Cette même figure 4.5 indique également que pour 50 couches, l'optimisation est encore digne de confiance malgré le nombre élevé de paramètres à optimiser, puisqu'elle produit des solutions légèrement meilleures que l'ARC simplifié.

La figure 4.5 indique que la structure à 16 couches et celle à 46 couches sont particulièrement efficaces. Les figures 4.6 et 4.7 représentent les structures et leurs spectres de réflexion. La structure à 16 couches est très similaire à l'ARC simplifié : il s'agit d'un cristal photonique ayant une bande interdite dans l'infrarouge, avec deux couches d'épaisseur adaptées à l'air au dessus et au silicium en dessous. La structure à 46 couches, elle, présente globalement les mêmes caractéristiques que celles à 16 couches mais avec ce qu'on pourrait appeler des défauts. Ces défauts sont visibles notamment dans le spectre de réflexion, où l'on peut apercevoir une bande interdite altérée par des petites zones de transmission. On pourrait en déduire que l'optimisation à 46 couches est plus difficile pour l'algorithme, à cause du plus grand nombre de paramètres, et qu'on s'attend dans l'idéal à une structure sans défauts, mais la comparaison de la fonction de coût de la structure optimisée à 46 couches avec celle de l'ARC simplifié à 46 couches montre

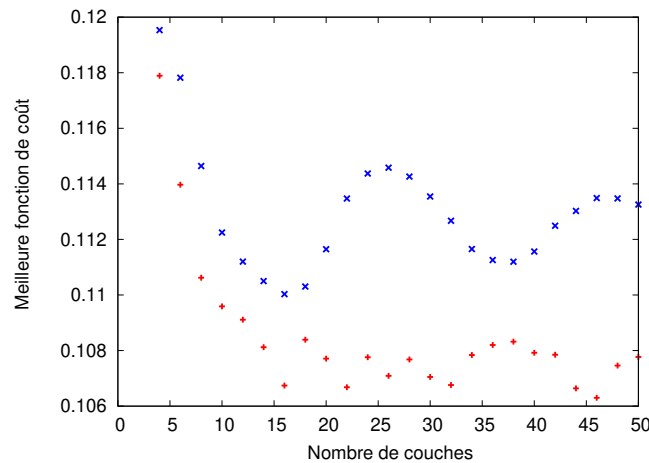


FIGURE 4.5 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, pour des conditions standards avec un substrat de silicium (courbe rouge). La courbe bleue représente la valeur de la fonction de coût pour l'ARC simplifié qui est constamment suggéré par l'algorithme : un cristal photonique central avec des couches adaptées.

que l'optimisation génère une meilleure structure, comme déjà discuté et montré sur la figure 4.5.

4.2.2 Imposer un nombre impair de couches

Pour simplifier les optimisations, le nombre de couches dans la structure est imposé. Dans les conditions standards d'optimisation, le nombre de couches est pair et la première couche est constituée du matériau d'indice bas. La dernière couche de la structure est ainsi une couche de matériau d'indice élevé. Nous avons modifié cette contrainte pour imposer un nombre impair de couches dans la structure, et nous avons ainsi demandé à l'algorithme d'optimiser un ARC dont la dernière couche est constituée du matériau d'indice bas. Les meilleures fonctions de coût parmi 50 optimisations en fonction du nombre de couches dans la structure sont représentées sur la figure 4.8.

D'après la figure 4.8, la meilleure structure optimisée comporte 31 couches. Nous allons comparer les structures à 11 couches, 19 couches et 31 couches. Les représentations des structures et leurs spectres de réflexion respectifs sont présentés sur les figures 4.9, 4.10, et 4.11. La structure à 11 couches est très similaire à l'ARC simplifié. La structure à 19 couches, plus efficace que celle à 11 couches, est similaire à l'ARC simplifié mais on peut voir dans le spectre de réflexion un pic de transmission dans la bande interdite provoqué par les défauts dans le cristal photonique de la structure optimisée. Enfin, la structure à 31 couches est celle qui permet d'avoir la fonction de coût la plus basse parmi toutes celles obtenues dans ces conditions d'optimisation, mais présente de nombreux défauts, très largement visibles dans les épaisseurs des couches du cristal photonique et la bande interdite du spectre de réflexion, ce qui témoigne de la complexité grandissante de l'optimisation quand on augmente le nombre de couches de la structure.

La figure 4.8, représentant les meilleures fonctions de coût obtenues en fonction du nombre de couches total de la structure, montre une allure similaire à celle obtenue dans les conditions standard d'optimisation : la fonction de coût diminue lorsque le nombre de couches augmente,

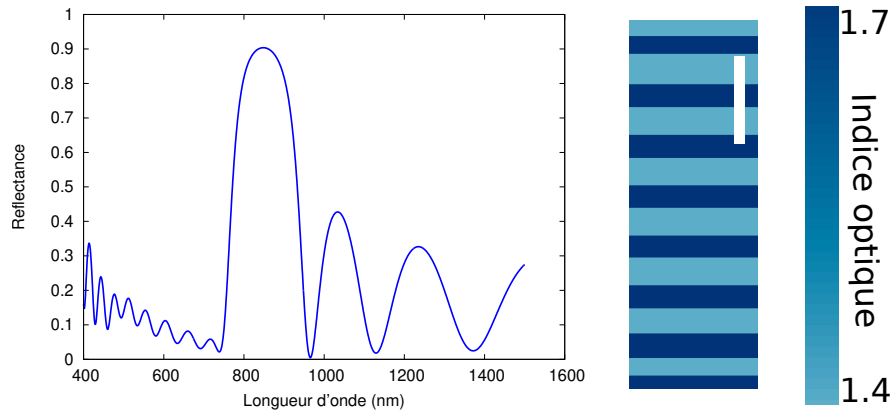


FIGURE 4.6 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 16 couches sous conditions standards. La ligne blanche représente 500 nm. On observe une bande interdite dans l'infrarouge.

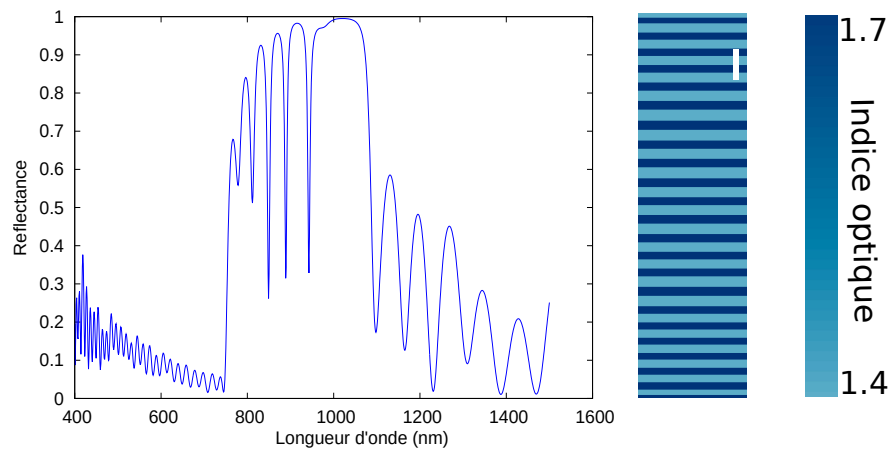


FIGURE 4.7 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 46 couches sous conditions standards. La ligne blanche représente 500 nm. On observe une bande interdite avec des défauts dans l'infrarouge.

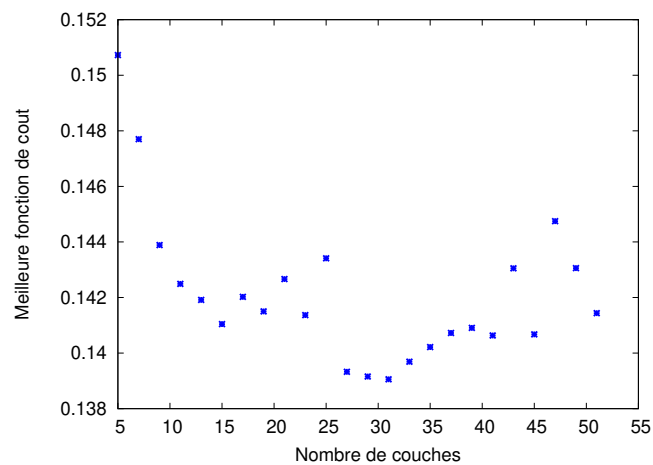


FIGURE 4.8 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre impair de couches de la structure avec un substrat de silicium. La meilleure structure comporte 31 couches.

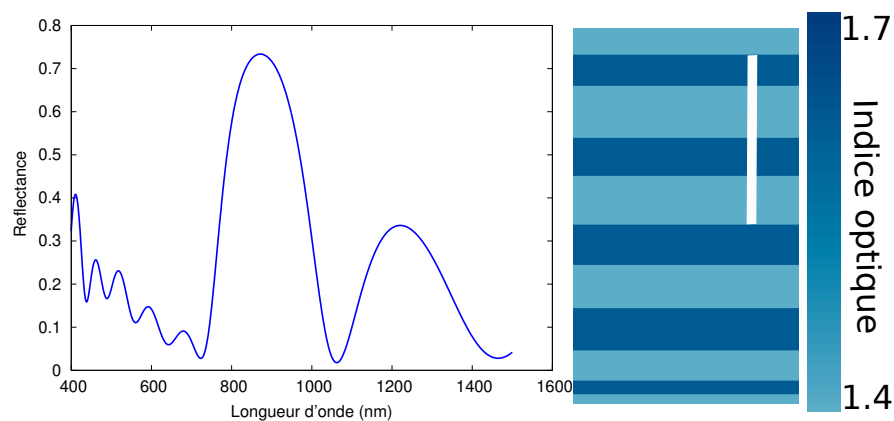


FIGURE 4.9 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 11 couches. La ligne blanche représente 500 nm. On observe une bande interdite dans l'infrarouge.

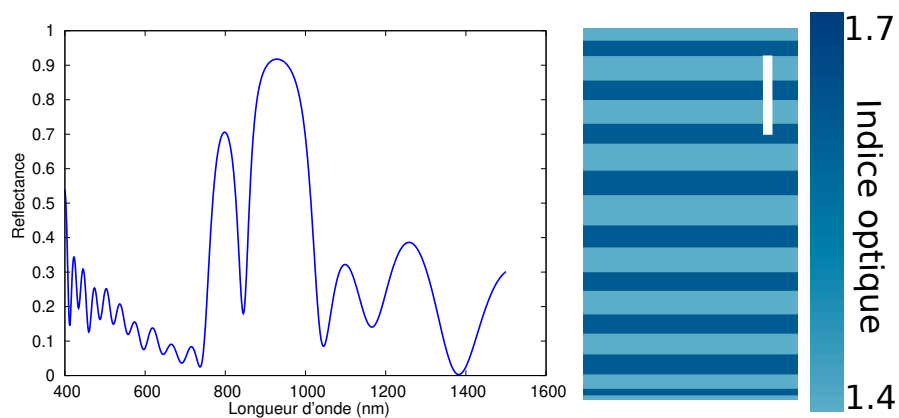


FIGURE 4.10 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 19 couches. La ligne blanche représente 500nm.

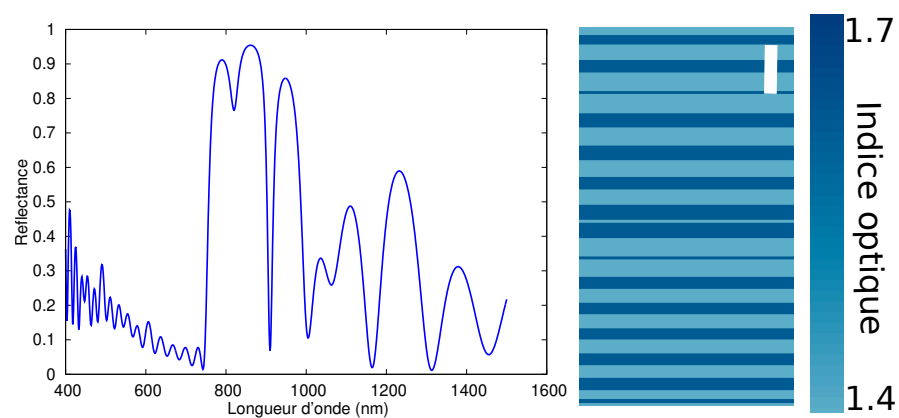


FIGURE 4.11 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 31 couches. La ligne blanche représente 500nm.

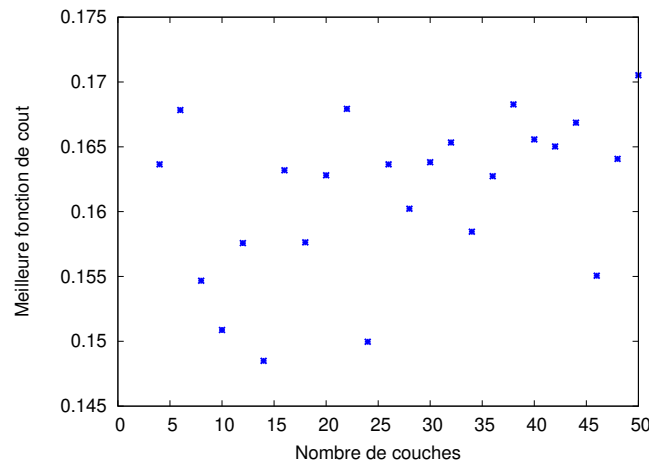


FIGURE 4.12 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, avec une première couche d'indice élevé. La meilleure structure comporte 14 couches.

jusqu'à une quinzaine de couche, pour ensuite faire apparaître des sortes d'oscillations. On constate cependant qu'à partir de 20 couches la fonction de coût a une nette tendance à augmenter : dans le cas présent, on comprend que l'optimisation est moins efficace lorsque plus de 20 couches sont contenues dans la structure. De plus, les résultats montrent que les fonctions de coût obtenues avec un nombre impair de couches sont systématiquement moins basses que celles obtenues avec un nombre pair de couche : nous comprenons qu'utiliser un nombre pair de couches est un choix pertinent pour trouver la structure idéale.

4.2.3 Première couche d'indice élevé

Nous avons modifié les conditions d'optimisation standards pour que la structure anti-reflet soit constituée par une première couche, celle en contact avec l'air, de matériau d'indice élevé. La structure comportant toujours un nombre pair de couches dans ces optimisations, la dernière couche, en contact avec le silicium, est donc une couche constituée du matériau d'indice bas. On peut constater sur la figure 4.12 que DE semble avoir beaucoup plus de mal à optimiser des structures ayant une première couche d'indice élevé, d'une part puisque la fonction de coût ne diminue pas lorsque nous augmentons le nombre de couches dans la structure et d'autre part parce que les valeurs minimales de fonctions de coût obtenues sont nettement supérieures à celles obtenues sous condition standard. Les résultats montrent que l'optimisation tend à rendre la première couche la plus petite possible : chaque couche devant avoir une épaisseur d'au moins 30 nm, la quasi-totalité des structures optimisées présentent une première couche d'une épaisseur de précisément 30 nm.

La meilleure structure obtenue est une structure à 14 couches, dont la représentation est le spectre sont montrés sur la figure 4.13. On voit tout de suite sur le spectre de réflexion que la bande interdite du cristal photonique est loin d'être idéale : la réflexion n'est pas élevée, les oscillations de la réflexion dans le domaine visible sont importantes. Le cristal photonique présente de gros défauts. Le désordre apparaissant dans cette structure ne semble vraiment pas améliorer la fonction de coût, par rapport aux structures optimisées dans les conditions standards. Il est frappant de constater qu'un simple changement d'alternance de couches a

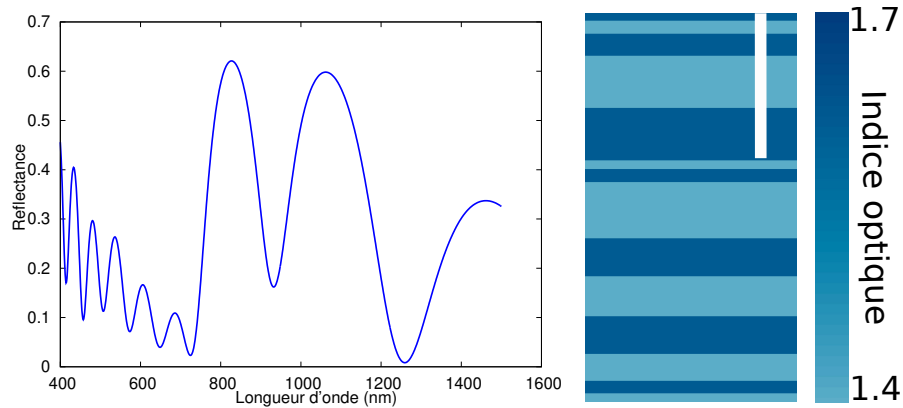


FIGURE 4.13 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 14 couches quand on force une première couche d'indice élevé. La ligne blanche représente 500nm.

une telle influence sur l'élégance et l'efficacité des structures-solutions. Cette contrainte en apparence anodine dégrade grandement les optimisations, alors qu'on aurait pu s'attendre à ce qu'elle permette de générer d'autres types de structures tout aussi efficaces que les structures de références.

4.2.4 Grand contraste d'indice

Les indices de réfraction utilisés dans les conditions standards d'optimisation correspondent à des biomatériaux, certes réalisables avec des techniques de fabrication mais ce ne sont pas des matériaux utilisés habituellement pour concevoir des structures anti-reflets ou des filtres optique en général. Nous avons donc paramétré des nouvelles conditions d'optimisation en imposant des matériaux ayant un contraste d'indice plus élevé, et qui correspondent à des matériaux habituellement utilisés pour concevoir des filtres optiques [36]. La structure est alors une alternance de couche d'indices de réfraction 1.45 et 2.35.

Les meilleures fonctions de coût obtenues en fonction du nombre de couches dans la structure sont présentées sur la figure 4.14. La première chose frappante est la bassesse de la fonction de coût : ces conditions d'optimisation permettent d'obtenir des structures nettement bien plus efficaces qu'avec les conditions standards. La meilleure des structure optimisée est la structure à 20 couches.

Le spectre et une représentation de la structure à 20 couches optimisée avec un grand contraste d'indice sont montrés sur la figure 4.15. Le spectre de réflexion présente une magnifique bande interdite centrée sur 1000 nm, plus loin dans l'infrarouge que ce qu'on avait avec les conditions standards. La structure est encore une fois un cristal photonique avec des couches adaptées de chaque côté. Constaté que changer le contraste d'indice avait une telle influence sur la fonction de coût et sur l'efficacité de la structure optimisée nous a fait nous interroger sur la pertinence de fixer les indices de réfraction lors de l'optimisation. Que se passe-t-il lorsqu'on laisse le soin à l'algorithme de choisir les indices de réfraction de ses couches anti-reflet ?

4.2.5 Indices variables, petit contraste

Afin de vérifier les résultats préliminaires présentés en début de ce chapitre (section 4.1.2) nous avons lancé des optimisations sous conditions standards, mais en ajoutant les indices de

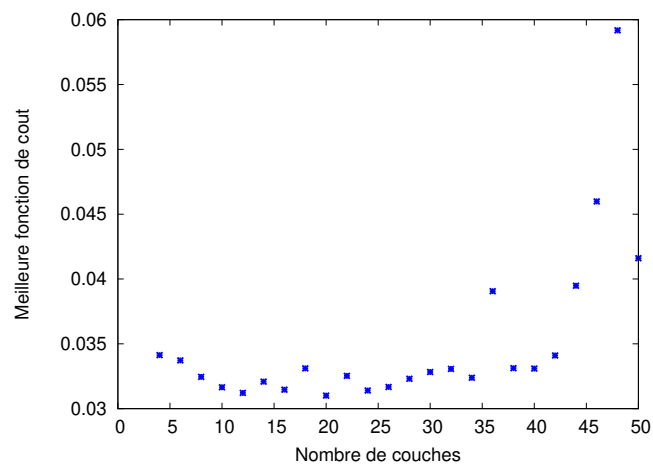


FIGURE 4.14 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, avec un contraste d'indice élevé. La meilleure structure comporte 20 couches.

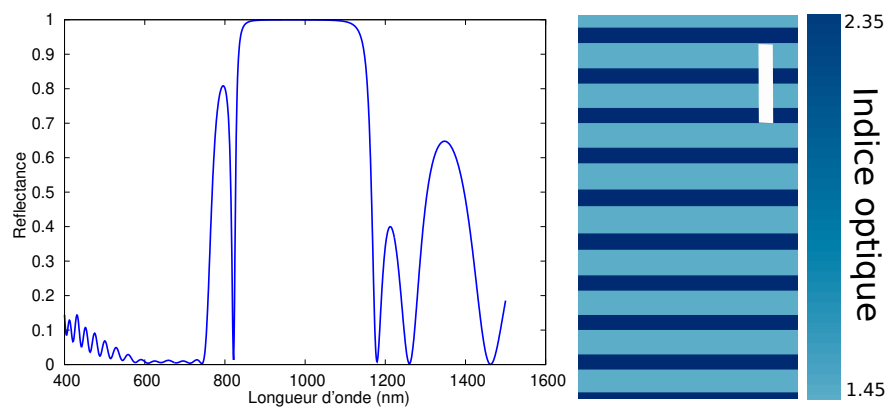


FIGURE 4.15 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 20 couches quand on agrandit le contraste d'indice. La ligne blanche représente 500nm.

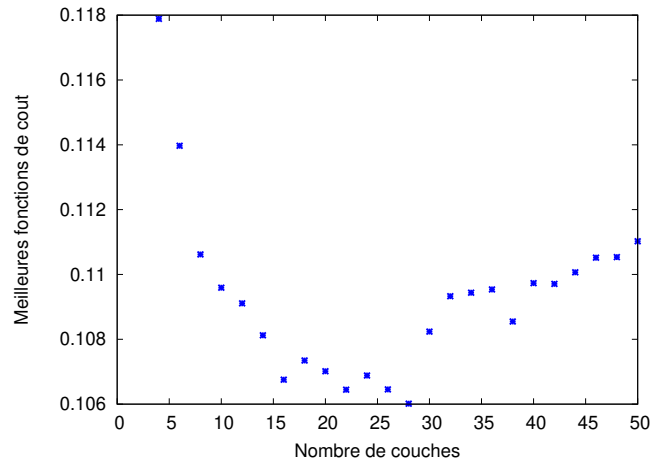


FIGURE 4.16 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, en faisant varier l'indice de réfraction dans un petit intervalle. La meilleure structure comporte 28 couches.

réfraction des couches dans les paramètres d'optimisation. L'algorithme a ainsi pu choisir quels indices utiliser pour ses couches anti-reflets entre des valeurs allant de 1.4 à 1.7. Les meilleures fonctions de coût obtenues en fonction du nombre de couches dans la structure sont présentées sur la figure 4.16. La meilleure structure comporte 28 couches, et au delà l'optimisation semble difficile pour DE comme en témoigne l'augmentation quasi constante de la valeur de la fonction de coût alors que le nombre de couches dans la structure augmente.

Le spectre de réflexion et une représentation des structures optimisées à 12 et 28 couches sont montrés en figure 4.17 et 4.18. La structure à 12 couches présente un beau cristal photonique et une belle bande interdite équivalents à ceux obtenus lorsque les indices de réfraction sont imposés. Sans surprise, l'optimisation montre qu'il est plus efficace d'utiliser une première couche faite d'un matériau d'indice bas. Il est frappant de constater que l'algorithme tend vers des structures composées de seulement deux matériaux, ceux ayant le plus fort contraste d'indice, alors qu'il avait la possibilité d'utiliser des indices intermédiaires. Nous retrouvons ici des résultats déjà établis par la communauté qui travaille sur les filtres optiques[36].

La structure à 28 couches, elle, est plus chaotique et plus efficace. Nous pouvons apercevoir dans la figure 4.18 la représentation de la structure, qui laisse apparaître un début de cristal photonique et un motif plus chaotique au centre de la structure avec des matériaux d'indice de réfraction intermédiaires. Le spectre montre que globalement la bande interdite dans l'infrarouge se retrouve, mais avec de nombreux pics de transmission qui n'impactent pas l'efficacité anti-reflet dans le domaine visible.

4.2.6 Indices variables, grand contraste

On a vu dans la section 4.2.4 qu'en augmentant le contraste d'indice entre les deux matériaux constituant l'anti-reflet, les performances étaient grandement amplifiées. Nous avons donc lancé de nouvelles optimisations, en laissant le soin à l'algorithme d'optimisation de choisir les indices des matériaux entre des valeurs allant de 1.45 à 2.35 (pour rappel, dans l'étude précédente les indices varient de 1.4 à 1.7). Les meilleures fonctions de coût obtenues en fonction du nombre de couches dans la structure sont montrées sur la figure 4.19. On constate que la structure à

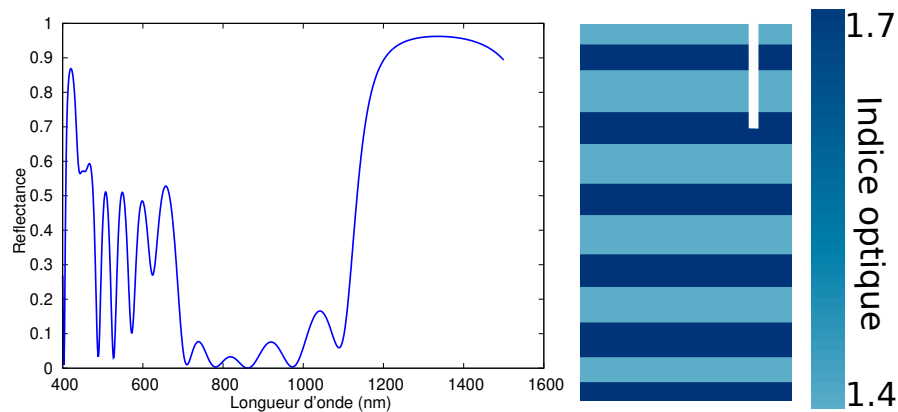


FIGURE 4.17 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 12 couches quand on laisse les indices varier entre 1.4 et 1.7. La ligne blanche représente 500nm.

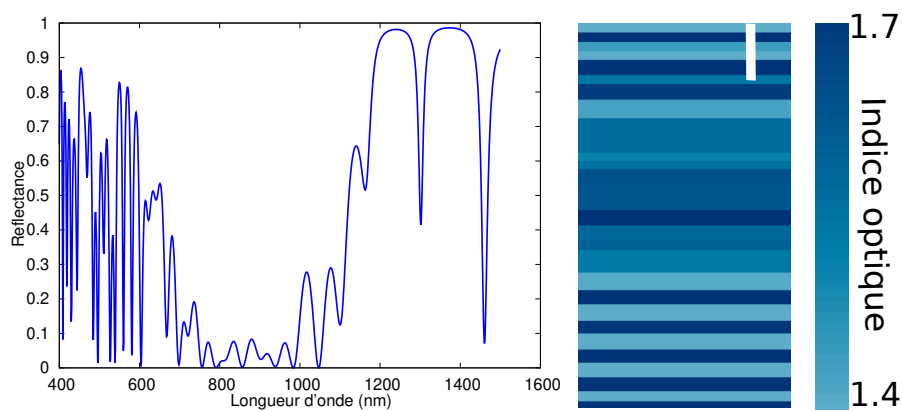


FIGURE 4.18 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 28 couches quand les indices de réfraction sont des paramètres d'optimisation. La ligne blanche représente 500nm.

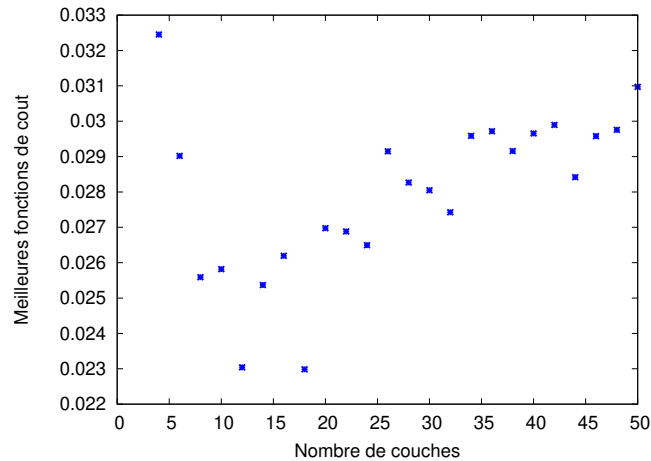


FIGURE 4.19 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, en faisant varier l'indice de réfraction dans un grand intervalle. La meilleure structure comporte 18 couches.

18 couches est celle qui permet d'avoir la fonction de coût la plus faible, donc la structure la plus efficace. Au delà de 20 couches, l'algorithme semble ne plus être très fiable, comme en témoigne la fonction de coût qui ne cesse d'augmenter malgré un nombre plus importants de couches, et donc de plus nombreuses possibilités de jouer sur les couches pour se rapprocher de l'objectif optique visé. Nous allons comparer les allures et spectres des structures à 14 et 18 couches, présentés sur les figures 4.20 et 4.21 respectivement.

Les structures ne font plus apparaître de cristal photonique contrairement à toutes les situations précédentes, mais elles présentent une certaine forme de régularité donnée par une symétrie depuis le centre. Ces structures rappellent celle à 28 couches obtenue en optimisant les indices de réfraction sur un plus petit intervalle.

4.2.7 Avec une couche d'argent

Un substrat de silicium amorphe oxygéné n'est pas le substrat le plus habituel lorsqu'on fabrique des cellules photovoltaïques.

Nous avons lancé des optimisations des couches anti-reflet dans les conditions standards, mais en considérant un substrat d'argent sur lequel est placé une couche de 89 nm de silicium cristallin au lieu d'un simple substrat de silicium amorphe oxygéné. Les meilleures fonctions de coût obtenues en fonction du nombre de couches dans la structure sont présentées sur la figure 4.22 et montrent que la structure à 28 couches, représentée avec son spectre sur la figure 4.23, est la plus efficace. Les fonctions de coût sont globalement plus élevées que celles obtenues lorsqu'on utilise les conditions standards d'optimisation avec un substrat de silicium amorphe. Nous retrouvons cependant un cristal photonique avec des couches adaptées aux extrémités, avec une bande interdite centrée dans l'infrarouge, et des oscillations de réflectance minimisées dans le domaine visible du spectre électromagnétique.

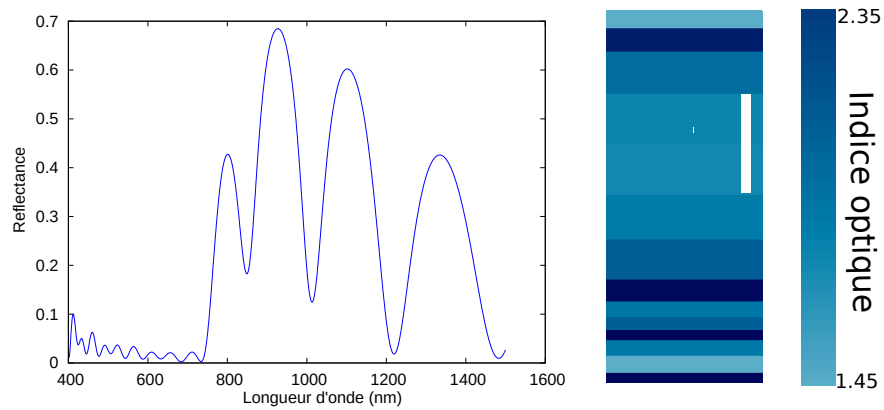


FIGURE 4.20 – Spectre de réflexion et représentation d’une structure avec 14 couches, lorsque l’indice de réfraction peut varier dans un large contraste. La ligne blanche représente 500nm.

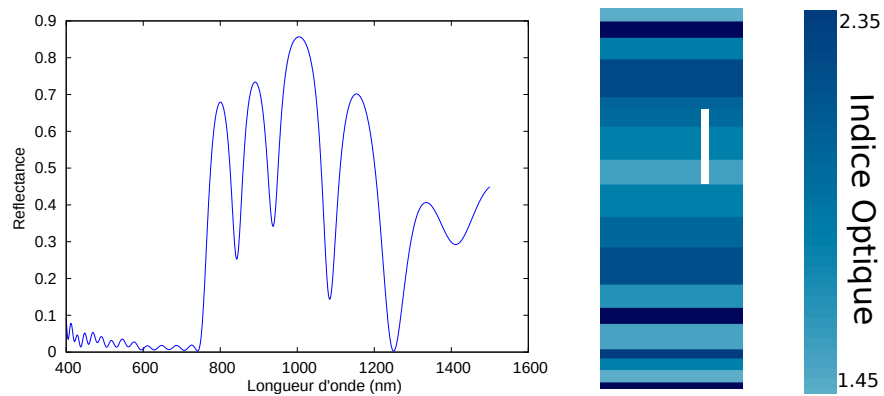


FIGURE 4.21 – Spectre de réflexion et représentation d’une structure avec 18 couches, lorsque l’indice de réfraction peut varier dans un large contraste. La ligne blanche représente 500nm.

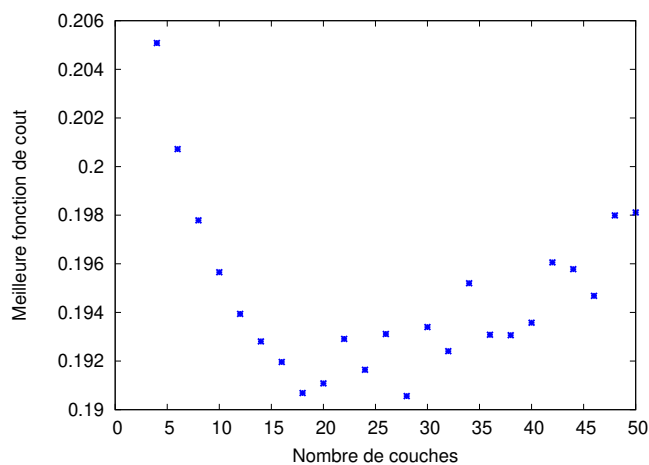


FIGURE 4.22 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, avec une couche de silicium sur substrat d'argent. La meilleure structure comporte 28 couches.

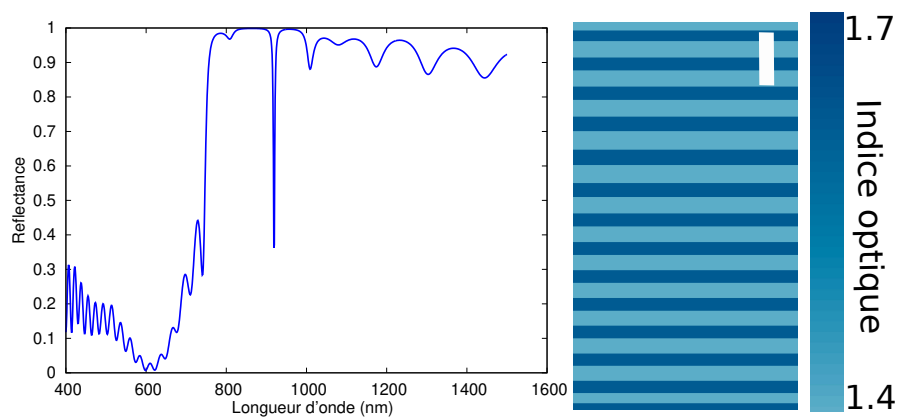


FIGURE 4.23 – Spectre de réflexion et représentation d'une structure avec 28 couches, lorsque une couche de silicium de 89 nm est posée sur un substrat d'argent. La ligne blanche représente 500nm.

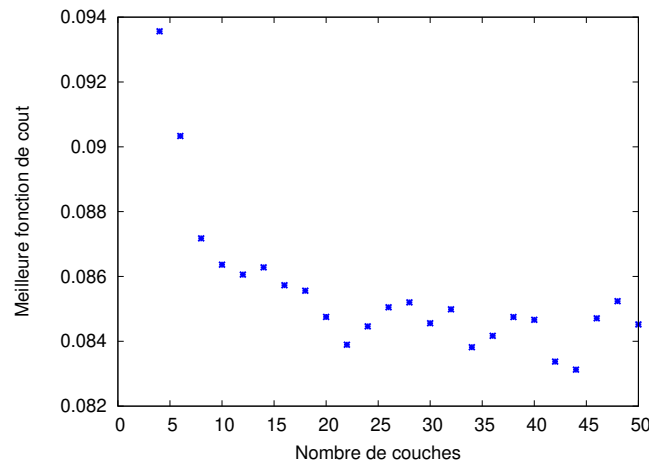


FIGURE 4.24 – Meilleure valeur de fonction de coût obtenue parmi 50 optimisations avec DE, en fonction du nombre de couches de la structure, sur un substrat de silicium cristallin. La meilleure structure comporte 44 couches.

4.2.8 Substrat de silicium cristallin

Nous avons ensuite lancé des optimisations sous conditions standards mais en utilisant un substrat de silicium cristallin plutôt qu'un substrat de silicium amorphe. Contrairement au cas où on met de l'argent, changer le substrat permet ici d'améliorer l'optimisation. En effet, la figure 4.24 montre que les valeurs des fonctions de coût sont en moyenne plus basses que celles obtenues avec un substrat de silicium amorphe. De plus, les fonctions de coût correspondant aux structures avec le plus grand nombre de couches ne sont pas plus élevées que celles ayant une dizaine de couches, ce qui est révélateur d'une optimisation fiable et efficace. La structure la plus efficace comporte 44 couches, nous allons comparer son allure et son spectre à la structure qui comporte 12 couches.

La structure à 12 couches et son spectre de réflexion sont montrés sur la figure 4.25. Nous retrouvons un magnifique cristal photonique, avec une bande interdite centrée dans l'infrarouge, et des couches adaptées de chaque côté du cristal photonique.

La structure à 44 couches et son spectre de réflexion sont montrés sur la figure 4.26. Nous retrouvons un cristal photonique avec des défauts, avec une large bande interdite centrée dans l'infrarouge, et des couches adaptées de chaque côté du cristal photonique.

Ces résultats sont similaires à ceux qui sont obtenus avec un substrat de silicium amorphe, mais sont encore meilleurs. La structure émerge quelle que soit la nature et l'épaisseur du substrat : qu'il s'agisse d'une couche suffisamment petite pour que des résonances apparaissent, ou qu'on soit en régime non résonant avec un silicium très épais et de meilleure qualité, c'est une structure basée sur un cristal photonique qui apparaît comme solution des optimisations.

Les résultats indiquent clairement qu'un miroir de Bragg avec des couches adaptées est une stratégie évidente pour réduire la réflexion du rayonnement solaire sur un appareil photovoltaïque. La structure émerge systématiquement quelles que soient les conditions. Même quand nous ne pouvons pas considérer que les algorithmes fournissent des résultats fiables (c'est-à-dire aussi efficaces que l'ARC simplifié), les résultats convergent dans cette direction, ils sont très similaires à l'ARC simplifié et présentent le même degré d'efficacité. On aurait pu attendre de l'optimisation une structure bien plus désordonnée. Pour des situations similaires,

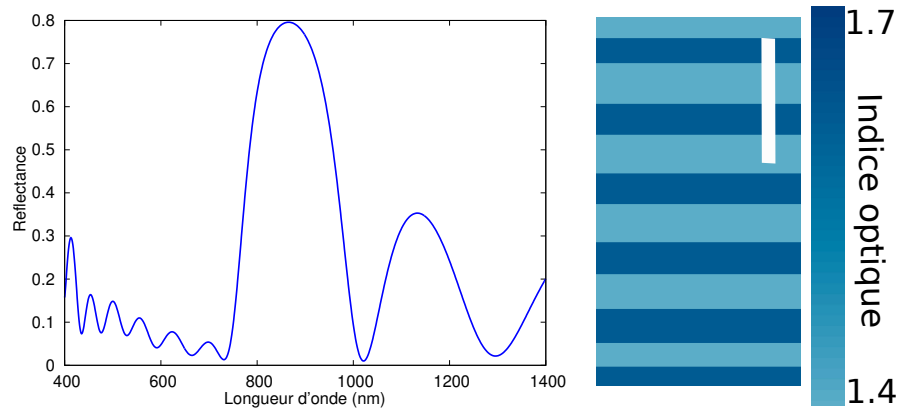


FIGURE 4.25 – Spectre de réflexion et représentation d'une structure avec 12 couches, lorsque la structure est sur un substrat de silicium cristallin. La ligne blanche représente 500nm.

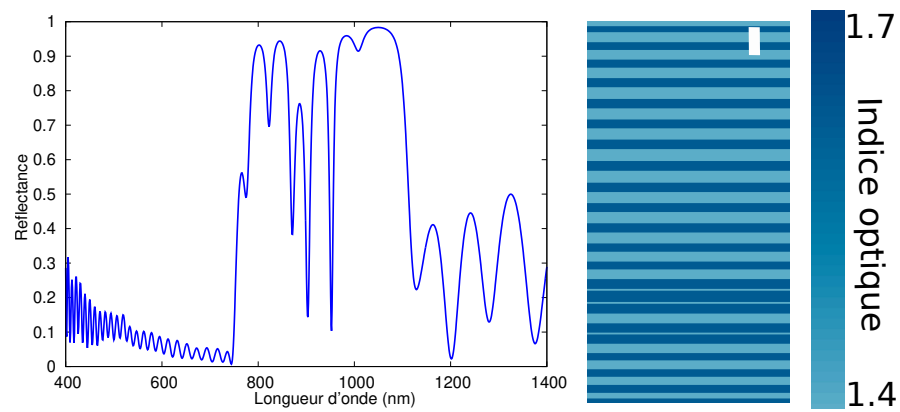


FIGURE 4.26 – Spectre de réflexion et représentation d'une structure avec 44 couches, lorsque la structure est sur un substrat de silicium cristallin. La ligne blanche représente 500nm.

introduire du désordre dans les structures a été une méthode prometteuse [157]. Même les structures naturelles qui surgissent dans la nature avec un ordre apparent, comme celles des ailes du papillon Morpho [133], contiennent une part de désordre corrélé [157]. Les structures obtenues pour le problème du photovoltaïque font également intervenir une sorte de désordre pour adapter le spectre AM1.5 même si c'est plus limité et que la structure ordonnée peut toujours être bien distinguée.

La stratégie suggérée ici par les optimisations est très similaire à celle qui est effectuée pour les miroirs de Bragg dans le but de réduire les oscillations du spectre de réflexion à l'extérieur de la bande interdite. Ces oscillations sont souvent associées à la réflexion dans la structure, provoquée par une trop grande différence de valeur d'indice de réfraction entre la structure elle-même et le milieu extérieur. L'amplitude de ces oscillations n'est pas modifiée en fonction du nombre de couches dans le cristal photonique, comme montré sur la figure 4.3. Nous avons donc suivi cette idée en essayant de retrouver le coefficient de réflexion du mode de Bloch à l'intérieur de la structure et de voir comment il est modifié par les couches adaptées.

4.3 Analyse physique détaillée de la structure

Cette partie de chapitre présente une analyse détaillée du fonctionnement physique de la structure optimisée, réalisée dans le but de comprendre pourquoi est-ce que l'ARC simplifié est une solution de l'optimisation.

Un miroir de Bragg, bien que constitué d'un empilement de plusieurs couches de matériaux différents, est usuellement considéré, de par sa périodicité, comme un milieu homogène dans lequel un mode de Bloch se propage. Quelques études [158, 159] ont été réalisées sur les coefficients de réflexion et de transmission du mode de Bloch contre les parois du miroir mais nous manquons de méthode théorique pour les calculer.

Nous allons présenter une méthode qui permet de retrouver ces coefficients de réflexion et de transmission, en utilisant un modèle de cavité et en optimisant les paramètres de la cavité pour qu'ils correspondent aux données disponibles de la structure ARC simplifiée, ce qui nous permettra de réaliser une étude détaillée de l'intégralité de la structure.

4.3.1 Le modèle de Fabry-Perot

Dans un miroir de Bragg infini, la lumière se propage comme dans un milieu homogène sous la forme d'un mode de Bloch, qui est un peu l'équivalent, pour le cristal, d'une onde plane pour un milieu homogène. Chaque mode de Bloch est caractérisé par un vecteur d'onde k_x dans la direction des interfaces entre les couches, imposé par l'angle d'incidence, et un vecteur d'onde perpendiculaire aux interfaces noté γ . Pour toute la suite du développement, on suppose que la structure est illuminée par une onde plane en incidence normale, donc $k_x = 0$ et la relation de dispersion peut s'écrire

$$\cos(\gamma d) = \cos(\phi_1)\cos(\phi_2) - \frac{\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1}}{2} \sin(\phi_1)\sin(\phi_2), \quad (4.3)$$

avec $d = d_1 + d_2$ la période du miroir de Bragg, γ_i le vecteur d'onde dans le milieu i d'indice n_i et d'épaisseur d_i , et $\phi_i = \gamma_i d_i$.

Dans la bande interdite du miroir de Bragg, γ est purement imaginaire, ce qui signifie que le mode de Bloch correspondant n'est pas propagatif. On pourra dire qu'il est Bloch-evanescent. Mais dans le domaine spectral qui nous intéresse, le visible, le vecteur d'onde est réel et le mode de Bloch correspondant propagatif.

Un miroir de Bragg avec un nombre fini de périodes, avec ou sans couches adaptées aux extrémités, sera considéré comme une cavité pour le mode de Bloch, avec un vecteur d'onde γ donné par la relation de dispersion du miroir de Bragg infini (l'équation 4.3). Le modèle de cavité Fabry-Pérot permet de définir le coefficient de réflexion r sur toute la structure, si le miroir de Bragg est d'épaisseur h , par les équations

$$r = r_0 + t_2 B, \quad (4.4)$$

$$A = t_1 + B r_{Bi}, \quad (4.5)$$

$$B = A r_{Bs} e^{2i\gamma h}, \quad (4.6)$$

avec A et B les amplitudes montantes et descendantes du mode de Bloch, r_0 le coefficient de réflexion de l'onde plane incidente sur la première couche du miroir de Bragg, t_1 et t_2 les coefficients de transmission entre l'air et le mode de Bloch, et r_{Bi} (respectivement r_{Bs}) le coefficient de réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air (respectivement, sur les couches adaptées au silicium). Tout le modèle avec les différents coefficients mentionnés est représenté sur la figure 4.27.

Le modèle de cavité mène à la formule de Fabry-Pérot pour déterminer le coefficient de réflexion de toute la structure :

$$r(\lambda, h) = r_0(\lambda) + \frac{t_1(\lambda)t_2(\lambda)r_{Bs}e^{2i\gamma(\lambda)h}}{1 - r_{Bi}(\lambda)r_{Bs}(\lambda)e^{2i\gamma(\lambda)h}}. \quad (4.7)$$

4.3.2 Réflexion à longueur donnée en fonction de l'épaisseur de la cavité

Nous n'avons accès au coefficient de réflexion r sur toute la structure que dans le cas où l'épaisseur de la cavité h est un multiple de la période d du miroir de Bragg. Il faut donc chercher les valeurs des coefficients r_0 , t_1 , t_2 , r_{Bi} et r_{Bs} qui permettent de retrouver les valeurs de réflexion r connues en une longueur d'onde donnée, pour des épaisseurs correspondant à un nombre entier de périodes d . Les valeurs pour lesquelles nous connaissons la réflexion sont représentées en rouge sur la figure 4.28, pour une longueur d'onde de 692 nm.

Une optimisation permet de déterminer les coefficients de la fonction qui permet de passer par tous les points connus de réflexion. Cette fonction, F_j , ne permet pas de retrouver l'ensemble des coefficients r_0 , t_1 , t_2 , r_{Bi} et r_{Bs} mais les coefficients c_i définis par

$$F_j = \left| c_0 + \frac{c_1 e^{2i\gamma h}}{1 - c_2 e^{2i\gamma j d}} \right|^2, \quad (4.8)$$

avec γ la relation de dispersion donnée par la relation 4.3, et j le nombre de périodes du miroir de Bragg considéré. Pour établir la correspondance entre les données réelles et le modèle, nous avons utilisé DE avec la fonction de coût, définie pour une longueur d'onde donnée, par

$$f = \sum_{j=2}^{50} |r_j r_j^* - F_j|^2, \quad (4.9)$$

où r est le coefficient de réflexion de toute la structure, calculée en utilisant le formalisme des admittances décrit dans l'annexe .

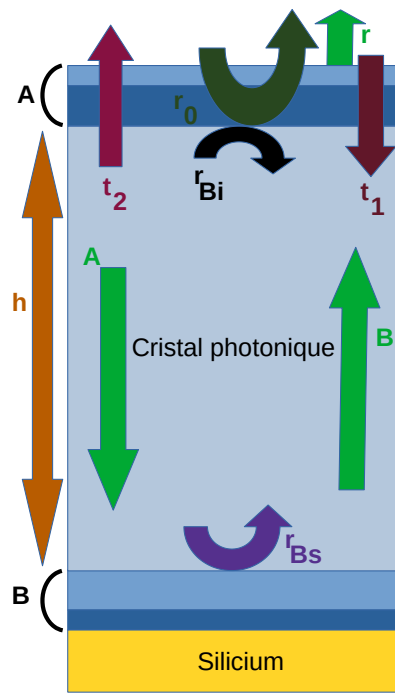


FIGURE 4.27 – Modèle de cavité pour la structure de référence. A : couches adaptées à l'air. B : couches adaptées au silicium. r_{Bi} : coefficient de réflexion du mode de Bloch sur le bas des couches adaptées à l'air. r_{Bs} : coefficient de réflexion du mode de Bloch sur le haut des couches adaptées au silicium. t_1 : coefficient de transmission de l'onde incidente vers le mode de Bloch. t_2 : coefficient de transmission du mode de Bloch vers l'onde plane dans le milieu incident. r_0 : coefficient de réflexion de l'onde plane incidente sur la première couche du cristal photonique.

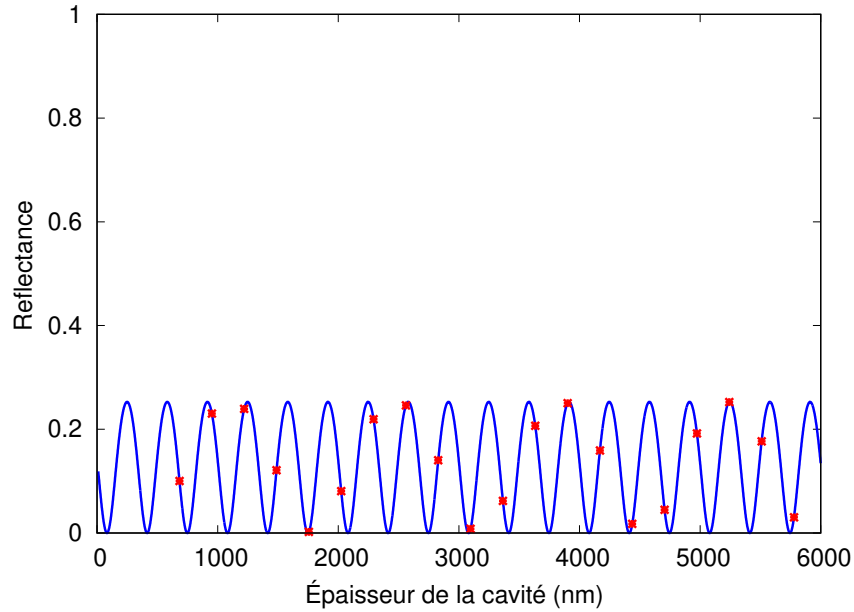


FIGURE 4.28 – Réflexion obtenue à 692nm pour différentes épaisseurs d'un cristal photonique symétrique terminé par des couches d'indice bas et avec de l'air de chaque côté (croix rouges) et son *fit* par une formule de Fabry-Perot (courbe bleue).

Une seule optimisation est en général suffisante pour déterminer de façon satisfaisante les coefficients c_i , comme montrés sur la figure 4.28. Il est frappant de constater que la périodicité du modèle, imposée par le vecteur d'onde γ et visible en bleu sur la figure 4.28, est différent de l'apparente périodicité des données visible en rouge. Cela illustre en quoi la détermination des paramètres du modèle F_j , et par extension de la réflexion $r(\lambda, h)$ pour une épaisseur h arbitraire est difficile.

4.3.3 Retrouver les paramètres du modèle

Le modèle permet de retrouver les coefficients internes c_2 seulement dans le cas d'une structure symétrique. En général c_2 est le produit $r_{Bi}r_{Bs}$ et la détermination de chacun de ces deux coefficients n'est par conséquent pas triviale, sauf si la structure considérée est symétrique puisque $r_{Bi} = r_{Bs} = r_B$. L'ARC simplifié que nous étudions n'est cependant pas une structure symétrique.

En déterminant avec précision les coefficients r_{Bi} et r_{Bs} dans le cas de structures symétriques, il est possible de déduire ces mêmes coefficients pour une structure asymétrique. L'ensemble des structures utilisées pour la détermination précises des coefficients est présenté sur la figure 4.29. La structure d'intérêt est la structure (a), asymétrique.

Les structures symétriques (f) et (h) nous permettent respectivement de calculer r_{Bi} et r_{Bs} de la structure asymétrique (g), qui fait apparaître les deux coefficients. Nous avons vérifié que le produit des deux r_B déterminés avec les structures symétriques permettait bien de retrouver le coefficient c_2 de la structure (g) asymétrique, comme montré sur la figure 4.30. Nous avons effectué ces vérifications pour chacune des structures présentées sur la figure 4.29 pour lesquelles c'est possible.

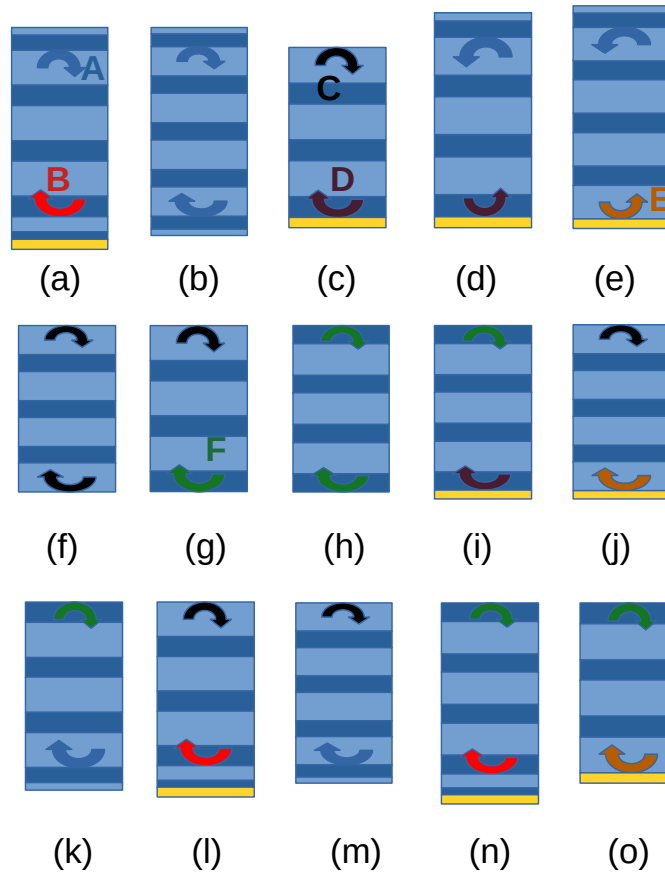


FIGURE 4.29 – Représentation de toutes les structures étudiées. Chaque flèche courbée représente un coefficient de réflexion du mode de Bloch, du cristal photonique vers un milieu externe. La structure d'intérêt est celle représentée en (a). Les autres structures servent à étudier le comportement du mode de Bloch en fonction des milieux externes, et de comprendre pourquoi la structure (a) est une solution de l'optimisation de couche anti-reflet pour le photovoltaïque. Une couche jaune représente un substrat de silicium.

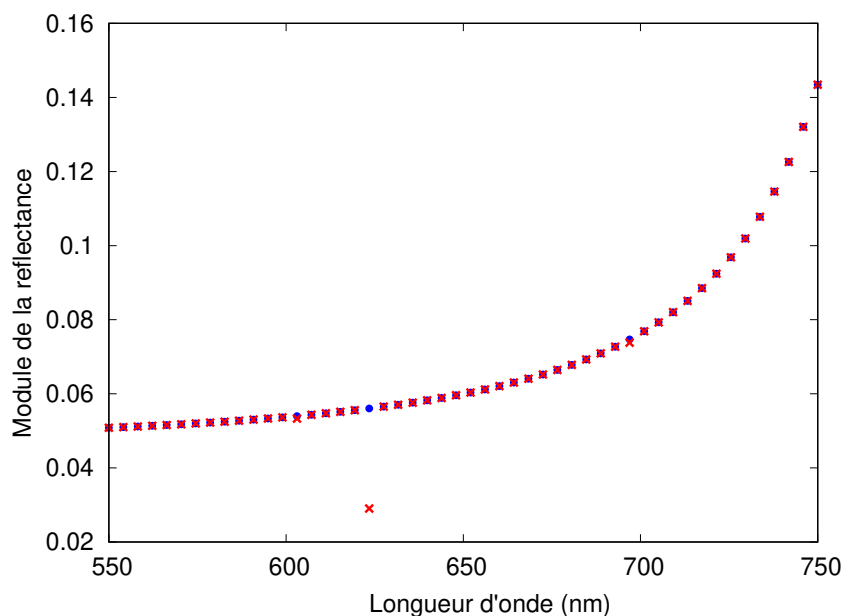


FIGURE 4.30 – Comparaison des modules du paramètre c_2 pour le cas asymétrique (g) (points rouges) avec le produit des coefficients de réflexion du mode de Bloch retrouvés en utilisant les cas symétriques (f) et (h) (points bleus). Le point clairement en dehors de la courbe correspond à une optimisation échouée.

Une fois tous les coefficients de toutes les structures déterminés, nous avons pu effectuer une vérification de la pertinence de la méthode en comparant les coefficients qui devraient être identiques d'une structure à l'autre, mais qui ont été déterminés par des optimisations différentes. La figure 4.31 présente par exemple l'ensemble des coefficients de réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air, déterminés par l'optimisation du modèle en se basant sur les structures (b), (m) et (k). Nous constatons que les coefficients sont bien identiques d'une structure à l'autre, ce qui indique que la détermination des coefficients est réussie.

De même, nous avons vérifié la cohérence de la détermination des autres paramètres du modèle de cavité. La figure 4.32 illustre la cohérence de la détermination du coefficient de réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées au silicium, en utilisant les structures (l), (n) et (a).

Enfin, nous avons vérifié que la détermination du coefficient de réflexion du mode de Bloch dans le cas d'une structure symétrique constituée uniquement d'un miroir de Bragg, donc sans couches adaptées, était cohérente. Nous avons pour cela comparé les modules et les phases de ce coefficient en fonction de l'indice de la première couche du miroir de Bragg, symétrique. Le résultat est visible sur la figure 4.33 et montre que les modules sont les mêmes dans les deux cas, et que les phases sont opposées, ce qui est bien ce qu'on attend.

4.3.4 Étude de l'influence des couches adaptées sur le coefficient de réflexion du mode de Bloch dans la cavité Fabry-Pérot

Maintenant que nous avons accès au coefficient de réflexion du mode de Bloch dans la structure, on peut comparer la réponse de la structure lorsque le miroir de Bragg est terminé

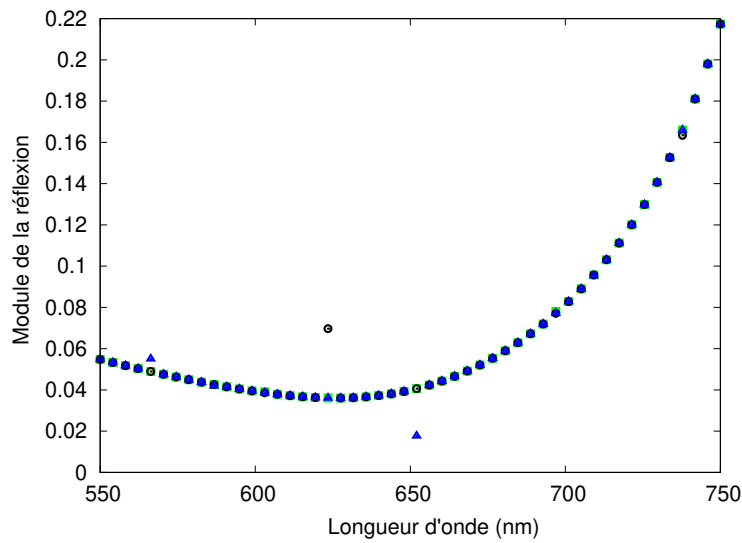


FIGURE 4.31 – Module du coefficient de réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air. Triangles bleus : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air donnée par la structure (b). Cercles noirs : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air donnée par la structure (m). Carrés verts : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées à l'air donnée par la structure (k).

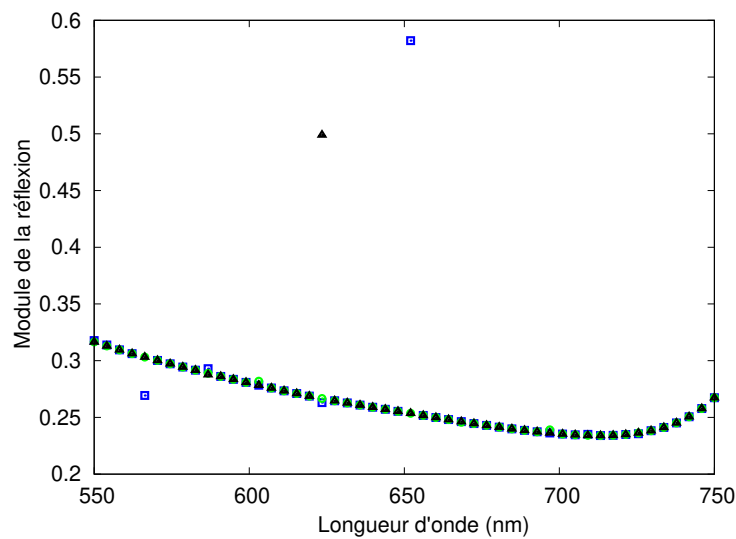


FIGURE 4.32 – Module du coefficient de réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées au silicium. Triangles noirs : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées au silicium donnée par la structure (l). Cercles verts : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées au silicium donnée par la structure (n). Carrés bleus : réflexion du mode de Bloch sur les couches adaptées au silicium donnée par la structure (a).

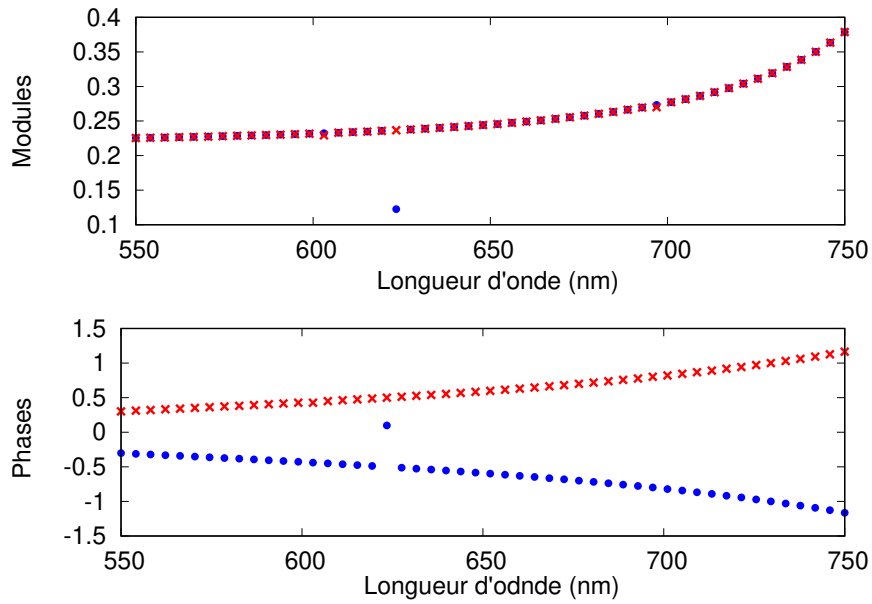


FIGURE 4.33 – Comparaison des modules (en haut) et des phases (en bas) du coefficient de réflexion du mode de Bloch dans un cristal photonique symétrique commençant par une couche d'indice bas (points bleus) et commençant par une couche d'indice élevé (croix rouges).

abruptement ou que des couches d'adaptation aux milieux externes sont ajoutées.

La figure 4.34 permet de comparer le coefficient de réflexion interne du mode de Bloch lorsque la structure est constituée d'un miroir de Bragg uniquement ou que des couches adaptées à l'air ou au silicium sont ajoutées. Dans les deux cas le rôle des couches adaptées apparaît clairement : le module de la réflexion est significativement réduit lorsque les couches adaptées sont présentes, particulièrement entre le miroir de Bragg et l'air. Cette constatation renforce l'idée que les couches adaptées permettent de réduire le décalage d'impédance entre l'air et le miroir de Bragg, ce qui réduit le coefficient de réflexion interne et finalement les oscillations de réflexion.

Le miroir de Bragg de la structure générée par optimisation peut finalement être considéré comme un milieu tampon. Comme il est difficile de réduire directement le décalage d'impédance entre l'air et le silicium, car il est très important, l'algorithme génère un milieu tampon intermédiaire qui présente un décalage d'impédance moindre – entre l'air et le miroir d'un côté et entre le miroir et le silicium de l'autre.

Les couches anti-reflets avec un indice de réfraction qui augmente graduellement peuvent être très efficaces, mais ces structures demandent un grand nombre de matériaux – autant que ce qu'on a d'indice de réfraction différents. Le miroir de Bragg avec des couches adaptées aux extrémités émerge car, pour un nombre limité d'indices de réfraction, une meilleure solution est de minimiser le décalage d'impédance entre l'air et le miroir de Bragg, puis entre le miroir de Bragg et le silicium, qui sont respectivement des décalages d'impédance moindre par rapport à celui entre l'air et le silicium. Le rôle du miroir de Bragg est ainsi de supporter le mode de Bloch, caractérisé par un indice de réfraction effectif, et de servir de tampon intermédiaire. C'est la raison pour laquelle, quand le nombre de couches augmente, l'algorithme tend à simplement ajouter des périodes dans le miroir de Bragg.

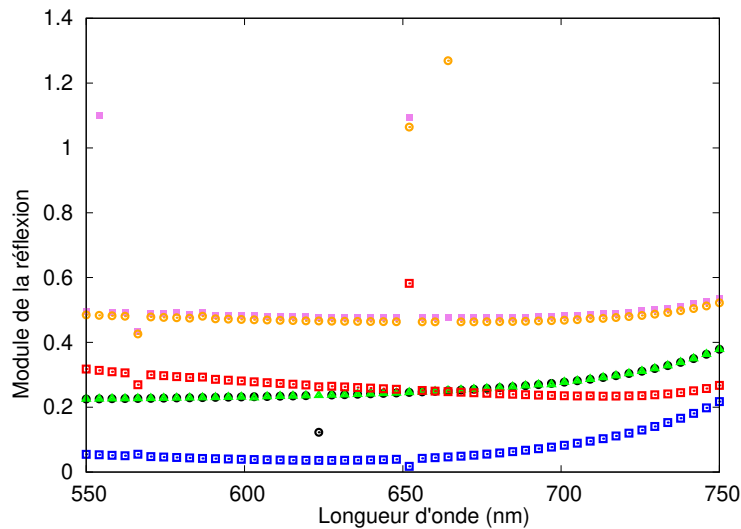


FIGURE 4.34 – Coefficient de réflexion du mode de Bloch pour un miroir de Bragg simple (i) commençant par une couche d'indice élevé (triangles verts), (ii) commençant par une couche d'indice bas (cercles noirs), (iii) ayant des couches adaptées à l'air de chaque côté (carrés bleus), (iv) terminant par des couches adaptées au silicium (carrés rouges), (v) terminant par une couche d'indice élevé (carrés roses), ou (vi) terminant par une couche d'indice bas (cercles oranges). Clairement, les couches adaptées à l'air ou au silicium réduisent la réflexion du mode de Bloch.

Cette interprétation est renforcée quand on étudie le comportement de r_0 , le coefficient de réflexion de la lumière incidente sur la structure. Si nous comparons les coefficients r_0 obtenus pour les structures avec et sans les couches adaptées, on constate une réduction du coefficient r_0 d'un facteur 4 ou 5, ce qui est complètement cohérent avec l'idée d'une réduction du décalage d'impédance entre l'air et le miroir de Bragg. Ces résultats sont présentés sur la figure 4.35.

4.4 Fabrication

Finalement, nous avons vérifié si la structure optimisée pouvait être facilement fabriquée avec une technique facilement utilisable à grande échelle dans l'industrie et maîtrisée par des collègues de l'ICCF (Institut de Chimie de Clermont-Ferrand) et qui se sont chargés de la fabrication, la caractérisation ayant été menée à l'Institut Pascal dans l'équipe de spectroscopie. Les détails spécifiques de fabrication sont présentés dans l'article [155]. Les résultats présentés dans ce chapitre montrent que le mécanisme physique qui explique l'efficacité de l'ARC se produisent dès que 6 couches constituent la structure. Deux structures avec un faible nombre de couches ont été fabriquées, l'une avec 6 couches (donc une seule période du miroir de Bragg) et la deuxième avec 8 couches donc un miroir de Bragg qui comporte deux périodes.

Les mesures de réflexion des structures fabriquées, à température ambiante, sont cohérentes avec les simulations, comme le montre la figure 4.36. On retrouve une zone de haute réflexion correspondant au cristal photonique et une zone de basse réflexion dans le domaine spectral visible, comme dans les simulations. Des imperfections dans le procédé de fabrication sont probables, ce qui peut expliquer la différence entre les spectres attendus et ceux obtenus expérimentalement. Le comportement général des structures est cependant convaincant. Ces résultats montrent que

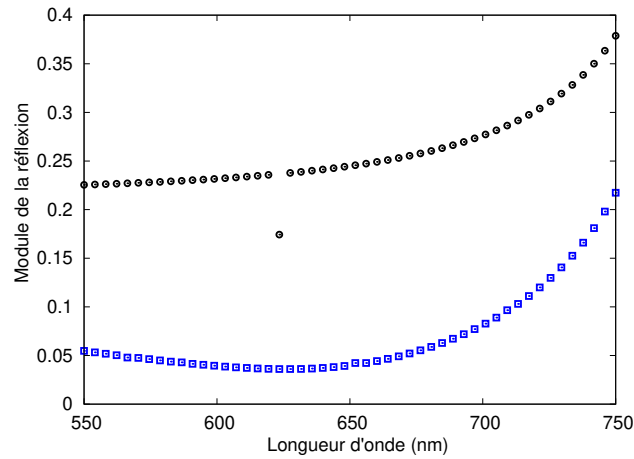


FIGURE 4.35 – Influence des couches adaptées au milieu externe sur le coefficient r_0 . La réflexion est atténuée lorsque les couches adaptées sont présentes (courbe bleue) par rapport à quand elles sont absentes (courbe noire).

l'ARC proposé par l'optimisation est facile à fabriquer avec des techniques modernes, peu chères et compatibles avec l'industrie.

4.5 Conclusion

On a montré dans ce chapitre que Differential Evolution, un algorithme évolutionnaire, propose comme couches antireflets pour une structure photovoltaïque un cristal photonique avec des couches adaptées. Ce type de structure, extrêmement modulaire, n'est pas nécessairement optimal, mais elles émergent dans un grand nombre de cas et on peut donc les qualifier de robustes. Alors que cette approche rappelle les stratégies de réduction d'oscillations de réflexion qui sont connues depuis très longtemps [153], les travaux présentés dans ce chapitre suggèrent que ce type de structures doit être l'objet de plus d'attention. Des structures comportant des cristaux photoniques pour lesquels l'intérêt se situe en dehors de la bande interdite, comme l'ARC étudié ici, ne sont pas si communes[160].

La lumière se propage dans des cristaux photoniques sous la forme de modes de Bloch. Depuis leur invention, les miroirs de Bragg sont compris comme des cavités pour ces modes de Bloch, et l'oscillation de réflexion en dehors de la bande interdite du miroir de Bragg est interprétée comme une signature des résonances de cavité. Nous avons présenté dans ce chapitre une méthodologie pour retrouver les coefficients internes de réflexion du mode de Bloch, des quantités qui ne peuvent pas être calculées analytiquement. L'étude a confirmé que les couches externes de l'ARC optimisé réduit le décalage d'impédance entre les milieux extérieurs et le cristal photonique. La partie périodique de la structure peut être interprétée comme un tampon pour la lumière. La stratégie est robuste, puisqu'il suffit de modifier les couches externes quand le milieu externe ou le contraste d'indice change, ce qui explique pourquoi la structure émerge aussi facilement. Ici, l'analyse physique apporte une confiance élevée dans le procédé d'optimisation. L'analyse physique est un outil puissant qui nous permet de facilement deviner si une structure est sous-optimale ou pour comprendre plus précisément pourquoi elle émerge, et même pour guider de futures optimisations [161, 162]. En conséquence, le résultat d'une

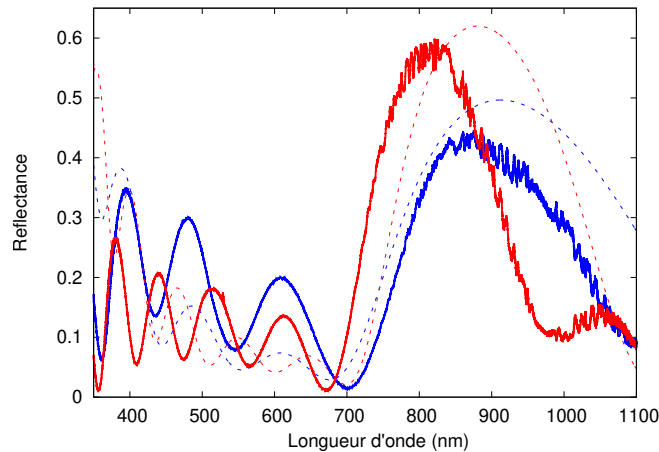


FIGURE 4.36 – Résultats expérimentaux des mesures de réflexion obtenus pour des structures avec 6 couches (courbe bleue continue) et 8 couches (courbe rouge continue) et courbes attendues en théorie (courbes discontinues).

optimisation devrait toujours être discuté et analysé physiquement, ce qui est rarement le cas actuellement [78, 90]. Finalement, nous avons montré que ces structures peuvent être facilement fabriquées.

C'est parce que les structures optimisées sont modulaires – on peut attribuer des rôles particuliers à des sous-parties de la structure – que nous pouvons en comprendre le fonctionnement. La régularité d'une structure – une périodicité, ou une évolution constante et lente d'un des paramètres – est souvent un signe que la structure est proche d'être optimale[78, 147, 156] et qu'elle peut être utilisée comme une vraie source d'inspiration pour orienter la conception de nouvelles structures photoniques. Peu de méthodes d'optimisation ont mené par le passé à des structures régulières, le travail présenté ici est donc l'un des premiers exemples d'analyse physique *a posteriori* d'une structure optimisée. Les résultats présentés dans ce chapitre montrent qu'utiliser DE pour générer des structures photoniques modulaires et d'intérêt technologique est prometteur, et que la méthode d'optimisation mérite d'être exploitée plus largement.

Il faut noter que nous avons obtenu une structure de référence qui respecte les trois critères de satisfaction auxquels il faut être attentifs : la structure est (i) robuste puisqu'elle apparaît fréquemment comme résultat de l'optimisation, (ii) régulière et en grande partie périodique, et (iii) nous sommes capables de comprendre son fonctionnement physique et nous pouvons ainsi voir à quel point elle est modulaire¹.

Ces travaux ont été publiés dans Physical Review B[163]. Il ne reste plus qu'à vérifier si notre méthode d'optimisation est applicable à d'autres dispositifs optiques, ce qui sera l'objet du prochain chapitre.

1. Nous n'irons pas jusqu'à parler de "machine à invention", mais nous sommes quand même très contents de nous et confiants quant au potentiel de notre méthode d'optimisation.

Application à des problèmes pratique de photonique

Aucun savoir ne peut être acquis s'il n'est pas désiré, aucun progrès ne peut être réalisé s'il n'est pas souhaité et le meilleur des maîtres ne peut rien pour l'apprenti passif.

Le Pacte des Marchombres, La Prophétie
Pierre Bottero

Nous avons pu voir à travers les chapitres précédents que DE est un algorithme très efficace pour générer des structures satisfaisantes, à partir du moment où nous l'utilisons dans le bon domaine de fonctionnement, avec un nombre de paramètres assez grand pour pouvoir décrire des structures périodiques ou régulières, mais suffisamment petit pour que les algorithmes soient efficaces. Nous avons voulu voir si d'autres problèmes peuvent bénéficier de cette approche, que l'on ait une idée de la solution potentielle ou pas. Nous avons exploré différentes directions que nous présentons dans ce chapitre, divisé en deux parties. La première partie concerne l'optimisation d'un coupleur à plasmon de surface, qui a été effectuée en collaboration avec l'institut FEMTO-ST de Besançon. Nous nous intéressons ensuite à l'optimisation de divers composants optiques qui nous ont semblé être des applications intéressantes, l'idée étant toujours d'explorer le potentiel de DE.

5.1 Coupleur à plasmon de surface

La collaboration avec l'institut FEMTO-ST s'est mise en place lorsque Vage Karakhanyan, un doctorant de Thierry Grosjean, est venu passer deux semaines dans notre équipe pour se former à notre technique d'optimisation, et l'adapter à ses coupleurs à plasmon de surface. Nous lui avons donc présenté DE et les problèmes sur lesquels nous l'avons testé. Nous avons conseillé Vage sur l'utilisation de DE par rapport au problème qu'il souhaitait résoudre, nous lui avons fourni nos codes d'optimisations, Moosh et nos codes avec les admittances et l'avons laissé explorer. Un article a été soumis sur le sujet, et dans cette première partie de chapitre, nous allons exposer les résultats qu'il contient.

5.1.1 Intérêt du problème

L'une des applications les plus prometteuses de la plasmonique est la réalisation de capteurs basés sur la détection des résonances de plasmons de surface[164, 165]. Pour dépasser certaines de leurs limites[166], des dispositifs basés sur des plasmons de surface se propageant à la surface d'une fine couche métallique adossée à un cristal photonique ont été conçus et testés[167]. De telles structures permettent à l'onde de surface de se propager beaucoup plus loin que tout autre dispositif[168, 169]. L'augmentation de la longueur de propagation du mode de surface conduit en fait à une amélioration de la sensibilité du dispositif[170], justifiant ainsi les efforts consacrés à l'optimisation de la structure[171] – basée sur une analyse physique remarquablement poussée.

L'objectif des travaux présentés ici est d'utiliser DE pour optimiser une structure multicouches dans le but de maximiser la longueur de propagation du plasmon de surface dans la couche métallique, et de comparer les structures optimisées grâce à DE à des structures de référence construites par analyse physique des multicouches[171].

5.1.2 Paramètres d'optimisation

Un faisceau incident est envoyé par le bas à travers un substrat transparent d'indice de réfraction de $n = 1,513$. Au-dessus du substrat, une structure multicouches de 29 couches est placée. La structure est ensuite recouverte d'une fine couche de palladium (d'indice de réfraction $n = 1.9 + 4.8i$ et d'épaisseur $d_M = 8 \text{ nm}$). Le superstrat est de l'air, avec un indice de 1,0003. La longueur d'onde est de $\lambda = 740,2 \text{ nm}$ et nous considérons une lumière incidente en polarisation TM avec un angle d'incidence de $41,4134^\circ$. Tous ces paramètres sont identiques à ceux choisis par Konopsky[167] pour pouvoir évaluer si nos résultats sont similaires.

L'objectif de l'optimisation est de maximiser la distance de propagation du plasmon de surface dans la couche de palladium mais le calcul de cette distance peut être particulièrement coûteux. La fonction de coût correspond simplement à la reflectance à la longueur d'onde de travail et à l'angle d'incidence, puisque minimiser le coefficient de réflexion revient à maximiser le couplage au mode de surface, donc l'intensité loin du faisceau incident et enfin la longueur de propagation.

Afin de rendre le calcul de la fonction de coût aussi rapide que possible, c'est la méthode des impédances ou des admittances qui a été utilisée pour calculer la réflectance[137, 171]. Comme précisé dans le chapitre 2, ces résultats ont été comparés à ceux fournis par une méthode de matrice de diffusion[172], connue pour être particulièrement stable numériquement mais plus coûteuse en temps de calcul. Nous avons utilisé le programme Moosh basé sur cette dernière méthode et librement disponible[138] pour calculer les cartes de champs présentées ici, nous permettant de vérifier que la longueur de propagation du plasmon de surface a bien été maximisée dans le processus.

Nous avons utilisé DE et comme l'algorithme est non déterministe, nous avons comme d'habitude effectué plusieurs fois l'optimisation à partir d'une population initiale différente à chaque fois.

5.1.3 Résultats

Nous avons dans un premier temps optimisé à la fois les épaisseurs (dans un intervalle entre 50 et 500 nm) et les indices de réfraction (dans un intervalle de 1.455 à 2.079) de chacune des 29 couches de la structure, ce qui implique une optimisation de 58 paramètres.

Nous avons effectué 20 optimisations et nous avons trié les résultats en fonction des meilleures fonctions de coût obtenues à l'issue de chacune des 20 simulations, les optimisations les moins

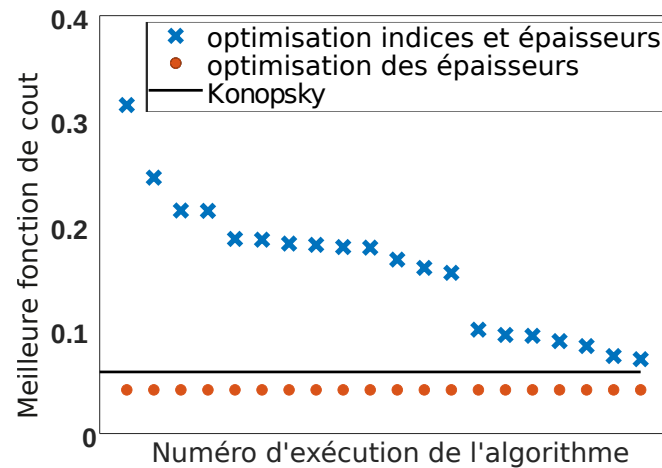


FIGURE 5.1 – Valeurs des meilleures fonctions de coût obtenues pour chaque exécution de DE. Les meilleures valeurs sont à droite, les pires à gauche. Les croix bleues correspondent à l'optimisation des indices de réfraction et des épaisseurs des couches, les points oranges à l'optimisation des épaisseurs uniquement. La ligne noire représente la valeur de la réflexion de la structure proposée par Konopsky basé sur une analyse physique[171]. Alors que DE ne parvient pas à trouver la meilleure solution lorsque les indices varient, il obtient des résultats très convaincants quand les indices sont imposés.

efficaces générant des fonctions de coût finales plus élevées. Les résultats sont visibles graphiquement sur la figure 5.1 en bleu. Les meilleurs résultats atteignent une valeur de la fonction de coût (et donc de la réflectance) légèrement inférieure à 0.1. Le problème est trop difficile pour obtenir des résultats parfaitement fiables, comme en témoigne l'allure de la courbe bleue. Le meilleur résultat obtenu est un coup de chance, il n'est obtenu qu'une seule fois sur les 20 optimisations. Les indices de réfraction alternent entre les valeurs les plus extrêmes autorisées. Ceci est similaire à ce que l'on peut généralement observer pour les filtres optiques : l'utilisation du plus grand contraste d'indice de réfraction autorisé est dans une écrasante majorité des cas le meilleur choix[137, 36]. Dans le contexte de l'optimisation, cela signifie que les meilleures solutions se trouvent sur les bords du domaine d'optimisation. Cela rend le problème beaucoup plus difficile pour tout algorithme d'optimisation car ils ont tendance à générer des solutions qui ne sont pas dans les limites autorisées et qui doivent être rejetées. Nous soulignons que l'utilisation d'un contraste maximal est un choix évident pour les filtres optiques, mais qu'ici, dans le cadre de l'excitation d'un plasmon de surface, un tel choix n'est pas aussi évident.

Convaincus qu'avoir un contraste d'indice maximal est un bon choix, nous avons ensuite effectué des optimisations en imposant ce contraste d'indice maximal et en optimisant uniquement les épaisseurs des couches. Cela permet de n'avoir que 29 paramètres d'optimisation au lieu de 58, ce qui rend le problème beaucoup plus simple pour l'algorithme. On constate à partir de la figure 5.1 que DE trouve la même solution pour toutes les exécutions. Cela suggère que la solution est vraiment évidente à trouver, comme on peut en fait s'y attendre à partir de l'analyse physique[171]. Les valeurs de la fonction de coût sont dans ce cas nettement plus faibles que dans le cas où les indices sont optimisés, et la structure-solution dépasse les performances de la structure de référence proposée par Konopsky[171].

Il est facile de reconnaître dans la structure optimisée présentée dans la figure 5.2b un cristal photonique parfait pour les 28 premières couches, et une couche d'adaptation d'impédance pour

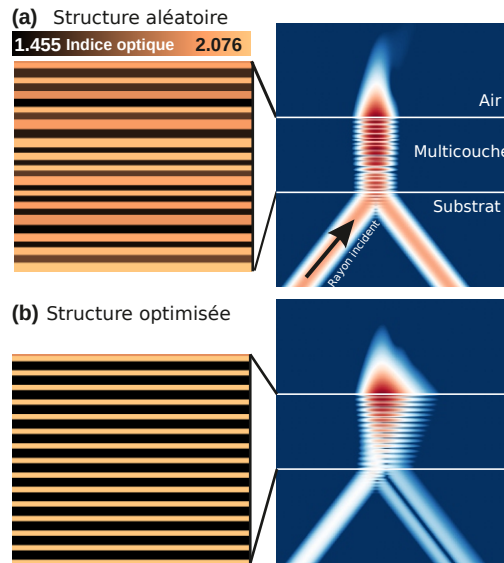


FIGURE 5.2 – Représentation des structures (gauche) et leurs cartes de champ (droite) pour une structure aléatoire (haut) et la structure optimisée (bas).

la couche en contact avec le métal, exactement comme le propose Konopsky[171]. Cela donne une interprétation immédiate du rôle de chaque couche et valide complètement l'approche physique.

Afin de valider que la longueur de propagation du plasmon de surface est réellement optimisée par notre procédure avec une fonction de coût simplifiée, nous avons calculé la longueur de propagation typique à la surface du métal. Nous obtenons une longueur de propagation typique de 0,363 mm pour la structure d'origine[171] et de 0,388 mm pour notre structure multicouches optimisée.

Nous avons ainsi, avec ces résultats, prouvé une fois de plus que DE est capable de générer une structure modulaire, relativement similaire à celle présentée dans le chapitre 4, mais pour un problème tout à fait différent : nous nous intéressons ici à l'optimisation d'un coupleur à plasmon de surface et pas du tout à un anti-reflet pour du photovoltaïque[163]. Nous trouvons dans les deux cas une structure constituée d'un cristal photonique auquel on ajoute une ou plusieurs couches d'adaptation d'impédance. Il est particulièrement satisfaisant de constater que notre méthode d'optimisation, adoptée par d'autres équipes, permet de générer des structures convaincantes et que nous ne sommes plus les seuls à en constater le potentiel et l'intérêt.

5.2 Optimisation de divers composants optiques

Pour explorer le potentiel de DE à générer diverses structures photoniques, nous avons choisi deux problèmes optiques que nous détaillons dans la suite de ce chapitre. Le premier problème consiste à guider un mode entre deux guides d'onde de largeurs différentes, et le deuxième problème consiste à séparer deux polarisations dans deux guides d'onde différents à partir d'un seul guide d'onde qui porte les deux polarisations.

5.2.1 Guide d'onde en transmission

Paramètres d'optimisation

Les travaux présentés dans cette partie sont de l'optique guidée. Nous considérons une structure 2D invariante dans la direction perpendiculaire au plan dans lequel nous travaillons. Les structures considérées sont des guides de silicium (d'indice 3.48) noyés dans du SiO_2 (d'indice 1.46), de largeurs différentes. Grâce à la RCWA, on peut étudier comment les différents modes de chaque portion de guide sont excités, et comment chaque changement de largeur de guide (le passage d'un segment de guide à un autre) peut mener à des réflexions internes.

Nous utilisons une méthode modale de Fourier (RCWA) pour calculer les coefficients de réflexion et de transmission de chacun des modes guidés dans les différentes portions de guides d'onde[11, 10]. Notre structure est en réalité parfaitement périodique, ce qui est dû à la méthode elle-même. Notre objectif est cependant de n'étudier le comportement que d'une seule période. Il faut s'assurer que les différentes périodes n'interagissent pas entre elles. Une solution évidente serait de mettre des Perfect Matching Layers (PML). Cependant, les résultats des optimisations dans ce cas font apparaître des modes dans les PML, qui sont des artefacts numériques mais que les algorithmes d'optimisation détectent parce qu'ils peuvent donner des valeurs très basses de la fonction de coût, n'étant pas physique. Nous avons donc dû renoncer aux PML et choisir une période suffisamment grande.

Les dispositifs que nous étudions sont des successions de portions de guide d'onde de largeur et de longueur différentes, et donc, d'un point de vue simulation, de blocs de silicium dans de l'oxyde de silicium, placés les uns au dessus des autres. Le problème que nous nous posons est celui de minimiser la réflexion globale du mode fondamental lorsqu'on passe d'un guide d'onde fin de largeur $w_1 = 120$ nm à un guide d'onde de largeur $w_2 = 450$ nm. On veut savoir si il existe une succession de guides d'ondes qui permettent de maximiser la transmission.

La fonction de coût prend alors la forme

$$cf_1 = 1 - T$$

avec T le coefficient de transmission en amplitude à l'entrée du guide de sortie. La longueur d'onde de travail est $\lambda_0 = 1550$ nm et on se place en polarisation TE.

On caractérise chaque portion de guide par sa largeur et sa longueur et on considère qu'elles sont toutes centrées. Une structure constituée de 4 portions de guide est donc un problème contenant 8 variables à optimiser : les longueurs de chacune des portions et leurs largeurs. Les longueurs peuvent être choisies entre 20 et 500 nm, et les largeurs peuvent varier de 30 à 600 nm. 50 optimisations sont effectuées.

Résultats

Sur les 50 exécutions de l'algorithme, nous obtenons plus de 40 fois la même valeur de fonction de coût suite au procédé d'optimisation, comme représenté sur la figure 5.3.

En regardant de plus près chacun des résultats, nous constatons cependant qu'il n'existe pas qu'une seule structure permettant d'obtenir la fonction de coût la plus faible trouvée, mais deux. La première structure, qui revient le plus souvent, est une structure que l'on pourrait qualifier de résonante car elle est constituée d'une alternance de sections fines et de sections plus larges. Une représentation d'une telle structure ainsi que sa carte de champ sont présentées sur la figure 5.4. Nous constatons qu'une résonance se produit dans la troisième section de la structure. Le deuxième type de structure n'est pas résonant : nous pouvons constater sur la figure 5.5 qu'il s'agit d'une structure pour laquelle chacune des portions de Si est de plus en plus large au fur et

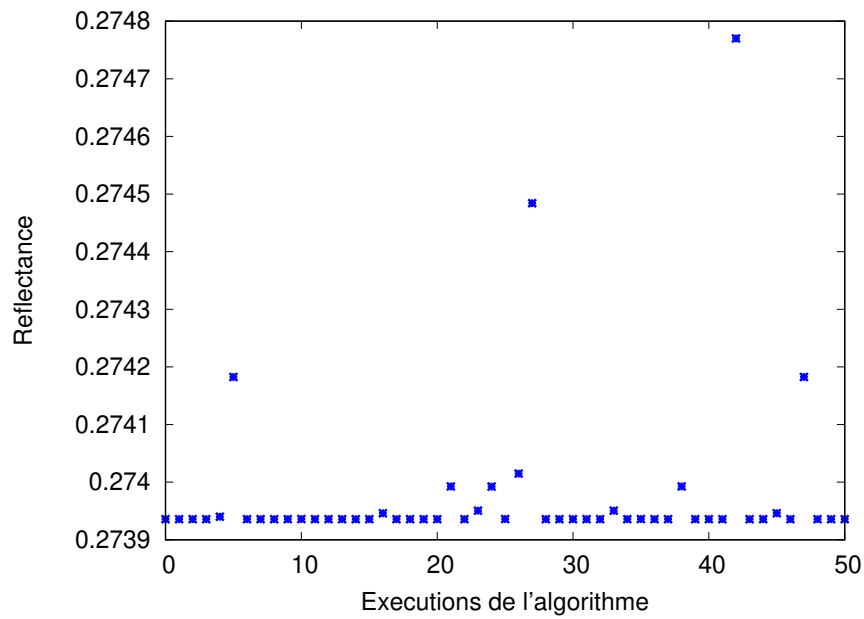


FIGURE 5.3 – Les 50 fonctions de coût des 50 structures optimisées dans le cas du guide d'onde divisé en 4 portions. La majorité des résultats sont similaires ce qui montre ici non pas que la solution est toujours la même, mais qu'il y a une limite physique à la valeur de la fonction de coût. Chaque point correspond à la meilleure structure trouvée grâce à une optimisation complète pour laquelle l'algorithme a convergé.

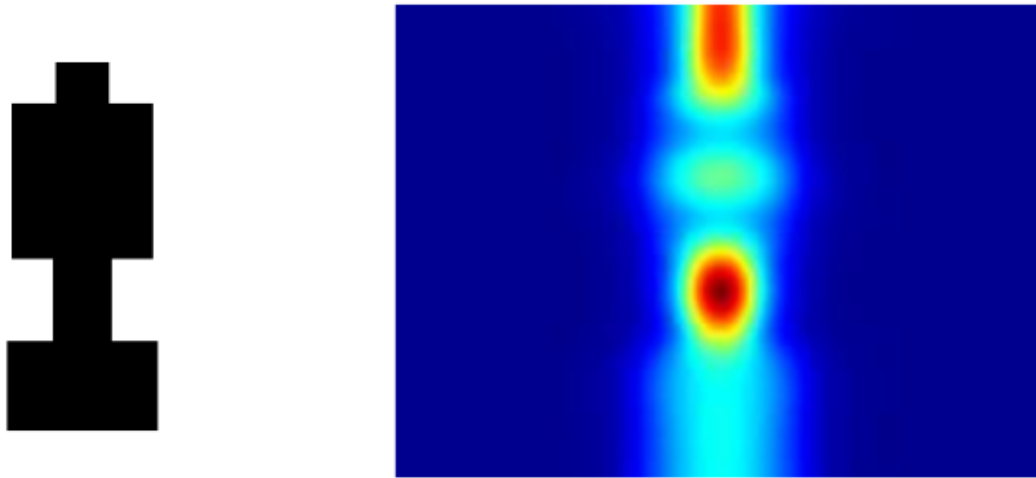


FIGURE 5.4 – Représentation de la structure résonante optimisée (gauche) et sa carte de champ (droite). L'épaisseur totale de la structure est de 1063 nm. La fonction de coût vaut 0.27394.

à mesure que l'on se rapproche du guide d'onde de sortie. Cette structure est plus grande que la précédente. On observe sur la carte de champs que la lumière est guidée et ne résonne pas dans la structure, contrairement à la première structure présentée. Les deux structures possèdent exactement les mêmes caractéristiques optiques et ont la même valeur de fonction de coût de 0.27394.

Nous avons ensuite augmenté le nombre de portions dans la structure, en passant à une structure constituée de 10 portions mais en conservant tous les autres paramètres d'optimisation, notamment afin de savoir si là aussi nous allons observer l'émergence de deux types de structures, l'une résonante et l'autre guidée, présentant les mêmes propriétés optiques.

Les 50 optimisations ont systématiquement abouti à la même valeur de la fonction de coût, d'une valeur de 0.27394 également. Les structures sont loin d'être toutes identiques cependant, ce qui montre qu'une multitude de possibilités existent pour répondre à notre problème. L'une des structures qui émergent le plus souvent est présentée sur la figure 5.6. Ses propriétés optiques ne diffèrent pas des meilleures structures obtenues avec 4 portions et on y reconnaît des caractéristiques à la fois de la structure résonante (il y a de façon évidente une cavité), mais aussi de la structure progressive, sur la partie basse de la structure.

Il semble donc que la fonction de coût plafonne et qu'il n'est pas possible de trouver une structure avec une valeur plus basse. Nous ne savons pas quelle est la valeur minimale qu'il est possible d'atteindre en pratique. Dans tous les cas, il est impossible de s'approcher de 0 par la nature du problème : en cherchant à maximiser le module du coefficient de transmission en amplitude, on maximise mécaniquement celui en énergie, mais il nous est inconnu. Et on peut s'attendre à ne pas avoir un coefficient de transmission qui puisse atteindre l'unité, physiquement.

Pour vérifier si l'optimisation améliore réellement les propriétés optiques de la structure, nous avons comparé nos résultats optimisés avec une structure "abrupte", c'est-à-dire que le guide d'onde d'entrée de largeur 120 nm est en contact direct avec le guide d'onde de sortie de 450 nm. La représentation de la structure et sa carte de champ sont représentées sur la figure 5.7. La carte de champ ne permet pas à elle seule de déterminer s'il existe une grande différence

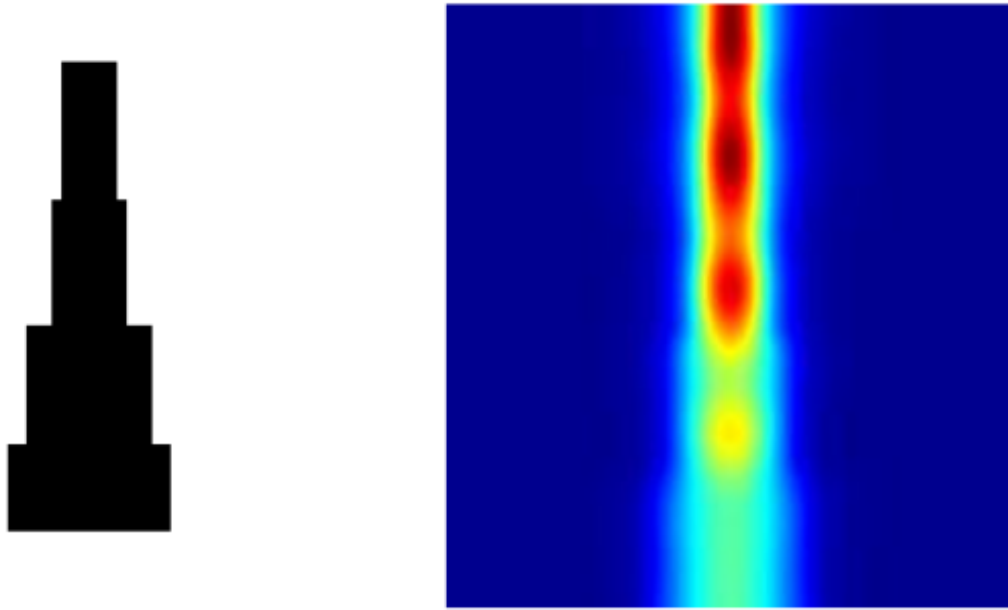


FIGURE 5.5 – Représentation de la structure non résonante optimisée (gauche) et sa carte de champ (droite). L'épaisseur totale de la structure est de 1410 nm. La fonction de coût vaut 0.27394.

d'efficacité entre les structures optimisées et la structure abrupte, mais la fonction de coût, d'une valeur de 0.29429, est plus élevée que dans le cas des structures optimisées. Les optimisations permettent donc bel et bien d'améliorer les performances des structures.

Il est généralement admis dans la littérature[173] qu'une structure graduelle, pour laquelle on augmente petit à petit la largeur pour passer du premier guide d'onde au second, serait la plus efficace pour limiter les pertes par réflexion. Nous avons donc comparé nos structures optimisées avec une structure comportant 800 couches de 50 nm de longueur chacune, en augmentant régulièrement leur largeur quand on s'approche de second guide d'onde. La structure et sa carte de champ sont représentées sur la figure 5.8. La fonction de coût est ici de 0.27394. Elle est donc aussi basse que dans le cas des structures optimisées. Ce résultat indique qu'une fonction de coût de 0.27394 semble être en effet le minimum qu'il est physiquement possible d'atteindre.

Il serait nécessaire de réaliser des analyses physiques plus détaillées (calculer les coefficients de transmission en énergie, sans doute très proches de 1) pour savoir s'il est physiquement possible de générer des structures améliorant davantage la transmission du mode guidé d'un guide à l'autre ou si nous avons doré et déjà atteint le maximum de transmission possible (ce qui est l'explication la plus plausible). Il peut être envisagé de modifier la fonction de coût pour qu'elle soit plus sensible aux modifications de la structure, par exemple en regardant la phase et la partie réelle du mode plutôt que de ne regarder que son amplitude comme nous l'avons fait ici. Comme dans le cas de l'anti-reflet pour le photovoltaïque présenté dans le chapitre 4, nous constatons que des structures résonantes émergent la plupart du temps mais que dans certaines conditions, ce sont des structures plus graduelles qui sont proposées par DE. Dans le cas de l'anti-reflet, c'était quand nous laissions les indices varier que nous obtenions soit des structures plutôt résonantes car constituées de deux indices de réfraction présentant le plus

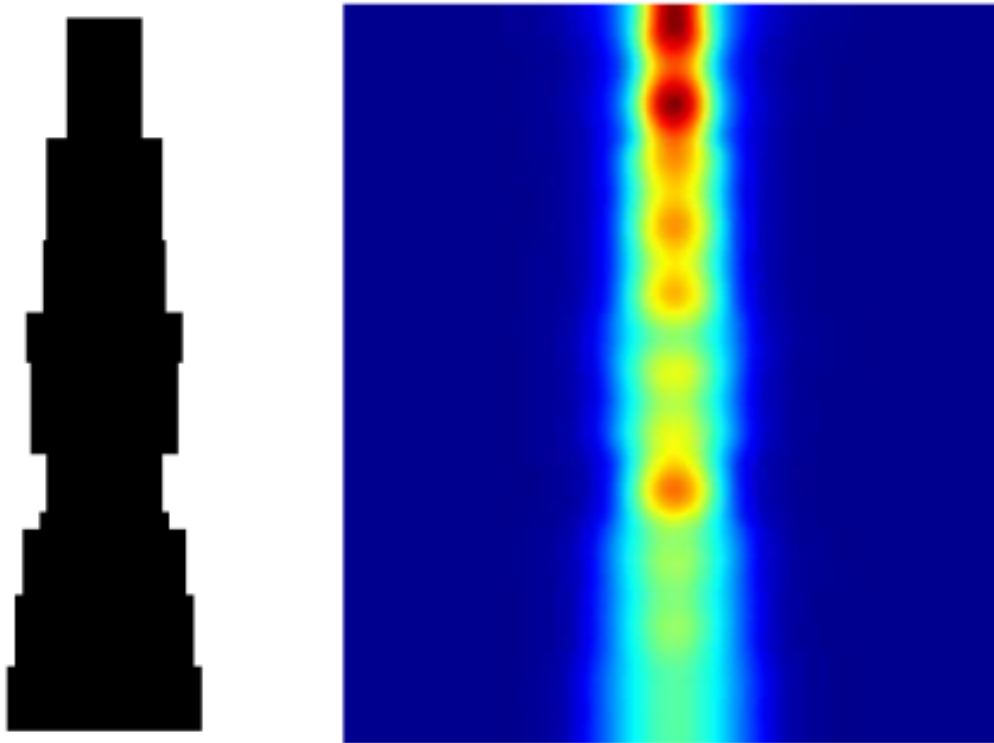


FIGURE 5.6 – Représentation de la structure à 10 portions optimisée (gauche) et sa carte de champ (droite). L'épaisseur totale de la structure est de 2711 nm. La fonction de coût vaut 0.27394.



FIGURE 5.7 – Représentation de la structure abrupte (gauche) et de sa carte de champ (droite). On passe directement du guide d'onde de largeur 120 nm au guide d'onde de largeur 450 nm sans chercher à faciliter la transmission. L'épaisseur totale de la structure est de 200 nm. La fonction de coût vaut 0.29429.

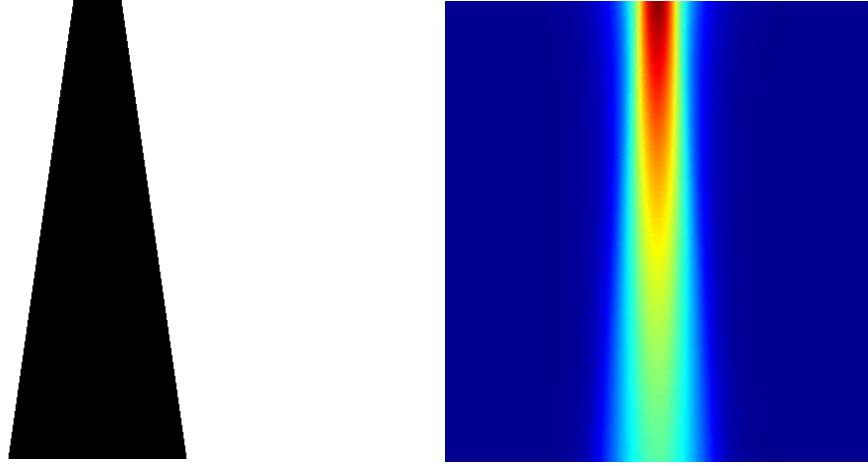


FIGURE 5.8 – Représentation de la structure graduelle (gauche) et de sa carte de champ (droite). La structure est constituée de 800 couches de 50 nm dont on augmente la largeur petit à petit. L'épaisseur totale de la structure est de 40 μm . La fonction de coût vaut 0.27394.

grand contraste d'indice autorisé, soit des structures plutôt graduelles quand le nombre de couches et le contraste d'indice maximal augmentent. Notre méthode d'optimisation s'est encore une fois montrée efficace pour générer des structures photoniques régulières et esthétiques qui laissent la possibilité de comprendre leur fonctionnement physique, pour un problème totalement différent de ceux testés jusqu'à maintenant.

5.2.2 Séparateur de polarisations

Paramètres d'optimisation

La structure en réseau optimisée ici est assez similaire à celle présentée dans la partie précédente. Il s'agit d'une structure comportant 3 sections de SiO_2 (d'indice $n = 1.46$) que nous plongeons dans de l'air (d'indice $n = 1$). La différence essentielle par rapport aux optimisations précédentes tient du fait qu'il n'y a plus qu'un seul "bloc de SiO_2 " par section mais plusieurs, afin de pouvoir constituer un réseau. Le réseau est excité par une longueur d'onde de travail de $\lambda = 600 \text{ nm}$. Le milieu incident est l'air, le milieu substrat est du silicium SiO_2 . L'objectif est de maximiser le coefficient de transmission en amplitude de la polarisation TE dans l'ordre -1 du réseau, tout en maximisant le coefficient de transmission de la polarisation TM dans l'ordre +1 du réseau. Par construction, ces deux ordres de transmission ont des directions séparées par 45° . La fonction de coût prend la forme

$$cf_2 = 1 - \frac{TE_{m1} + TM_{p1}}{2}$$

avec TE_{m1} le coefficient de transmission, en amplitude, de la polarisation TE dans l'ordre -1 et TM_{p1} le coefficient de transmission, en amplitude, de la polarisation TM dans l'ordre +1.

Nous utilisons toujours la méthode RCWA pour calculer les différents coefficients de transmission, mais ici la périodicité de la structure est recherchée pour accéder aux différents ordres de

diffraction. La période choisie pour les simulations est donc bien plus courte que précédemment, elle vaut ici $d = 848$ nm.

Comme précédemment, chaque bloc est défini par sa largeur et sa position, et chacune des sections par sa longueur. Les blocs d'une même section auront ainsi tous la même largeur : celle de la section à laquelle ils appartiennent. Contrairement au problème précédent, la position des blocs n'est ici pas paramétrée par avance mais constitue un paramètre d'optimisation, puisque nous avons maintenant plusieurs blocs dans la même section. Afin d'éviter un chevauchement de blocs au cours des étapes d'optimisation, plutôt que d'optimiser largeurs et positions des blocs, nous optimisons les positions à laquelle la section voit sa permittivité changer, c'est-à-dire les positions pour lesquelles nous passons d'un matériau à l'autre. Ainsi, le nombre de paramètres à optimiser pour une structure de 3 sections avec 4 blocs est de 21 (3 longueurs et 6 positions par section). Cela diminue le nombre de variables par rapport à considérer l'optimisation des largeurs et des positions, qui reviendrait à optimiser 2 paramètres par blocs dans 3 sections, donc 27 paramètres quand on rajoute les 3 longueurs des 3 sections.

On impose une distance minimale de 30 nm entre chaque position de changement d'indice. Les positions sont comprises entre 30 nm et la dimension de la période, 850 nm. Les longueurs de chacune des sections varient de 30 à 1400 nm. Nous effectuons 50 fois l'optimisation avec une population aléatoire initiale différente.

Résultats

Nous avons effectué une série d'optimisation en modifiant les contraintes sur la structure.

- **1 section de 3 blocs** : La première optimisation a consisté à optimiser 1 section avec 3 blocs, chaque section ayant une longueur maximale de 300 nm. Les résultats se sont révélés être particulièrement décevants, présentant des fonctions de coût situées entre 0.924 et 0.932. Autant dire que la transmission des ordres recherchés ne s'effectue pas vraiment.
- **longueur maximale augmentée à 600 nm** : Constatant que les structures médiocres proposées précédemment comprenaient des sections de longueur de 300 nm, à savoir la valeur maximale autorisée, nous avons relâché la contrainte en autorisant les longueurs des sections à prendre des valeurs jusqu'à 600 nm. Nous avons obtenu de meilleurs résultats, avec des fonctions de coût comprises entre 0.61 et 0.66, mais nous pensions pouvoir obtenir des résultats meilleurs.
- **1 section de 4 blocs** : Passer d'une section comportant 3 blocs à une section comportant 4 blocs a donné des solutions présentant des fonctions de coût autour de 0.6, soit légèrement meilleures que précédemment. Nous avons alors une fois de plus relâché la contrainte sur les longueurs, en définissant la longueur maximale à 1400 nm.
- **1 section de 5 blocs** : Passer à une section comportant 5 blocs a amélioré les fonctions de coût, alors autour de 0.4. Les longueurs maximales autorisées étaient de 600 nm ici.
- **2 sections de 3 blocs** : Nous sommes passés à une structure comportant 2 sections de 3 blocs, et nous avons obtenu là encore des fonctions de coût autour de 0.4. Les spectres de réflexion montraient que la polarisation TE était bien transmise dans l'ordre -1, mais la polarisation TM avait du mal à passer dans l'ordre +1 du réseau. Les longueurs maximales autorisées étaient de 600 nm ici.
- **2 sections de 4 blocs** : Nous avons ajouté un bloc, et nous avons obtenu de bien meilleurs résultats à la fois pour TE-1 et pour TM+1, avec une transmission autour de 0.8 dans chaque ordre. Les fonctions de coût sont alors comprises entre 0.05 (2 solutions sur les 50) et 0.30 (1 solution sur les 50). La majorité des solutions présentaient une fonction de coût autour de 0.17. Les longueurs maximales autorisées étaient de 1400 nm ici.

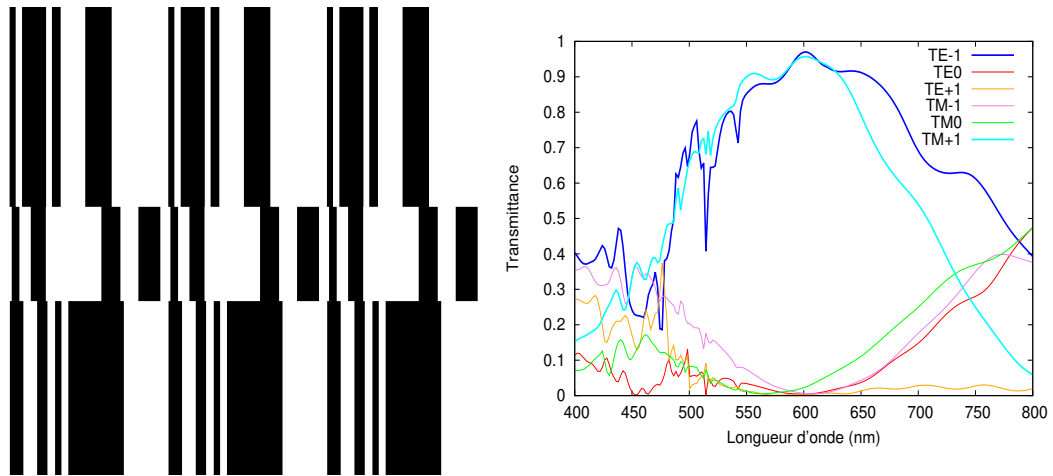


FIGURE 5.9 – Représentation de la structure (gauche) et son spectre de réflexion (droite) optimisée. L'épaisseur totale de la structure est de 2990 nm. La fonction de coût vaut 0.024785. Les polarisations TE dans l'ordre -1 (bleu) et TM dans l'ordre +1 (cyan) sont maximales à la longueur d'onde de travail, alors que les polarisations TE dans les ordres 0 et +1 et TM dans les ordres -1 et 0 sont minimales à cette même longueur d'onde.

- **3 sections de 1 bloc** : Les fonctions de coût obtenues pour des structures de 3 sections d'un bloc sont situées entre 0.69 et 0.79, présentant donc de bien moins bonnes structures que les résultats précédents. Les longueurs maximales autorisées étaient de 1400 nm ici.
- **2 sections de 4 blocs** : Les structures obtenues dans ces conditions se sont montrées particulièrement efficaces, en présentant des transmission dans les ordres TE-1 et TM+1 approchant 1. Les fonctions de coût sont situées entre 0.02 et 0.08, ce sont les plus basses que nous avons réussi à obtenir jusqu'à maintenant. Les longueurs maximales autorisées étaient de 1400 nm ici.

L'une des structures présentant d'excellentes propriétés et son spectre de transmission sont présentés figure 5.9. Le spectre révèle d'excellentes propriétés (notamment une réponse plus large bande, ce qui est très intéressant et montre qu'un mécanisme physique est bien à l'oeuvre) et nous constatons qu'en plus de maximiser la transmission de la polarisation TE dans l'ordre -1 et de la polarisation TM dans l'ordre +1, les transmissions des polarisations TE dans les ordres 0 et +1 et les polarisations TM dans les ordres -1 et 0 sont minimisées, ce qui n'était pas explicite dans la fonction de coût mais ce qui a été généré spontanément par l'optimisation.

Les cartes de champ quand on excite la structure avec une onde polarisée TE ou TM sont représentées sur la figure 5.10. Nous constatons que les intensités maximales des champs se propagent bien dans des directions opposées entre TE et TM. On éclaire ici la structure par le bas par une onde plane. Nous observons que le champ ne se propage pas de la même façon dans chacune des couches de la structure. L'onde plane est facilement reconnaissable en bas des cartes de champ. La structure optimisée semble résonante.

Nous obtenons ainsi des structures très efficaces d'un point de vue spectral, comme montré sur la figure 5.9a. Dans la pratique, il faudrait être capable de construire des blocs de matière ressemblant à des nanofils pour les mettre à "flotter" dans de l'air. Il reste donc encore beaucoup de travail avant de trouver des structures qu'il soit possible de fabriquer.

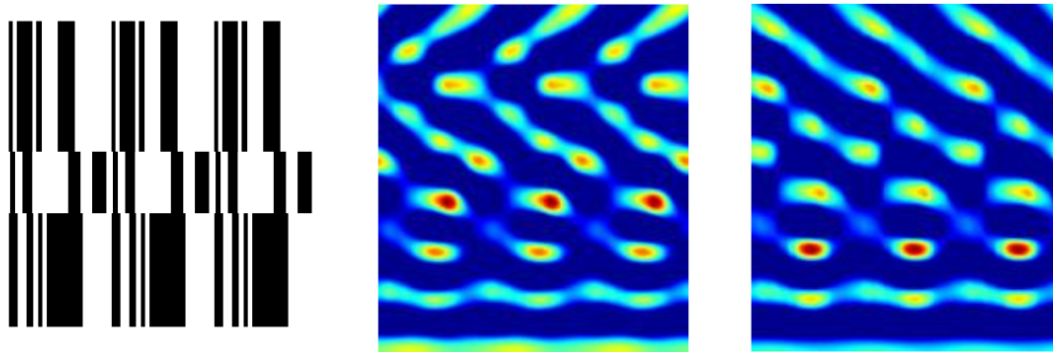


FIGURE 5.10 – Cartes de champ en polarisation TE (gauche) et TM (droite) de la structure optimisée pour maximiser la transmission dans l'ordre -1 de la polarisation TE et dans l'ordre +1 de la polarisation TM, quand on éclaire la structure par le bas en incidence normale à une longueur d'onde de 600 nm. Nous représentons les amplitudes des champs : la composante TE n'est pas la même que la composante TM. Nous distinguons 5 zones sur chaque image : la plus haute correspond au champ à la sortie de la structure, dans 200 nm d'air. Les deuxièmes, troisièmes et quatrièmes zones correspondent aux trois couches de la structure qui ont été optimisées, et la cinquième zone correspond à 200 nm d'air par laquelle on vient exciter la structure.

Nous obtenons une fois encore, en utilisant notre méthode d'optimisation, des structures esthétiques dont on peut deviner le fonctionnement physique. Il semble tout à fait envisageable de réaliser une analyse physique poussée pour comprendre quel est le rôle précis de chaque couche dans la structure et comment les différents modes sont excités et résonnent. En relâchant les bonnes contraintes, à savoir ici essentiellement la longueur maximale autorisée des couches, nous obtenons des structures régulières certes impossibles à fabriquer pour le moment, mais qui fonctionnent vraiment bien d'un point de vue optique. La largeur spectrale de fonctionnement est assez étendue par rapport à ce qu'on imaginait obtenir. C'est d'autant plus satisfaisant de l'avoir car un comportement à large bande spectrale est en général synonyme d'un minimum avec un bassin d'attraction assez large de la fonction de coût. Nous avons donc une solution assez robuste.

Conclusion

Ce chapitre présente une diversité de structures photoniques obtenues par optimisation avec l'algorithme Differential Evolution. Les 3 structures présentées ont toutes un intérêt technologique potentiel, même si certaines ne sont pas forcément réalistes. La première est une structure multicouche, la deuxième est constituée de sections de SiO_2 dans lesquelles on insère des guides de Si , et la dernière structure correspond à des couches constituées d'un matériau dans lesquelles on insère non pas un seul mais plusieurs blocs d'un autre matériau.

Nous avons obtenu à chaque fois des structures présentant une forme de régularité, voire de périodicité, indiquant qu'il y a des mécanismes physiques à comprendre et à interpréter. L'analyse poussée de la structure maximisant la propagation d'un plasmon de surface a prouvé que les structures équivalentes proposées dans la bibliographie ne sont pas optimales, bien qu'elles

soient très proches du minimum global détecté par notre méthode d'optimisation. L'analyse physique rapide du taper effectuée jusqu'à maintenant montre que la structure-solution trouvée par DE a un fort potentiel, mais que les propriétés physiques sont limitées par la géométrie globale imposée à la structure optimisée. Il faudrait effectuer de nouvelles optimisations en modifiant les matériaux utilisés ou en agrandissant fortement le domaine d'exploration des variables pour trouver une structure potentiellement plus efficace que la meilleure générée jusqu'à maintenant. La dernière structure en réseau de transmission, permettant de séparer les polarisations, n'a pas encore été assez étudiée pour que l'on puisse indiquer dans quelle direction nous devrions orienter les prochaines optimisations. Nous avons obtenu cependant des structures très intéressantes, et des analyses poussées des solutions seront à effectuer pour ré-orienter les optimisations vers des structures plus pertinentes.

Ces résultats montrent le potentiel de l'utilisation de Differential Evolution pour élaborer tout type de structures photoniques d'intérêt technologique, à condition de prendre le temps de comprendre l'influence des contraintes et des biais qu'on a pu imposer et d'analyser systématiquement les solutions générées. Nous avons montré que notre méthode d'optimisation pouvait tout à fait fonctionner même quand ce n'est pas nous qui lançons les optimisations, ce qui indique que les résultats sont parfaitement reproductibles et que cette méthode pourrait réellement susciter l'intérêt de la communauté.

Nevergrad : un outil avancé de benchmarking intensif

N'oublie jamais, celui qui croit savoir
n'apprend plus.

Le Pacte des Marchombres, Ellana
Pierre Bottero

Introduction

La volonté de lutter contre la difficulté à comparer les algorithmes les uns aux autres dont nous avons parlé dans le chapitre 1 a donné naissance à une plateforme collaborative d'optimisation en libre accès sous Python, appelée Nevergrad et créée par Olivier Teytaud et Jeremy Rapin[132, 115]. L'idée principale est de permettre à toute la communauté de l'optimisation de pouvoir tester ses algorithmes de la façon la plus rigoureuse, ouverte et complète possible. Nous allons voir comment nous avons contribué à cette plateforme, pourquoi nos contributions ont suscité l'intérêt de la communauté, mais aussi ce que la plateforme Nevergrad permet de faire dans le domaine de la photonique – et à quel point elle peut aussi contribuer à la résolution de problèmes inverses.

- Nevergrad aide ses utilisateurs à sélectionner une méthode d'optimisation en fournissant
- des ensembles très larges de problèmes de référence sur lesquels les algorithmes peuvent être comparés. Ces problèmes peuvent être plus ou moins concrets, construits par l'utilisateur[174] ou bien récupérés à partir de travaux externes dans d'autres bibliothèques d'optimisation[175];
 - des algorithmes d'optimisation à la pointe du domaine (tels que DE, PSO, mais bien d'autres encore sont disponibles);
 - des algorithmes puissants de sélection d'algorithmes d'optimisation, appelés "wizards". Ces algorithmes "wizards" aident les utilisateurs à sélectionner un algorithme parmi ceux qui sont disponibles dans la base de donnée, en fonction de la nature du problème à optimiser[176, 177];
 - des tableaux fréquemment mis à jour, répertoriant l'ensemble des résultats expérimentaux[178] sous forme de graphiques ou de tableaux.

Les collaborateurs de Nevergrad ont pour volonté de réaliser des benchmarks – donc des évaluations de performances d’algorithmes sur des fonctions diverses – en intégrant notamment des fonctions qui correspondent à des problèmes du monde réel. Utiliser des fonctions plus proches de problèmes réels en plus des simples fonctions mathématiques habituellement utilisées pour réaliser les benchmarks a deux avantages : (i) la plateforme Nevergrad devient utile d’un point de vue applicatif puisque ses algorithmes permettent d’optimiser des problèmes concrets et (ii) les fonctions concrètes sont souvent bien plus complexes à optimiser que celles habituellement utilisées et représentent donc un fort potentiel pour comparer les performances des algorithmes en évitant les biais que nous avons mentionnés à la fin du chapitre 1.

6.1 Module Photonics et optimisation structurée

Les problèmes de photonique intéressent les spécialistes d’optimisation car ils représentent des fonctions particulièrement complexes à optimiser en raison de la complexité du paysage formé par le domaine d’optimisation. Les paramètres à optimiser sont nombreux, il est impossible de savoir quelles sont les réponses optimales et nous ne pouvons que supposer que par moment nous parvenons à nous rapprocher d’un bassin d’attraction large. Le très grand nombre de résonances des fonctions optiques rendent les problèmes photoniques extrêmement complexes à optimiser. La photonique représente en ce sens un défi pour les algorithmes d’optimisation, et permettent de pousser l’analyse comparative des méthodes d’optimisation à un degré très élevé.

En collaboration avec Olivier Teytaud, les problèmes optiques qui font l’objet du chapitre 2 ont donc été implémentés dans un module appelé **Photonics** sur la plateforme Nevergrad. Ce module comporte à sa création trois fonctions de coût :

- **bragg** : il s’agit de la fonction permettant de retrouver les miroirs de Bragg présents sur les carapaces des scarabées.
- **chirped** : cette fonction permet de retrouver les miroirs diélectriques à gradient d’épaisseur également présents sur la carapace de certains scarabées.
- **morpho** : il s’agit de la fonction permettant de retrouver la structure en damier, qui n’est pas exactement la structure présente sur le papillon morpho mais qui permet de diffuser la lumière bleue avec encore plus d’efficacité.

Le module **Photonics** permet de réaliser des expériences sur différents algorithmes d’optimisation implémentés dans Nevergrad et d’étudier dans quels cas certains algorithmes sont plus performants que d’autres. Nous avons par exemple effectué la minimisation de la fonction **bragg** pour une structure de 40 couches (chacune des couches étant décrites par deux variables, sa permittivité et son épaisseur, le problème d’optimisation est donc un problème de dimension 80). La fonction **bragg** est particulière : nous pensons connaître la structure idéale, il s’agit d’un miroir de Bragg. Il est donc intéressant d’étudier quels algorithmes parviennent le plus rapidement possible à trouver l’optimum de cette fonction pas si simple à optimiser. Nous avons ainsi étudié différentes manières de réaliser les opérations de croisement et de mutation lors d’une optimisation par DE ou par stratégie d’évolution (ES).

L’optimisation d’une structure de 12 couches est en réalité un problème à 24 variables puisque chaque couche est caractérisée par deux paramètres : sa permittivité et son épaisseur. Lors des opérations de croisement qui permettent de générer une nouvelle structure à évaluer, il

p_0	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	p_7	p_8	p_9	p_{10}	p_{11}
t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}

p_0	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	p_7	p_8	p_9	p_{10}	p_{11}
t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}

FIGURE 6.1 – Deux exemples de croisement sur une structure à 12 couches de deux variables (une permittivité p et une épaisseur t par couche). Les croisements "cassent" les couches. Chaque couleur correspond à un parent différent. Haut : un parent (en gris) apporte 4 variables et un autre parent apporte toutes les autres variables (en blanc). Bas : un parent apporte 10 variables (en gris) et un autre apporte toutes les autres variables (en blanc). La structure bi-dimensionnelle des couches est ignorée et les individus sont combinés comme si les données étaient uni-dimensionnelles. Illustration issue de *Open Source Evolutionary Structures Optimization*, Rapin et al., 2021, in Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion (GECCO '20 Companion), July 8–12, 2020, Cancún, Mexico[179].

p_0	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	p_7	p_8	p_9	p_{10}	p_{11}
t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}

FIGURE 6.2 – Exemple d'un croisement sur douze couches de deux variables qui garde la structure en couche. Chaque couleur correspond à un parent différent. Chaque couche de l'enfant vient entièrement d'un parent ou de l'autre, mais pas d'un mélange des deux. Illustration issue de *Open Source Evolutionary Structures Optimization*, Rapin et al., 2021, in Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion (GECCO '20 Companion), July 8–12, 2020, Cancún, Mexico[179].

existe deux possibilités :

- Considérer que le problème en cours d'optimisation est un problème à 24 variables unidimensionnel, et déterminer pour chacun des 24 paramètres de l'enfant s'il est issu du parent initialement présent dans la population ou bien de l'individu mutant. La figure 6.1 représente cette situation. C'est en général ce qui est effectué par défaut par les algorithmes.
- Considérer que le problème en cours d'optimisation est un problème bi-dimensionnel à 12 variables. La couche est alors vue dans son ensemble (permittivité + épaisseur) et c'est l'ensemble des deux caractéristiques qui est issue du parent ou du mutant pour générer l'enfant. Cette situation est représentée par la figure 6.2 et on dit que l'algorithme effectue une optimisation "structurée" puisque la structure en couche est conservée lors des transformations sur les individus de la population.

Nous avons évalué les performances de différents algorithmes dont les principales variantes sont qu'ils utilisent ou non de l'optimisation structurée lorsque des nouvelles structures sont générées par mutation et/ou croisement de structures existantes dans la population. Ces algorithmes sont donc tous basés sur l'évolution de population et sont des variantes de CMA-ES, PSO, DE ou (1+1)-ES. La figure 6.3 présente les résultats obtenus dans le cadre de l'optimisation d'une structure à 40 couches pour la fonction **bragg** du module **Photonics**. Les fonctions de coût sont représentées en fonction du budget accordé à l'optimisation, moyennées sur 32 itérations

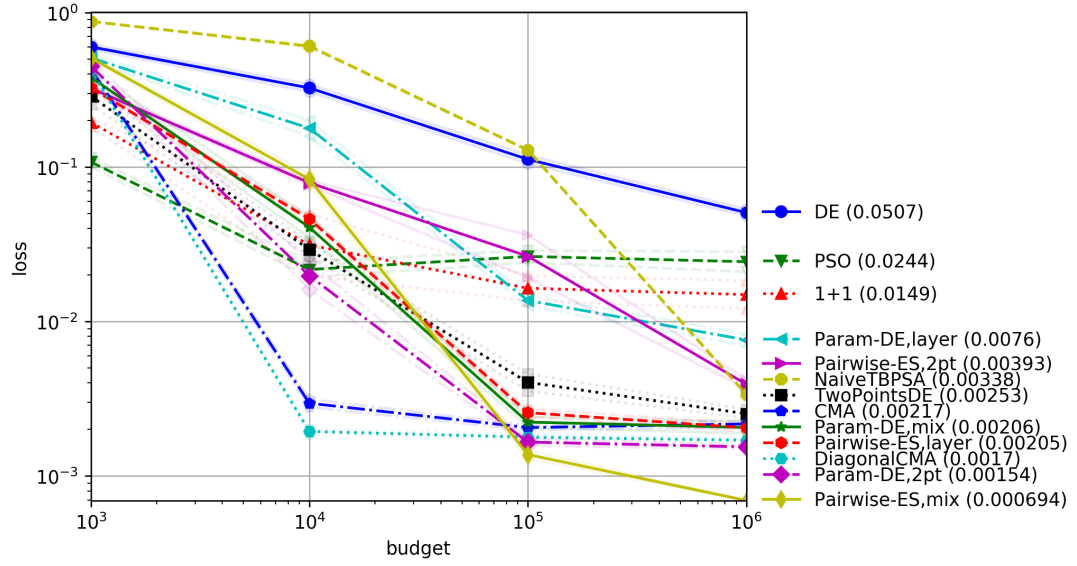


FIGURE 6.3 – Fonction de coût d’une structure à 40 couches (dimension = 80) sur la fonction **bragg** du module **Photonics** en fonction du budget attribué à l’optimisation, moyenné sur 32 exécutions différentes. Illustration issue de *Open Source Evolutionary Structures Optimization*, Rapin et al., 2021, in Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion (GECCO ’20 Companion), July 8–12, 2020, Cancún, Mexico[179].

des optimisations. Chaque courbe colorée correspond ainsi à la moyenne des résultats obtenus par un seul algorithme. Nous observons que les algorithmes standards donnent globalement les pires résultats. Les meilleures fonctions de coût sont générées par les méthodes **Param-DE** et **Pairwise-DE** qui sont les deux seules méthodes qui prennent en compte la structure en couche – et donc la nature bi-dimensionnelle – du problème d’optimisation. Ce sont donc les algorithmes d’optimisation "structurée" qui sont les plus performants sur les problèmes de photonique.

La plateforme Nevergrad permet de représenter les données expérimentales sous la forme de carte, ce qui est particulièrement utile lorsqu’on veut simplement savoir quels sont les algorithmes qui sont les plus performants et qu’on se fiche de connaître la valeur des fonctions de coût obtenues suite aux optimisations. Un exemple de carte **heatmap** est montré sur la figure 6.4. Chaque ligne correspond à un seul algorithme. Seuls les meilleurs d’entre eux sont représentés. Ils sont rangés en fonction de leurs performances, les meilleurs étant en haut. La performance d’un algorithme A pour un type de problème T est la fréquence F , moyennée sur tous les problèmes p de T et tous les algorithmes A' inclus dans l’expérience, à laquelle l’algorithme A surpasse l’algorithme A' sur les problèmes p inclus dans T . Par exemple, la carte représentée sur la figure 6.4 représente les performances relatives de 12 algorithmes (shiwa, urchin, etc) sur les problèmes **bragg**, **chirped** et **morpho** (p) contenus dans **Photonics** (T). Les problèmes peuvent différer par leur fonction de coût (bragg plutôt que chirped), le budget attribué à l’optimisation, la dimension du problème (20 ou 50 couches), le domaine d’optimisation (une épaisseur maximale fixée à 200nm ou bien à 500), le fait de réaliser ou non de l’optimisation structurée qui prend en compte l’aspect bi-dimensionnel d’un problème, ou encore le degré de parallélisation de l’optimisation. Les données représentées sur la figure 6.4 montrent que l’algorithme "Shiwa" surpasse plus de la moitié du temps les autres algorithmes auquel on

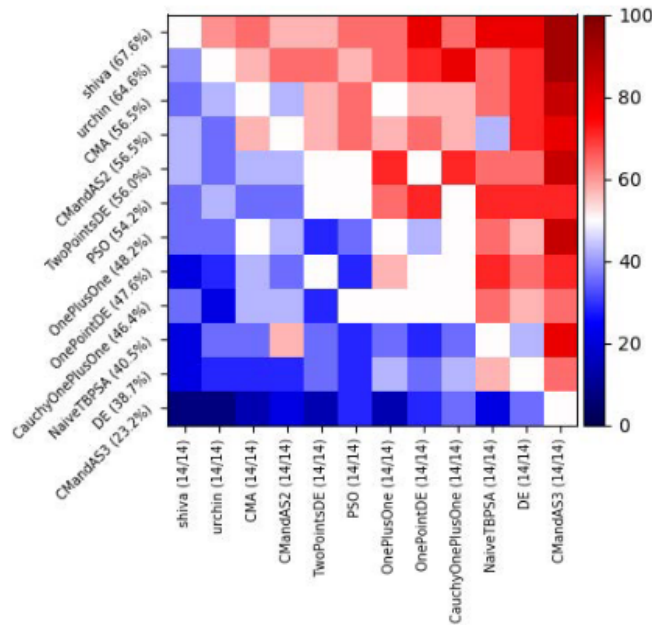


FIGURE 6.4 – Comparaison des performances de différents algorithmes sur les fonctions implémentées dans le module **Photonics** de Nevergrad. Illustration issue de *Versatile Black Box Optimisation*, Liu et al., 2020, in Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference[177].

l’a comparé. Cet algorithme "Shiwa" est en réalité un "Wizard" qui permet automatiquement de sélectionner, en fonction de la nature du problème à optimiser, l’algorithme d’optimisation le plus pertinent[177].

6.2 Optimisation de couches anti-reflet

Deux fonctions de coût ont été rajoutées au module **Photonics** de la plateforme Nevergrad. Ces deux fonctions de coût permettent d’optimiser des couches anti-reflet qui maximisent l’absorption des photons dans une couche de silicium, afin de maximiser le courant de court-circuit d’une cellule photovoltaïque. Ces travaux sont directement issus de ceux présentés dans le chapitre 4.

- **cf_photonic_reference** correspond à l’optimisation seule des épaisseurs des multicouches constituant l’antireflet. Nous imposons ici une alternance de deux matériaux d’indice de réfraction 1.4 et 1.7.
- **cf_photonic_realistic** correspond à l’optimisation cumulée des épaisseurs et des indices de réfraction des couches.

L’intégration de ces deux fonctions de coût au module **Photonics** nous ont permis de remporter un concours[180] organisé par les collaborateurs des plateformes Nevergrad[132] et IOHprofiler[181]. Elles représentent en effet deux fonctions photoniques complexes particulièrement intéressantes pour évaluer les méthodes d’optimisation. Il s’avère que les méthodes d’optimisation les plus efficaces sur les fonctions de photonique ne sont en général pas celles

qui fonctionnent le mieux sur les autres problèmes d'optimisation, même s'ils correspondent à des problèmes concrets autres que photonique, comme l'électrification de Madagascar[182], ou l'amélioration des intelligences artificielles[183, 184]. Ce concours a lieu chaque année depuis 2020 et c'est en contribuant au module Photonics que nous avons remporté l'édition 2021. L'édition 2022 est encore ouverte aux participations[185]. L'objectif de ces compétitions est de rendre le benchmarking accessible et reproductible par toutes les personnes intéressées.

Un autre module a également été implémenté sur la plateforme Nevergrad par notre équipe et notamment Emmanuel Centeno. Il s'agit du module **ARCoating**, qui permet également d'optimiser des couches anti-reflets. Contrairement aux deux autres fonctions présentées juste au dessus, il ne s'agit pas d'optimiser les épaisseurs des couches anti-reflet car celles-ci sont imposées au départ. L'utilisateur indique l'épaisseur totale de la structure à optimiser, et le nombre de couches qu'il souhaite obtenir. Les épaisseurs de chacune des couches sont ainsi paramétrées automatiquement, et sont toutes égales. L'optimisation consiste à trouver les matériaux les plus adéquats pour obtenir un anti-reflet en incidence normale qui agit sur toute une plage de longueur d'onde allant de 400 à 900 nm. Le milieu incident est de l'air (d'indice de réfraction $n_{air} = 1$) et le substrat est du silicium (d'indice de réfraction $n_{Si} = 3$). Le calcul est plus rapide que pour les deux fonctions précédentes car nous calculons le coefficient de réflexion, et non d'absorption, de la structure en utilisant un formalisme des impédances similaires à celui des admittances utilisé par ailleurs[163] et présenté en annexe A. Lorsque le nombre de couches, et donc l'épaisseur totale de la structure, est suffisamment grande, il est classique de considérer qu'un profil d'indice gaussien est la meilleure solution. Cette allure est représentée sur la figure 6.5 par la courbe noire. Les résultats des optimisations effectuées jusqu'à maintenant montrent que la meilleure solution est vraiment différente selon le nombre de couches de la structure mais qu'elles sont meilleures que le profil gaussien habituellement utilisé[186]. Pour une structure de 10 couches, la solution proposée par les algorithmes est un profil qui augmente graduellement quand on se rapproche du substrat, mais qui diffère de l'allure gaussienne car les indices augmentent plus vite que ce qui est attendu. C'est ce qui est représenté par la courbe bleue en haut de la figure 6.5.

Quand on augmente le nombre de couches de la structure, une zone à indice de réfraction élevé apparaît systématiquement, comme représenté par la courbe verte en bas de la figure 6.5. La variation d'indice évoque une structure interférentielle contrairement à la structure de 10 couches. Quand suffisamment de couches sont utilisables, c'est donc une résonance qui commence à apparaître. C'est un cas qui correspond un peu au taper présenté dans le chapitre précédent, où deux stratégies sont manifestement possibles pour minimiser la réflexion, faire une structure graduelle ou utiliser une résonance. Ici, le fonctionnement est censé être plus large bande, mais les résonances fondamentales de cavité sont aussi relativement large bande. C'est donc un peu surprenant et donc plutôt intéressant de voir qu'on s'écarte spontanément d'une structure graduelle alors qu'on augmente le nombre de couches.

Les spectres de réflexion et une représentation des meilleures structures à 10 et 20 couches sont respectivement représentées sur les figures 6.6 et 6.7.

6.3 Optimisation discrète et structures pixelisées

Jusqu'à maintenant, nous avons réalisé des optimisations paramétriques de structures photoniques, en imposant des contraintes assez fortes sur la géométrie des structures. Nous avons également mentionné dans le chapitre 1 que l'optimisation topologique (TO), d'abord développée avec beaucoup de succès pour la mécanique[85], s'est peu à peu répandue en photonique et a permis de produire des structures très performantes mais malheureusement difficile à fabriquer[90,

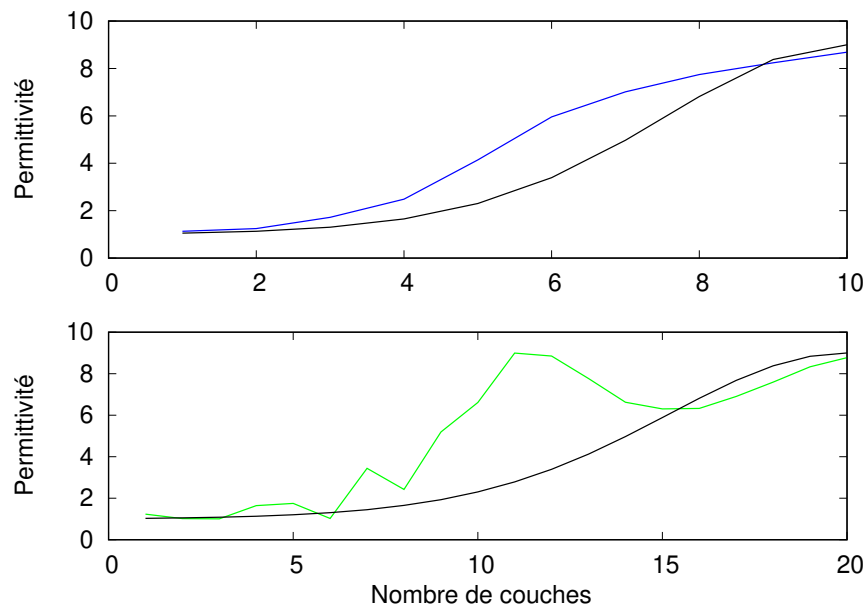


FIGURE 6.5 – Profil d'indice de réfraction obtenu pour une structure d'épaisseur totale de 700 nm et de respectivement 10 couches (haut) et 20 couches (bas). La courbe en noire représente un profil gaussien, qui est souvent présenté dans la littérature comme étant optimal pour avoir un changement continu de l'indice de réfraction. Les profils d'indices montrés ici sont nettement plus efficaces que le profil gaussien. Illustration issue de *The Photonics and ARCoating testbeds in Nevergrad*, Bennet et al., 2020[187].

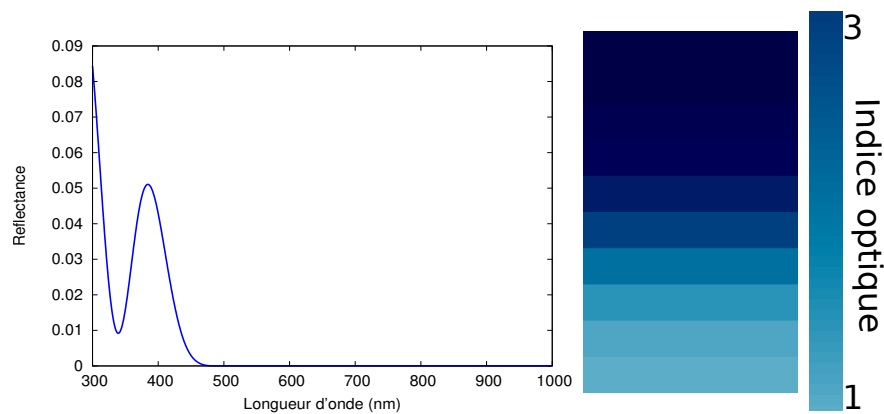


FIGURE 6.6 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 10 couches quand on laisse les indices varier entre 1 et 3. Les couches font 70 nm d'épaisseur.

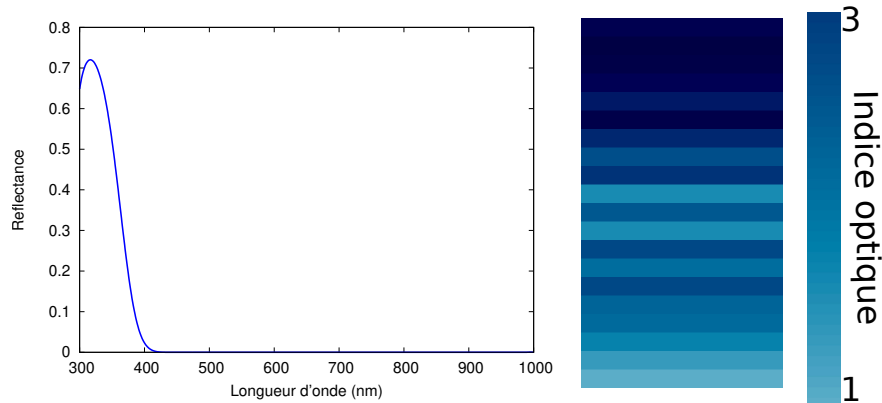


FIGURE 6.7 – Spectre de réflexion et représentation de la structure optimisée avec 20 couches quand on laisse les indices varier entre 1 et 3. Les couches font 35 nm d'épaisseur.

84, 20]. En général, les structures sont binaires (constituées de deux matériaux) et sont divisées en pixels. L'optimisation consiste à remplir avec l'un ou l'autre des matériaux chacun des pixels. Basée sur une méthode de descente de gradient, il est nécessaire pour pouvoir appliquer la TO d'attribuer des valeurs continues, et non discrètes, à chacun des pixels. On choisit alors en général une fonction (appelons la l'opacité) dont la valeur inférieure est 0, et la valeur maximale est 1. Si un pixel vaut 0, alors il est rempli du matériau 1, si le pixel vaut 1, alors il est rempli du matériau 2, et si la valeur est intermédiaire, le pixel n'a pas de matériau attribué. Une fois qu'une première étape d'optimisation continue est effectuée, nous obtenons en général une structure non binaire qu'il n'est pas possible de fabriquer. Cette étape est donc suivie d'une discrétisation, qui rend binaire la structure mais qui détériore ses performances optiques.

En collaboration avec Olivier Teytaud, nous nous sommes demandés si l'utilisation d'algorithmes discrets d'optimisation ne pouvait pas permettre de générer des structures meilleures que celles obtenues par TO. Nous nous sommes appuyés sur les codes disponibles en libre accès du module SPINS-B[188].

Le module SPINS-B est bien documenté et constitue une version allégée du code SPINS[189], qui lui est destiné à concevoir des composants photoniques 3D complets mais qui n'est pas disponible librement. En résolvant un problème adjoint[190], le gradient de toute fonction de coût peut être calculé pour un faible coût de calcul, de sorte qu'une méthode Broyden – Fletcher – Goldfarb – Shanno (BFGS[191]) peut alors être implémentée pour générer une structure par un calcul basé sur le gradient. La structure est ensuite discrétisée.

Pour évaluer la réponse optique d'une structure 2D divisée en pixels et calculer les fonctions de coût, une méthode de différence finie en domaine fréquentiel (FDFD) est utilisée. Les fonctions de coût de trois problèmes sont décrites en détail dans SPINS-B[192] et sont faciles à interfacer avec n'importe quel code python. Nous avons donc pu nous servir des codes disponibles pour effectuer des optimisations et des comparaisons sur les mêmes problèmes que ceux présentés dans SPINS-B.

Les premières expériences que nous avons réalisées ont montré qu'utiliser directement une optimisation discrète ne permet pas d'obtenir des structures plus efficaces que celles générées par SPINS-B. En revanche, nous avons montré qu'en combinant plusieurs méthodes, il était possible d'obtenir des structures régulières et très efficaces, à condition de procéder à différentes étapes d'optimisation.

En nous appuyant sur le problème de la re-direction d'un mode guidé dans une structure

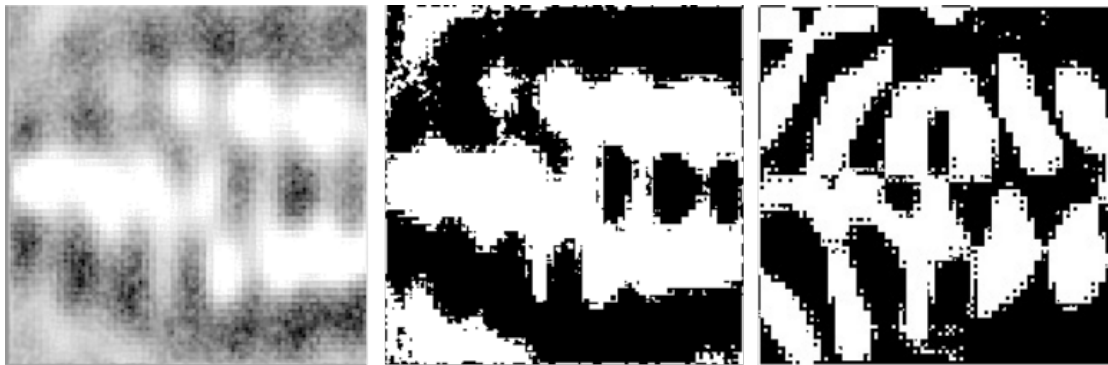


FIGURE 6.8 – Résultats des optimisations sur le démultiplexeur. Gauche : structure après BFGS. Milieu : structure après BFGS et une discrétisation. Droite : structure après avoir utilisé l’algorithme de Lengler suivi d’une opération de lissage. Le matériau avec une haute permittivité est en noir, l’air est représenté en blanc. Les différences entre les résultats avant que les algorithmes discrets agissent et les résultats finaux sont significatives. Illustration issue de *Discrete global optimization algorithms for pixel-based inverse design*, Teytaud et al., 2022(article accepté).

2D présenté dans SPINS-B, nous avons montré que les meilleures structures étaient générées lorsque :

1. BFGS est utilisé pour obtenir une structure continue,
2. la structure est ensuite discrétisée (cette étape est automatiquement réalisée dans SPINS-B),
3. des algorithmes discrets de Nevergrad[132, 193], en particulier l’algorithme Lengler[194], sont utilisés pour optimiser une deuxième fois la structure,
4. une opération de lissage est effectuée pour prendre en compte le voisinage d’un pixel au moment de lui attribuer une valeur d’opacité.

La figure 6.8 montre le résultat des optimisations après différentes étapes d’optimisation. A gauche, la structure continue après l’optimisation par BFGS est présentée. Les nuances de gris indiquent que les valeurs d’opacité sont continues, et la structure ne peut donc pas être fabriquée. Au milieu, nous observons une structure binaire obtenue après l’optimisation par BFGS suivi d’une discrétisation, ce pourquoi seulement du noir et du blanc sont visibles. A droite, il s’agit d’une structure obtenue après avoir réalisé une première optimisation par BFGS, puis une discrétisation, puis une deuxième optimisation par Lengler, accompagné d’un processus de lissage. C’est cette structure finale qui présente les meilleures performances.

Nous avons effectué des tests sur les trois problèmes disponibles dans SPINS-B : la re-direction d’un mode guidé de 90° , la séparation de deux longueurs d’onde dans un démultiplexeur, et le couplage d’un mode guidé dans un réseau. A chaque fois, ce sont les combinaisons des deux optimisations continue (BFGS) puis discrète (Lengler), l’une accompagnée d’une discrétisation et l’autre d’un lissage, qui génèrent les meilleurs résultats.

Ces travaux illustrent à la fois l’importance des collaborations entre équipes, en partageant les codes de calcul et permettre une reproductibilité des résultats, et l’importance d’injecter de la physique dans toutes les étapes d’optimisation pour aboutir à des structures les plus jolies et performantes possibles. En utilisant comme point de départ d’une optimisation discrète la solution proposée par BFGS, nous disposons d’un point initial déjà influencé par la physique du problème et donc de meilleure qualité qu’un point de départ purement aléatoire. Nous

avons vu que le résultat produit par l'optimisation discrète est sensiblement différent de la structure générée par BFGS. Cependant, on constate que les résultats de l'optimisation sont essentiellement composés de blocs bien définis, ce que nous n'avons pas imposé. Le fait que nous n'ayons pas imposé une telle contrainte indique qu'il s'agit d'une caractéristique imposée par la physique du problème.

Les travaux présentés ici ont été acceptés pour publication dans *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications* et seront bientôt diffusés. Les codes sont dorénavant disponibles[195].

Une question importante et ouverte demeure. La meilleure solution possible est-elle continue, avec des valeurs intermédiaires de permittivité, ou est-elle binaire? Les auteurs de SPINS-B semblent pencher vers la première réponse, puisqu'ils utilisent les résultats de BFGS sans discrétisation pour estimer la plus haute efficacité atteignable[192]. Cependant, nos résultats montrent que les structures discrètes peuvent être particulièrement efficaces. Nous soulignons que dans les structures multicouches il a été prouvé que les meilleures structures présentent un contraste d'indice maximal, ce que l'on retrouve en optimisation paramétrique[36, 147, 193].

Discussion

De nombreux membres de la communauté photonique doutent encore que les approches de design inverse soient à la hauteur du défi, principalement parce qu'aucune règle de conception ne peut vraiment être déduite des solutions optimisées tant que nous ne sommes pas en mesure de comprendre comment elles fonctionnent en détail. Un problème aussi complexe ne peut être résolu par un individu ou une équipe. Concevoir de bonnes structures demande beaucoup de travail. Nous avons montré dans ce chapitre comment une collaboration régulière avec un spécialiste de l'optimisation globale, Olivier Teytaud, nous a permis de contribuer largement à la compréhension des optimisations et des structures optimisées.

Nous avons ainsi identifié l'algorithme de Lengler comme efficace pour générer des structures régulières quand on passe par de l'optimisation topologique et qu'on utilise une pixelisation des structures. En utilisant un algorithme implémenté dans Nevergrad conçu spécifiquement pour optimiser des structures discrètes, nous avons obtenu de façon régulière des meilleures structures que celles générées par de l'optimisation topologique classique, à condition de se servir de leur structure optimisée comme base pour nos optimisations.

Par ailleurs, toujours grâce à cette collaboration, nous avons confirmé que DE est l'algorithme le plus adapté pour résoudre des problèmes paramétriques de photonique, en particulier sous sa version structurée qui permet de combiner indice de réfraction et épaisseurs des couches lorsque des transformations sont effectuées. Cette opération permet de tenir compte de la physique du problème pour accélérer la convergence de l'algorithme par rapport à une version non structurée. Il est à rappeler qu'en général, DE n'est pas le plus efficace pour l'optimisation de problèmes non photoniques et que cela fait de nos problèmes de photoniques des cas très intéressants pour en apprendre davantage sur les spécificités de chaque algorithme d'optimisation. Cela montre aussi à quel point le benchmarking peut être difficile.

La communauté d'optimisation est tellement active que des variantes d'algorithmes sont constamment créées et testées. Nevergrad permet de réaliser du benchmarking en continu, en fournissant des données fiables et reproductibles, et permet de savoir quelles sont les méthodes les plus à la pointe du domaine en fonction du type de problèmes à optimiser. Les problèmes de photoniques étant particulièrement uniques, la communauté d'optimisation a tout intérêt à voir arriver de nouvelles fonctions photoniques dans Nevergrad. En parallèle, la communauté de photonique peut bénéficier des meilleurs algorithmes pour tenter tout un tas d'optimisation.

Ces travaux ont été publiés dans Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion[179] et ACM SIGEVolution[193], et sont acceptés pour publication dans Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications et seront bientôt diffusés. Les codes sont dorénavant déjà disponibles[195].

Conclusion générale

Il y a deux réponses à cette question, comme à toutes les questions : celle du savant et celle du poète. Laquelle veux-tu en premier ?

Le Pacte Des Marchombres, Ellana
Pierre Bottero

Il est courant d'entendre ou de lire que la réponse à une question donnée est toujours un peu double[196]. Il y a toujours une réponse particulièrement prudente, rationnelle, exacte – celle du savant. Il y a aussi toujours une réponse inspirante et qui stimule l'imagination – celle du poète. Tout au long de ma thèse, j'ai eu l'impression de naviguer entre ces deux types de réponse en permanence, alors que j'imaginai volontiers avant de découvrir la façon dont se forge la connaissance que le premier type de réponse – solide, exacte – était une règle absolue en science.

Encore plus paradoxalement, c'est dans le domaine dont on pourrait attendre la plus grande rigueur mathématique, l'informatique, que les réponses qu'on peut lire dans les articles ressemblent le plus à des réponses de poètes. Les informaticiens savent manifestement s'inspirer de tout ce qui les entoure – fourmis, oiseaux, bactéries, orchestres – pour imaginer de nouveaux algorithmes. Là encore, si l'inspiration est présente, ce sont plutôt les réponses solides sur lesquelles baser la future science qui font défaut. Dans le domaine de l'optimisation, la pression du *publish or perish* ou la difficulté à être remarqué dans une communauté très nombreuse et très active ont sans doute créé cette "crise de la reproductibilité". Après avoir posé un tel diagnostic, l'important est sans doute de proposer des solutions. Des bibliothèques d'optimisation, proposant leurs algorithmes et leurs problèmes, mais aussi l'intégralité de leurs résultats en libre accès, sont des pas prometteurs vers une science solide, rigoureuse, sur laquelle des travaux futurs pourront s'appuyer.

J'ai eu la chance de pouvoir participer à ces efforts à travers ma collaboration à Nevergrad. On peut maintenant dire que les papillons Morpho sont devenus précieux pour le domaine de l'optimisation. En effet, la fonction de coût permettant de diffuser la lumière bleue et directement inspirée par la réponse optique des ailes du Morpho, aide, en permettant d'améliorer les algorithmes d'optimisation, à construire les intelligences artificielles modernes – et même les programmes de jeux d'échec comme Stockfish (le meilleur jeu d'échec au monde actuellement), qui utilise directement Nevergrad pour s'améliorer[197].

À la question de savoir ce que l'optimisation peut apporter à la photonique, j'ai aussi des réponses à proposer. Il est certain que reposer sur de l'optimisation est nécessaire pour dépasser les limites actuelles de conception, et pour explorer le vaste champ des possibles. Il est également certain que cet effort est vain s'il n'est pas accompagné de physique du début à la fin. Que ce soit pour définir le problème ou analyser sa solution, l'intuition physique est essentielle à double titre : elle guide l'optimisation, notamment à travers le choix du domaine de recherche, et elle

permet de jauger de la qualité d'une solution, un des très rares critères disponibles pour ce faire. Pouvoir discuter de la qualité des solutions apportées est absolument essentiel puisque, il faut le rappeler, la malédiction de la plupart des optimisations est qu'il est impossible de déterminer si l'on a ou pas atteint l'optimum global.

En suivant ainsi notre sens physique, nous avons montré de façon claire que les algorithmes d'optimisation les plus modernes, et particulièrement Differential Evolution, étaient effectivement capables de produire des solutions réellement satisfaisantes, au sens où elles sont compréhensibles physiquement, et où elles émergent surtout de façon très systématique. Il est en effet possible de moduler la difficulté des problèmes de photonique pour voir si les algorithmes sont performants ou s'ils trouvent des bonnes solutions par pure chance. Nous avons ainsi pu délimiter un domaine de fonctionnement typique (de 10 à 100 paramètres décrivant des structures potentiellement périodiques) pour lequel l'optimisation globale a une chance d'apporter une réponse satisfaisante.

Nous avons finalement montré, au cours de ce travail, qu'il est tout à fait pertinent de s'inspirer de la nature pour faire de l'optimisation. Sans chercher à reproduire l'évolution strictement, nous avons montré qu'un algorithme réalisant des transformations en partie aléatoires sur des structures converge vers des solutions qui sont produites dans la nature par un réel processus évolutif. Il est finalement assez satisfaisant de confronter pour la première fois les inspirations des informaticiens, leurs réponses de poètes, à la réalité de l'évolution. C'est aussi une façon de démontrer que l'évolution elle-même est bien capable d'optimiser au sens le plus strict, les structures photoniques présentes sur les carapaces des insectes ou les ailes de papillons – et d'apporter ainsi une réponse de savant à une question qui n'est pas dénuée de poésie.

Bien sûr, si ce manuscrit représente la fin d'un parcours, notamment personnel, il ne fournit pas encore toutes les réponses aux questions scientifiques que nous avons soulevées. Nous ne savons pas encore si la méthodologie que nous avons appliquée avec succès peut l'être pour concevoir des dispositifs comme des multiplexeurs. C'est un travail qui reste à mener. Pour autant, on peut avoir l'impression de s'être, réellement, approché un peu de la "machine à invention" dont rêvait Koza. Elle n'a rien de simple, et l'obtention de solutions satisfaisantes réclame du travail et du temps. Mais pour la première fois des optimisations ont suggéré, dans le cas de l'Anti-Reflet et de sa structure modulaire, ce qui s'approche de règles de conception.

Postface

Le maître n'est ni un amant, ni un père, ni
un ami.
L'élève n'est ni une maîtresse, ni une fille,
ni une amie.
Et le lien qui les unit possède ses
caractéristiques propres. Avancer, seuls et
ensemble vers leur liberté.
Le maître offre tout ce qu'il possède à son
élève qui ne lui doit en retour qu'une seule
chose : son envol. Cet envol qui marque un
commencement pour l'un et un palier
pour l'autre. Sans envol, tout
enseignement est vain. L'élève reste à
jamais un pâle reflet du maître qui se
flétrit au sein d'une société qui se sclérose.

Le Pacte des Marchombres, L'Envol
Pierre Bottero

Si cette expérience doctorale m'a beaucoup apporté scientifiquement parlant, son apport sur le plan personnel n'en est pas moins négligeable. Vous avez probablement remarqué que des références à des romans de Pierre Bottero sont venues ponctuer tout mon manuscrit. N'y voyez pas là une anodine lubie.

Le Pacte des Marchombres est une saga de livres Fantasy écrite par Pierre Bottero, probablement l'auteur français le plus talentueux de notre génération. Pierre Bottero était doué pour raconter des histoires. Que ce soit à travers les deux trilogies d'Ewilan[198, 199, 200], la trilogie du Pacte des Marchombres[196], la trilogie L'Autre[201], ou ce qui devait devenir la trilogie Les Âmes Croisées[202], ce ne sont pas seulement des romans que nous offre Pierre Bottero mais des véritables leçons de vie. Souvent avec poésie, Pierre Bottero a créé des personnages qui savent inspirer et faire rêver ses lecteurs.

Si je me suis par le passé beaucoup reconnue dans Ewilan, une "dessinatrice" capable de rendre réel presque tout ce qu'elle imagine, je ne peux que m'identifier aujourd'hui à Ellana, qui s'épanouit à travers sa quête de liberté et d'harmonie. Si bien que lorsque je dois choisir un pseudonyme, je deviens Ellawin – le mélange parfait des deux personnages qui font de moi la personne que je suis aujourd'hui.

L'histoire du Pacte des Marchombres, c'est l'histoire d'Ellana. Ellana c'est tout d'abord cette petite fille qui se pose toujours plein de questions, et à qui ses parents apprennent qu'il existe toujours deux types de réponse : celle du savant et celle du poète. Ellana, c'est cette jeune fille qui en grandissant se met en quête de liberté et d'harmonie. Qui devient l'apprentie, pour une durée de trois ans, du meilleur des maîtres Marchombres de son époque, Jilano. Au fil des pages,

Ellana arpente, guidée par Jilano, la Voie des Marchombres. Si Jilano lui apprend des techniques de combat, il l'initie aussi à la poésie marchombre et lui transmet ses principes philosophiques. Toutes sortes d'épreuves initiatiques viennent ponctuer l'apprentissage d'Ellana : la Présentation, l'Anh-Ju, le Rentaï, l'Envol. Au cours de la Présentation, l'apprentie est jugée par le Conseil des Marchombres pour être apte à continuer son apprentissage. Réussir l'Anh-Ju permet à Ellana de devenir maître marchombre, d'enseigner à son tour la Voie à un apprenti, et de revendiquer le droit d'accéder à la greffe. Le Rentaï, c'est l'épreuve ultime des Marchombres. C'est une montagne dans laquelle un maître marchombre, ayant réussi l'épreuve de l'Anh-Ju, peut demander une greffe. La greffe n'est pas accordée à tous ceux qui la demandent, et seul le Rentaï – oui oui, la Montagne – décide de qui en est digne. L'Envol, finalement, marque la fin de l'apprentissage d'un élève, le moment où sa route et celle de son maître se séparent.

Si j'ai voulu accompagner ce manuscrit de références à Bottero, c'est pour rendre honneur à Ellana qui m'a accompagnée, à sa façon, pendant mes trois ans de doctorat. Inspirée par Ellana qui arpente la Voie du Marchombre, j'ai suivi ma propre Voie, celle du Chercheur. Si Ellana est à la quête de liberté et est guidée par l'harmonie, ma quête personnelle est celle de la connaissance et c'est la curiosité qui me pousse mille fois plus fort que ce que le vent pousse les nuages, là-haut[196]. J'ai eu la chance d'avoir été guidée par Antoine avec tout autant de lumière et de bienveillance que ce que Jilano a éclairé la route d'Ellana. Tout au long de mon parcours, j'ai pu constater que tous les apprentis chercheurs ne sont pas tous aussi chanceux que moi : j'en ai vu beaucoup se désintéresser de la Voie parce qu'ils ne voyaient plus sa beauté, parce qu'ils n'étaient pas accompagnés par quelqu'un capable d'éclairer chaque virage emprunté. Si à l'image des marchombres, l'Envol du doctorant marque la fin de son apprentissage, j'ai vu avec effarement énormément – trop – d'apprentis chercheurs prendre leur envol avec un soulagement tel qu'il est difficile de croire que le chemin parcouru par maître et élève jusque-là était agréable. Mon parcours n'a pas été parfait, je n'ai pas parcouru la plus belle des routes, mais j'en ai cependant apprécié presque chaque pas. Et si je suis consciente qu'il faut voir l'envol comme le début d'une nouvelle aventure, je ne peux cependant pas m'empêcher d'y voir la fin d'un plaisant voyage que je ne suis pas tant pressée de terminer.

Si l'obtention de la greffe représente l'épreuve ultime de la Voie des Marchombres, elle ne définit pas le Marchombre : le Marchombre est Marchombre, avec ou sans greffe. Je ne sais jusqu'où mon vent me guidera, mais une certitude demeure : que j'obtienne ou non un poste permanent dans l'ESR, épreuve ultime de la Voie des Chercheurs, je suis et resterai chercheuse et je ne cesserai jamais de me poser des questions.

Bibliographie

- ¹J. C. MAXWELL, "VIII. A dynamical theory of the electromagnetic field", Philosophical transactions of the Royal Society of London, 459-512 (1865).
- ²J. C. MAXWELL, "On physical lines of force", Philosophical magazine **90**, 11-23 (2010).
- ³L. RAYLEIGH, "The iridescent colours of birds and insects", Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **128**, 624-641 (1930).
- ⁴J. BARDEEN et W. H. BRATTAIN, "Physical principles involved in transistor action", Physical Review **75**, 1208 (1949).
- ⁵A. HUSSAIN, Y. S. MUHAMMAD, M. NAUMAN SAJID, I. HUSSAIN, A. MOHAMD SHOUKRY et S. GANI, "Genetic Algorithm for Traveling Salesman Problem with Modified Cycle Crossover Operator", Computational Intelligence and Neuroscience **2017**, 10.1155/2017/7430125 (2017).
- ⁶A. M. TURING, "Intelligent Machinery", (1948).
- ⁷J. H. HOLLAND, P. o. P. a. o. E. E. a. C. S. J. H. HOLLAND et S. L. i. H. R. M. HOLLAND, *Adaptation in Natural and Artificial Systems : An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence* (1992).
- ⁸C. LIN, "In memory of Charles Kao", Nature Photonics **12**, 715-717 (2018).
- ⁹J. D. JOANNOPOULOS, S. G. JOHNSON, J. N. WINN et R. D. MEADE, "Molding the flow of light", Princeton Univ. Press, Princeton, NJ [ua] (2008).
- ¹⁰P. LALANNE et G. M. MORRIS, "Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization", EN, JOSA A **13** (1996).
- ¹¹G. GRANET et B. GUIZAL, "Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization", EN, JOSA A **13**, 10.1364/JOSAA.13.001019 (1996).
- ¹²J. KENNEDY et R. EBERHART, "Particle swarm optimization", in Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks, t. 4 (1995).
- ¹³R. STORN et K. PRICE, *Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces* | SpringerLink, 1997.
- ¹⁴N. HANSEN et A. OSTERMEIER, "Completely Derandomized Self-Adaptation in Evolution Strategies", Evolutionary Computation **9**, Conference Name: Evolutionary Computation, 159-195 (2001).
- ¹⁵O. SIGMUND, "Topology optimization in multiphysics problems", in (American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1998).
- ¹⁶D. THOMSON, A. ZILKIE, J. E. BOWERS, T. KOMLJENOVIC, G. T. REED, L. VIVIEN, D. MARRIS-MORINI, E. CASSAN, L. VIROT, J.-M. FÉDÉLI et al., "Roadmap on silicon photonics", Journal of Optics **18**, 073003 (2016).

- ¹⁷G. KIZILTAS, D. PSYCHOUDAKIS, J. VOLAKIS et N. KIKUCHI, "Topology design optimization of dielectric substrates for bandwidth improvement of a patch antenna", en, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **51** (2003).
- ¹⁸P. I. BOREL, A. HARPØTH, L. H. FRANDSEN, M. KRISTENSEN, P. SHI, J. S. JENSEN et O. SIGMUND, "Topology optimization and fabrication of photonic crystal structures", EN, Optics Express **12** (2004).
- ¹⁹J. S. JENSEN et O. SIGMUND, "Systematic design of photonic crystal structures using topology optimization : Low-loss waveguide bends", Applied Physics Letters **84**, 10. 1063/1. 1688450 (2004).
- ²⁰S. MOLESKY, Z. LIN, A. Y. PIGGOTT, W. JIN, J. VUCKOVIC et A. W. RODRIGUEZ, "Inverse design in nanophotonics", Nature Photonics **12**, 659-670 (2018).
- ²¹D. MACIAS, E. R. MENDEZ et V. RUIZ-CORTES, "Inverse scattering with a wave-front-matching algorithm", J. Opt. Soc. Am. A **19**, 2064-2073 (2002).
- ²²D. MACIAS, G. OLAGUE et E. R. MENDEZ, "Inverse scattering with far-field intensity data : random surfaces that belong to a well-defined statistical class", Waves in Random and Complex Media **16**, 545-560 (2006).
- ²³A. TIKHONRAVOV, M. TRUBETSKOV et G. DeBELL, "Optical coating design approaches based on the needle optimization technique", Applied optics **46**, 704-710 (2007).
- ²⁴J. ZHANG et A. C. SANDERSON, "JADE : adaptive differential evolution with optional external archive", IEEE Transactions on evolutionary computation **13**, 945-958 (2009).
- ²⁵M. DORIGO et C. BLUM, "Ant colony optimization theory : A survey", Theoretical computer science **344**, 243-278 (2005).
- ²⁶S. DAS, S. S. MULLICK et P. N. SUGANTHAN, "Recent advances in differential evolution—an updated survey", Swarm and Evolutionary Computation **27**, 1-30 (2016).
- ²⁷D. BRATTON et J. KENNEDY, "Defining a standard for particle swarm optimization", in 2007 IEEE swarm intelligence symposium (IEEE, 2007), p. 120-127.
- ²⁸V. ARUNACHALAM, "Optimization using differential evolution", (2008).
- ²⁹N. DURAND, "Algorithmes Genetiques et autres methodes d'optimisation appliques a la gestion de trafic aerien", thèse de doct. (INPT, 2004).
- ³⁰P. BAUMEISTER, "Design of multilayer filters by successive approximations", JOSA **48** (1958).
- ³¹A. THELEN, "Equivalent Layers in Multilayer Filters", JOSA **56**, 10. 1364 / JOSA. 56. 001533 (1966).
- ³²A. THELEN, "Design of Optical Minus Filters", JOSA **61**, 10. 1364 / JOSA. 61. 000365 (1971).
- ³³J. H. APFEL, "Optical coating design with reduced electric field intensity", Applied Optics **16**, 10. 1364/A0. 16. 001880 (1977).
- ³⁴J. DOBROWOLSKI et D. LOWE, "Optical thin film synthesis program based on the use of Fourier transforms", Applied Optics **17** (1978).
- ³⁵A. V. TIKHONRAVOV et M. K. TRUBETSKOV, "Development of the needle optimization technique and new features of OptiLayer design software", in Optical Interference Coatings, t. 2253 (nov. 1994), p. 10-20.
- ³⁶A. V. TIKHONRAVOV, M. K. TRUBETSKOV et G. W. DeBELL, "Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings", Applied Optics **35**, 10. 1364/A0. 35. 005493 (1996).

- ³⁷R. MORF et R. E. KUNZ, "Dielectric Filter Optimization By Simulated Thermal Annealing", in , t. 1019 (fév. 1989).
- ³⁸R. H. MORF et R. E. KUNZ, "Dielectric filter optimization by simulated thermal annealing : a simulated zone-melting approach", in , t. 1270 (août 1990).
- ³⁹P. CHATON, P. PINSTON et J.-P. GAILLIARD, "Synthesis of optical coatings using a simulated annealing algorithm", in *Optical Interference Coatings*, t. 2253 (nov. 1994).
- ⁴⁰T. BOUDET, P. CHATON, L. HERAULT, G. GONON, L. JOUANET et P. KELLER, "Thin-film designs by simulated annealing", *Applied Optics* **35**, 10. 1364/AO.35.006219 (1996).
- ⁴¹J.-M. YANG et C.-Y. KAO, "An evolutionary algorithm for the synthesis of multilayer coatings at oblique light incidence", *Journal of Lightwave Technology* **19**, 10. 1109/50.920855 (2001).
- ⁴²I. CELANOVIC, F. O'SULLIVAN, M. ILAK, J. KASSAKIAN et D. PERREAULT, "Design and optimization of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications", *Optics Letters* **29**, 10. 1364/OL.29.000863 (2004).
- ⁴³M. GHEBREBRHAN, P. BERMEL, Y. AVNIEL, J. D. JOANNOPOULOS et S. G. JOHNSON, "Global optimization of silicon photovoltaic cell front coatings", *Optics express* **17** (2009).
- ⁴⁴A. GROSJEAN, A. SOUM-GLAUDE, P. NEVEU et L. THOMAS, "Comprehensive simulation and optimization of porous SiO₂ antireflective coating to improve glass solar transmittance for solar energy applications", *Solar Energy Materials and Solar Cells* **182**, 10. 1016/j.solmat.2018.03.040 (2018).
- ⁴⁵D. POITRAS et J. A. DOBROWOLSKI, "Toward perfect antireflection coatings. 2. Theory", *Applied Optics* **43**, 10. 1364/AO.43.001286 (2004).
- ⁴⁶S. LAROUCHE et L. MARTINU, "OpenFilters : open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters", *Applied Optics* **47**, 10. 1364/AO.47.00C219 (2008).
- ⁴⁷J. D. T. KRUSCHWITZ, V. PERVAK, J. KECK, I. BOLSHAKOV, Z. GERIG, F. LEMARCHAND, K. SATO, W. SOUTHWELL, M. SUGIURA, M. TRUBETSKOV et W. YUAN, "Optical interference coating design contest 2016 : a dispersive mirror and coating uniformity challenge", *Applied Optics* **56**, 10. 1364/AO.56.00C151 (2017).
- ⁴⁸D. POITRAS, L. LI, M. JACOBSON et C. COOKSEY, "Manufacturing problem contest [invited]", *Applied Optics* **56**, 10. 1364/AO.56.0000C1 (2017).
- ⁴⁹Y. ELESIN, B. LAZAROV, J. JENSEN et O. SIGMUND, *Design of robust and efficient photonic switches using topology optimization - ScienceDirect*, 2012.
- ⁵⁰Z. LIN, X. LIANG, M. LONČAR, S. G. JOHNSON et A. W. RODRIGUEZ, "Cavity-enhanced second-harmonic generation via nonlinear-overlap optimization", *Optica* **3**, 10. 1364/OPTICA.3.000233 (2016).
- ⁵¹E. YABLONOVITCH et T. GMITTER, "Photonic band structure : The face-centered-cubic case", *Physical Review Letters* **63**, 1950 (1989).
- ⁵²M. DOOSJE, B. J. HOENDERS et J. KNOESTER, "Photonic bandgap optimization in inverted fcc photonic crystals", *JOSA B* **17**, 10. 1364/JOSAB.17.000600 (2000).
- ⁵³E. BOR, M. TURDUEV et H. KURT, "Differential evolution algorithm based photonic structure design : numerical and experimental verification of subwavelength focusing of light", *Scientific Reports* **6**, 10. 1038/srep30871 (2016).
- ⁵⁴V. EGOROV, M. EITAN et J. SCHEUER, "Genetically optimized all-dielectric metasurfaces", *Optics Express* **25**, 10. 1364/OE.25.002583 (2017).

- ⁵⁵A. HÅKANSSON et J. SÁNCHEZ-DEHESA, "Inverse designed photonic crystal de-multiplex waveguide coupler", *Optics Express* **13**, 10.1364/OPEX.13.005440 (2005).
- ⁵⁶S. PREBLE, M. LIPSON et H. LIPSON, "Two-dimensional photonic crystals designed by evolutionary algorithms", *Applied Physics Letters*, 10.1063/1.1862783 (2005).
- ⁵⁷B. SHEN, P. WANG, R. POLSON et R. MENON, "Ultra-high-efficiency metamaterial polarizer", *Optica*, 10.1364/OPTICA.1.000356 (2014).
- ⁵⁸S. JAFAR-ZANJANI, S. INAMPUDI et H. MOSALLAEI, "Adaptive Genetic Algorithm for Optical Metasurfaces Design", *Scientific Reports* **8**, 10.1038/s41598-018-29275-z (2018).
- ⁵⁹J. JIANG, J. CAI, G. P. NORDIN et L. LI, "Parallel microgenetic algorithm design for photonic crystal and waveguide structures", *Optics Letters* **28**, 10.1364/OL.28.002381 (2003).
- ⁶⁰M. BURGER, S. J. OSHER et E. YABLONOVITCH, "Inverse Problem Techniques for the Design of Photonic Crystals", *IEICE TRANS. ELECTRON.* (2004).
- ⁶¹P. I. BOREL, L. H. FRANDSEN, A. HARPØTH, M. KRISTENSEN, J. S. JENSEN et O. SIGMUND, "Topology optimised broadband photonic crystal Y-splitter", *Electronics Letters* **41** (2005).
- ⁶²D. ENGLUND, I. FUSHMAN et J. VUCKOVIC, "General recipe for designing photonic crystal cavities", *Optics Express* **13**, 10.1364/OPEX.13.005961 (2005).
- ⁶³J. S. JENSEN et O. SIGMUND, "Topology optimization of photonic crystal structures : a high-bandwidth low-loss T-junction waveguide", *Journal of the Optical Society of America B* **22**, 10.1364/JOSAB.22.001191 (2005).
- ⁶⁴C. Y. KAO, S. OSHER et E. YABLONOVITCH, "Maximizing band gaps in two-dimensional photonic crystals by using level set methods", *Applied Physics B* **81**, 10.1007/s00340-005-1877-3 (2005).
- ⁶⁵W. R. FREI, D. A. TORTORELLI et H. T. JOHNSON, "Geometry projection method for optimizing photonic nanostructures", *Optics Letters* **32**, 10.1364/OL.32.000077 (2007).
- ⁶⁶H. MEN, N. NGUYEN, R. FREUND, P. PARRILO et J. PERAIRE, *Bandgap optimization of two-dimensional photonic crystals using semidefinite programming and subspace methods*, 2010.
- ⁶⁷F. WANG, J. S. JENSEN et O. SIGMUND, *High-performance slow light photonic crystal waveguides with topology optimized or circular-hole based material layouts - ScienceDirect*, 2012.
- ⁶⁸Z. LIN, A. PICK, M. LONČAR et A. W. RODRIGUEZ, "Enhanced Spontaneous Emission at Third-Order Dirac Exceptional Points in Inverse-Designed Photonic Crystals", *Physical Review Letters* **117** (2016).
- ⁶⁹D. SELL, J. YANG, S. DOSHAY, R. YANG et J. A. FAN, *Large-Angle, Multifunctional Metagratings Based on Freeform Multimode Geometries | Nano Letters*, 2017.
- ⁷⁰M. DANAIE, R. NASIRI FAR et A. DIDEBAN, "Design of a High-Bandwidth Y-Shaped Photonic Crystal Power Splitter for TE Modes", *International Journal of Optics and Photonics* **12**, 10.29252/ijop.12.1.33 (2018).
- ⁷¹F. WANG, R. E. CHRISTIANSEN, Y. YU, J. MØRK et O. SIGMUND, "Maximizing the quality factor to mode volume ratio for ultra-small photonic crystal cavities", *Applied Physics Letters* **113**, 10.1063/1.5064468 (2018).
- ⁷²J. C. C. MAK, C. SIDERIS, J. JEONG, A. HAJIMIRI et J. K. S. POON, "Binary particle swarm optimized power splitters in a standard foundry silicon photonic platform", *Optics Letters* **41**, 10.1364/OL.41.003868 (2016).
- ⁷³S. MARTIN, J. RIVORY et M. SCHOENAUER, "Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms", *Applied Optics* **34**, 10.1364/AO.34.002247 (1995).

- ⁷⁴J.-M. YANG, J.-T. HORNG, C.-J. LIN et C.-Y. KAO, "Optical Coating Designs Using the Family Competition Evolutionary Algorithm", *Evolutionary Computation* **9**, 10. 1162/10636560152642850 (2001).
- ⁷⁵T. FEICHTNER, O. SELIG, M. KIUNKE et B. HECHT, "Evolutionary Optimization of Optical Antennas", *Physical Review Letters* **109**, Publisher: American Physical Society, 10. 1103/PhysRevLett.109.127701 (2012).
- ⁷⁶T. FEICHTNER, O. SELIG et B. HECHT, *OSA | Plasmonic nanoantenna design and fabrication based on evolutionary optimization*, 2017.
- ⁷⁷M. D. HUNTINGTON, L. J. LAUHON et T. W. ODOM, "Subwavelength Lattice Optics by Evolutionary Design", *Nano Letters* **14**, Publisher: American Chemical Society, 10. 1021/nl5040573 (2014).
- ⁷⁸A. GONDARENKO, S. PREBLE, J. ROBINSON, L. CHEN, H. LIPSON et M. LIPSON, "Spontaneous emergence of periodic patterns in a biologically inspired simulation of photonic structures", *Physical review letters* **96**, 143904 (2006).
- ⁷⁹R. HAUPT, "An introduction to genetic algorithms for electromagnetics", *IEEE Antennas and Propagation Magazine* **37**, 10. 1109/74.382334 (1995).
- ⁸⁰HOSCHEL et LAKSHMINARAYANAN, *Genetic algorithms for lens design : a review | SpringerLink*, 2018.
- ⁸¹A. V. POGREBANYAKOV, J. A. BOSSARD, J. P. TURPIN, J. D. MUSGRAVES, H. J. SHIN, C. RIVERO-BALEINE, N. PODRAZA, K. A. RICHARDSON, D. H. WERNER et T. S. MAYER, "Reconfigurable near-IR metasurface based on Ge₂Sb₂Te₅ phase-change material", *Optical Materials Express* **8**, 10. 1364/OME.8.002264 (2018).
- ⁸²Y. JIAO, S. FAN et D. MILLER, "Systematic Photonic Crystal Device Design : Global and Local Optimization and Sensitivity Analysis", *IEEE Journal of Quantum Electronics* **42**, 10. 1109/JQE.2005.862038 (2006).
- ⁸³A. OSKOOL, A. MUTAPCIC, S. NODA, J. D. JOANNOPOULOS, S. P. BOYD et S. G. JOHNSON, "Robust optimization of adiabatic tapers for coupling to slow-light photonic-crystal waveguides", *Optics Express* **20**, 10. 1364/OE.20.021558 (2012).
- ⁸⁴A. Y. PIGGOTT, J. LU, K. G. LAGOUDAKIS, J. PETYKIEWICZ, T. M. BABINEC et J. VUČKOVIĆ, "Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer", *en, Nature Photonics* **9** (2015).
- ⁸⁵M. P. BENDSOE et O. SIGMUND, *Topology Optimization : Theory, Methods, and Applications* (Springer Science & Business Media, déc. 2003).
- ⁸⁶M. B. GILES et N. A. PIERCE, "An introduction to the adjoint approach to design", *Flow, turbulence and combustion* **65**, 393-415 (2000).
- ⁸⁷J. RIISHEDE et O. SIGMUND, "Inverse design of dispersion compensating optical fiber using topology optimization", *JOSA B* **25**, 10. 1364/JOSAB.25.000088 (2008).
- ⁸⁸A. ERENTOK et O. SIGMUND, "Topology Optimization of Sub-Wavelength Antennas", *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **59**, 10. 1109/TAP.2010.2090451 (2011).
- ⁸⁹M. B. DÜHRING et O. SIGMUND, "Optimization of extraordinary optical absorption in plasmonic and dielectric structures", *JOSA B* **30**, 10. 1364/JOSAB.30.001154 (2013).
- ⁹⁰L. F. FRELLSEN, Y. DING, O. SIGMUND et L. H. FRANDSEN, "Topology optimized mode multiplexing in silicon-on-insulator photonic wire waveguides", *Optics Express* **24**, 10. 1364/OE.24.016866 (2016).

- ⁹¹J. S. JENSEN et O. SIGMUND, "Topology optimization for nano-photonics", *Laser & Photonics Reviews* **5**, 10. 1002/lpor.201000014 (2011).
- ⁹²O. SIGMUND, "On the usefulness of non-gradient approaches in topology optimization", *Structural and Multidisciplinary Optimization* **43**, 10. 1007/s00158-011-0638-7 (2011).
- ⁹³L. SU, D. VERCRUYSE, J. SKARDA, N. V. SAPRA, J. A. PETYKIEWICZ et J. VUČKOVIĆ, "Nanophotonic inverse design with SPINS : Software architecture and practical considerations", *Applied Physics Reviews* **7**, 011407 (2020).
- ⁹⁴A. M. TURING, "Computing machinery and intelligence (1950)", *The Essential Turing : the Ideas That Gave Birth to the Computer Age*, 433-464 (2012).
- ⁹⁵S. KIRKPATRICK, C. GELATT JR et M. VECCHI, *Optimization by Simulated Annealing*, 1983.
- ⁹⁶M. DORIGO, "Optimization, Learning and Natural Algorithms", Ph.D. Thesis, Politecnico di Milano (1992).
- ⁹⁷N. J. RADCLIFFE et P. D. SURRY, "Formal Memetic Algorithms", in *Evolutionary Computing : Aisb Workshop* (1994).
- ⁹⁸S. AI et Y. WANG, "Application of Improved Genetic Algorithms in Structural Optimization Design", in *Information and Management Engineering* (2011).
- ⁹⁹Z. W. GEEM, J. H. KIM et G. LOGANATHAN, "A New Heuristic Optimization Algorithm : Harmony Search", *SIMULATION* **76**, 10. 1177/003754970107600201 (2001).
- ¹⁰⁰S. NAKRANI et C. TOVEY, "On Honey Bees and Dynamic Server Allocation in Internet Hosting Centers", *Adaptive Behavior* **12**, 10. 1177/105971230401200308 (2004).
- ¹⁰¹T. BACK, U. HAMMEL et H.-P. SCHWEFEL, "Evolutionary computation : comments on the history and current state", *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **1**, 10. 1109/4235.585888 (1997).
- ¹⁰²J. ZHANG, V. AVASARALA, A. C. SANDERSON et T. MULLEN, "Differential evolution for discrete optimization : An experimental study on Combinatorial Auction problems", in *2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation (IEEE World Congress on Computational Intelligence)* (juin 2008).
- ¹⁰³C. DENG, B. ZHAO, Y. YANG et A. DENG, "Novel Binary Differential Evolution Algorithm for Discrete Optimization", in *2009 Fifth International Conference on Natural Computation*, t. 4 (août 2009).
- ¹⁰⁴V. VEGH, G. PIERENS et Q. TIENG, "A variant of differential evolution for discrete optimization problems requiring mutually distinct variables", *International Journal of Innovative Computing, Information and Control* **7** (2011).
- ¹⁰⁵S. RAHNAMAYAN, H. TIZHOOSH et M. SALAMA, *Quasi-Oppositional Differential Evolution* (sept. 2007).
- ¹⁰⁶V. BERTHIER, "Progressive Differential Evolution on Clustering Real World Problems", in *Artificial Evolution* (2016).
- ¹⁰⁷H.-G. BEYER, *Actuator Noise in Recombinant Evolution Strategies on General Quadratic Fitness Models* (juin 2004).
- ¹⁰⁸N. HANSEN, *The CMA Evolution Strategy : A Comparing Review* | SpringerLink, 2006.
- ¹⁰⁹R. ROS et N. HANSEN, "A Simple Modification in CMA-ES Achieving Linear Time and Space Complexity", in *Parallel Problem Solving from Nature – PPSN X*, t. 5199 (2008).

- ¹¹⁰H.-G. BEYER, M. DOBLER, C. HÄMMERLE et P. MASSER, “On strategy parameter control by Meta-ES”, in (2009).
- ¹¹¹B. DOERR, H. P. LE, R. MAKHMARA et T. D. NGUYEN, “Fast genetic algorithms”, in Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (juill. 2017).
- ¹¹²D.-C. DANG et P. K. LEHRE, “Self-adaptation of Mutation Rates in Non-elitist Populations”, arXiv :1606.05551 [cs, q-bio] (2016).
- ¹¹³R. MARTINEZ-CANTIN, “BayesOpt : A Bayesian Optimization Library for Nonlinear Optimization, Experimental Design and Bandits”, (2014).
- ¹¹⁴J. BERGSTRÄ, B. KOMER, C. ELIASMITH, D. YAMINS et D. D. COX, “Hyperopt : a Python library for model selection and hyperparameter optimization”, Computational Science & Discovery 8, 10. 1088/1749-4699/8/1/014008 (2015).
- ¹¹⁵P. BENNET, C. DOERR, A. MOREAU, J. RAPIN, F. TEYTAUD et O. TEYTAUD, “Nevergrad : Black-Box Optimization Platform”, 10. 1145/3460310.3460312 (2021).
- ¹¹⁶X. LI, K. TANG, M. N. OMIIDVAR, Z. YANG et K. QIN, “Benchmark Functions for the CEC’2013 Special Session and Competition on Large-Scale Global Optimization”, (2013).
- ¹¹⁷N. I. M. GOULD, D. ORBAN et P. L. TOINT, “CUTer and SifDec : A constrained and unconstrained testing environment, revisited”, 29, 10. 1145/962437.962439 (2003).
- ¹¹⁸GOULD, ORBAN et TOINT, *CUTEst : a Constrained and Unconstrained Testing Environment with safe threads for mathematical optimization* | SpringerLink, 2014.
- ¹¹⁹G. BROCKMAN, V. CHEUNG, L. PETERSSON, J. SCHNEIDER, J. SCHULMAN, J. TANG et W. ZAREMBA, *OpenAI Gym*, juin 2016.
- ¹²⁰J.-M. YANG et C.-Y. KAO, “Integrating adaptive mutations and family competition into genetic algorithms as function optimizer”, Soft Computing 4, 10. 1007/s005000000045 (2000).
- ¹²¹P. A. BOSMAN, J. GRAHL et D. THIERENS, “AMaLGaM IDEAs in noisy black-box optimization benchmarking”, in Proceedings of the 11th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation conference - GECCO ’09 (2009).
- ¹²²N. HANSEN, A. AUGER, R. ROS, S. FINCK et P. POSIK, *Comparing results of 31 algorithms from the black-box optimization benchmarking BBOB-2009* | Proceedings of the 12th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation, 2010.
- ¹²³P. KERSCHKE, H. H. HOOS, F. NEUMANN et H. TRAUTMANN, *Automated Algorithm Selection : Survey and Perspectives*, rapp. tech. (nov. 2018).
- ¹²⁴T. BARTZ-BEIELSTEIN, C. DOERR, D. V. D. BERG, J. BOSSEK, S. CHANDRASEKARAN, T. EFTIMOV, A. FISCHBACH, P. KERSCHKE, W. LA CAVA, M. LOPEZ-IBANEZ et al., “Benchmarking in optimization : Best practice and open issues”, arXiv preprint arXiv :2007.03488 (2020).
- ¹²⁵A. S. LUCCIONI et D. ROLNICK, “Bugs in the Data : How ImageNet Misrepresents Biodiversity”, arXiv preprint arXiv :2208.11695 (2022).
- ¹²⁶M. HUTSON, *Artificial intelligence faces reproducibility crisis*, 2018.
- ¹²⁷T. WEISE, Z. WU et M. WAGNER, “An Improved Generic Bet-and-Run Strategy for Speeding Up Stochastic Local Search”, arXiv :1806.08984 [cs, math] (2018).
- ¹²⁸L. WANG, R. FONSECA et Y. TIAN, “Learning Search Space Partition for Black-box Optimization using Monte Carlo Tree Search”, in Advances in Neural Information Processing Systems, t. 33 (2020).

- ¹²⁹C. BROWNE, M. STEPHENSON, É. PIETTE et D. J. N. J. SOEMERS, “A Practical Introduction to the Ludii General Game System”, in *Advances in Computer Games* (2020).
- ¹³⁰K. M. MALAN et A. P. ENGELBRECHT, “A survey of techniques for characterising fitness landscapes and some possible ways forward”, *Information Sciences* **241**, 10.1016/j.ins.2013.04.015 (2013).
- ¹³¹P.-I. SCHENIDER, X. G. SANTIAGO, V. SOLTWISCH, M. HAMMERSCHMIDT, S. BURGER et C. ROCKSTUHL, *Benchmarking Five Global Optimization Approaches for Nano-optical Shape Optimization and Parameter Reconstruction* | *ACS Photonics*, 2019.
- ¹³²J. RAPIN et O. TEYTAUD, *Nevergrad - A gradient-free optimization platform*, original-date : 2018-11-21T00:33:17Z, 2018.
- ¹³³M. A. BARRY, V. BERTHIER, B. D. WILTS, M.-C. CAMBOURIEUX, P. BENNET, R. POLLÈS, O. TEYTAUD, E. CENTENO, N. BIAIS et A. MOREAU, “Evolutionary algorithms converge towards evolved biological photonic structures”, en, *Scientific Reports* **10** (2020).
- ¹³⁴K. SÖRENSEN, “Metaheuristics—the metaphor exposed”, *International Transactions in Operational Research* **22**, 10.1111/itor.12001 (2015).
- ¹³⁵P. VUKUSIC et J. R. SAMBLES, “Photonic structures in biology”, en, **424** (2003).
- ¹³⁶S. S. PANDA, H. S. VYAS et R. S. HEGDE, “Robust inverse design of all-dielectric metasurface transmission-mode color filters”, *Optical Materials Express* **10**, 3145-3159 (2020).
- ¹³⁷H. A. MACLEOD, *Thin-film optical filters* (CRC press, 2001).
- ¹³⁸J. DEFRANCE, C. LEMAÎTRE, R. AJIB, J. BENEDICTO, E. MALLET, R. POLLÈS, J.-P. PLUMEY, M. MIHAÏLOVIC, E. CENTENO, C. CIRACÌ et al., “Moosh : A numerical swiss army knife for the optics of multilayers in octave/matlab”, *Journal of Open Research Software* **4** (2016).
- ¹³⁹N. HANSEN et A. OSTERMEIER, “Completely Derandomized Self-Adaptation in Evolution Strategies”, *Evolutionary Computation* **11** (2003).
- ¹⁴⁰O. TEYTAUD et S. GELLY, “DCMA : yet another derandomization in covariance-matrix-adaptation”, in *Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation* (2007), p. 955-963.
- ¹⁴¹NELDER et MEAD, *Simplex Method for Function Minimization*, 1965.
- ¹⁴²A. NEVILLE, “Metallic gold and silver colours in some insect cuticles”, *Journal of Insect Physiology* **23** (1977).
- ¹⁴³P. VUKUSIC, J. R. SAMBLES, C. R. LAWRENCE et R. J. WOOTTON, “Quantified interference and diffraction in single Morpho butterfly scales”, *Proceedings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences* **266**, 1403-1411 (1999).
- ¹⁴⁴M. A. GIRALDO, S. YOSHIOKA, C. LIU et D. G. STAVENGA, “Coloration mechanisms and phylogeny of Morpho butterflies”, *Journal of Experimental Biology* **219**, 3936-3944 (2016).
- ¹⁴⁵S. KINOSHITA, S. YOSHIOKA et J. MIYAZAKI, “Physics of structural colors”, en, *Reports on Progress in Physics* **71**, 10.1088/0034-4885/71/7/076401 (2008).
- ¹⁴⁶D. MAYSTRE, “Diffraction gratings”, en, *Scholarpedia* **7**, 11403 (2012).
- ¹⁴⁷M. BARRY, V. BERTHIER, B. WILTS, M.-C. CAMBOURIEUX, P. BENNET, R. POLLÈS, O. TEYTAUD, E. CENTENO, N. BIAIS et A. MOREAU, “Evolutionary algorithms converge towards evolved biological photonic structures”, *Scientific Reports* **10**, 12024 (2020).
- ¹⁴⁸J. R. KOZA, *Genetic programming : A paradigm for genetically breeding populations of computer programs to solve problems*, t. 34 (Stanford University, Department of Computer Science Stanford, CA, 1990).

- ¹⁴⁹J. KEATS, *John Koza Has Built an Invention Machine*, 2006.
- ¹⁵⁰R. SANTBERGEN, J. GOUD, M. ZEMAN, J. van ROOSMALEN et R. C. van ZOLINGEN, "The AM1. 5 absorption factor of thin-film solar cells", *Solar energy materials and solar cells* **94**, 715-723 (2010).
- ¹⁵¹A. MACLEOD, "The Quarterwave Stack : 1 Early History", *Bulletin, Society of Vacuum Coaters*, Issue Summer, 22-27 (2012).
- ¹⁵²A. MACLEOD, "The Quarterwave Stack : 2 Properties", *Bulletin, Society of Vacuum Coaters*, Issue Fall, 16-21 (2012).
- ¹⁵³A. MACLEOD, "The Quarterwave Stack : 3 A building block", *Bulletin, Society of Vacuum Coaters*, Issue Spring, 22-27 (2013).
- ¹⁵⁴A. R. PARKER, R. C. MCPHEDRAN, D. R. MCKENZIE, L. C. BOTTEN et N. NICOROVICI, "Aphrodite's iridescence", *Nature* **409**, 36-37 (2001).
- ¹⁵⁵A. FARHAOUI, A. BOUSQUET, R. SMAALI, A. MOREAU, E. CENTENO, J. CELLIER, C. BERNARD, R. RAPEGNO, F. RÉVERET et E. TOMASELLA, "Reactive gas pulsing sputtering process, a promising technique to elaborate silicon oxynitride multilayer nanometric antireflective coatings", *Journal of Physics D : Applied Physics* **50**, 015306 (2016).
- ¹⁵⁶A. V. TIKHONRAVOV, M. K. TRUBETSKOV, T. V. AMOTCHKINA et J. DOBROWOLSKI, "Estimation of the average residual reflectance of broadband antireflection coatings", *Applied optics* **47**, C124-C130 (2008).
- ¹⁵⁷S. YU, C.-W. QIU, Y. CHONG, S. TORQUATO et N. PARK, "Engineered disorder in photonics", *Nature Reviews Materials*, 1-18 (2020).
- ¹⁵⁸P. VELHA, J.-P. HUGONIN et P. LALANNE, "Compact and efficient injection of light into band-edge slow-modes", *Optics Express* **15**, 6102-6112 (2007).
- ¹⁵⁹C. SAUVAN, G. LECAMP, P. LALANNE et J. HUGONIN, "Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in Photonic Crystal microcavities", *Opt. Express* **13**, 245-255 (2005).
- ¹⁶⁰E. CENTENO et D. CASSAGNE, "Graded photonic crystals", *Optics letters* **30**, 2278-2280 (2005).
- ¹⁶¹A. MOREAU, C. LAFARGE, N. LAURENT, K. EDEE et G. GRANET, "Enhanced transmission of slit arrays in an extremely thin metallic film", *Journal of Optics A : Pure and Applied Optics* **9**, 165 (2007).
- ¹⁶²A. MOREAU, R. SMAALI, E. CENTENO et C. SEASSAL, "Optically optimal wavelength-scale patterned ITO/ZnO composite coatings for thin film solar cells", *Journal of Applied Physics* **111**, 083102-083102 (2012).
- ¹⁶³P. BENNET, P. JUILLET, S. IBRAHIM, V. BERTHIER, M. A. BARRY, F. ç. RÉVERET, A. BOUSQUET, O. TEYTAUD, E. CENTENO et A. MOREAU, "Analysis and fabrication of antireflective coating for photovoltaics based on a photonic-crystal concept and generated by evolutionary optimization", *Phys. Rev. B* **103**, 125135 (2021).
- ¹⁶⁴B. LIEBERG, C. NYLANDER et I. LUNSTRÖM, "Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing", *Sensors and actuators* **4**, 299-304 (1983).
- ¹⁶⁵P. BERINI, "Bulk and surface sensitivities of surface plasmon waveguides", *New Journal of Physics* **10**, 105010 (2008).
- ¹⁶⁶M. PILIARIK et J. HOMOLA, "Surface plasmon resonance (SPR) sensors : approaching their limits?", *Optics express* **17**, 16505-16517 (2009).

- ¹⁶⁷V. N. KONOPSKY et E. V. ALIEVA, "Long-range propagation of plasmon polaritons in a thin metal film on a one-dimensional photonic crystal surface", *Physical Review Letters* **97**, 253904 (2006).
- ¹⁶⁸D. SARID, "Long-Range Surface-Plasma Waves on Very Thin Metal Films", *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1927-1930 (1981).
- ¹⁶⁹A. E. CRAIG, G. A. OLSON et D. SARID, "Experimental observation of the long-range surface-plasmon polariton", *Opt. Lett.* **8**, 380-382 (1983).
- ¹⁷⁰V. N. KONOPSKY et E. V. ALIEVA, "Photonic crystal surface waves for optical biosensors", *Analytical chemistry* **79**, 4729-4735 (2007).
- ¹⁷¹V. N. KONOPSKY, "Plasmon-polariton waves in nanofilms on one-dimensional photonic crystal surfaces", *New Journal of Physics* **12**, 093006 (2010).
- ¹⁷²F. KRAYZEL, R. POLLÈS, A. MOREAU, M. MIHAILOVIC et G. GRANET, "Simulation and analysis of exotic non-specular phenomena", *Journal of the European Optical Society : Rapid publications* **5**, 10025 (2010).
- ¹⁷³R. MARCHETTI, C. LACAVA, L. CARROLL, K. GRADKOWSKI et P. MINZIONI, "Coupling strategies for silicon photonics integrated chips", *Photon. Res.* **7**, 201-239 (2019).
- ¹⁷⁴G. J. KRISHNA et V. RAVI, "Large Scale Global Optimization by Hybrid Evolutionary Computation", *arXiv :1910.03799 [cs]*, *arXiv : 1910.03799* (2019).
- ¹⁷⁵J. RAPIN, M. GALLAGHER, P. KERSCHKE, M. PREUSS et O. TEYTAUD, "Exploring the MLDA benchmark on the nevergrad platform", in *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*, GECCO '19 (juill. 2019), p. 1888-1896.
- ¹⁷⁶L. MEUNIER, H. RAKOTOARISON, P. K. WONG, B. ROZIERE, J. RAPIN, O. TEYTAUD, A. MOREAU et C. DOERR, "Black-Box Optimization Revisited : Improving Algorithm Selection Wizards through Massive Benchmarking", *arXiv :2010.04542 [cs]*, *arXiv : 2010.04542* (2021).
- ¹⁷⁷J. LIU, A. MOREAU, M. PREUSS, B. ROZIERE, J. RAPIN, F. TEYTAUD et O. TEYTAUD, "Versatile Black-Box Optimization", *arXiv :2004.14014 [cs]*, *arXiv : 2004.14014* (2020).
- ¹⁷⁸*Nevergrad Dashboard*, 14 sept. 2021.
- ¹⁷⁹J. RAPIN, P. BENNET, E. CENTENO, D. HAZIZA, A. MOREAU et O. TEYTAUD, "Open Source Evolutionary Structured Optimization", in *Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion* (Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2020), p. 1599-1607.
- ¹⁸⁰*Open Optimization Competition 2021*, 14 sept. 2021.
- ¹⁸¹*IOHprofiler*, en-US, 14 sept. 2021.
- ¹⁸²*MuJoCo*, 14 sept. 2021.
- ¹⁸³*FSMOSCA, Lakas*, original-date : 2020-10-10T03 :30 :39Z, juill. 2021.
- ¹⁸⁴*ANDREI, muzero-test3*, original-date : 2020-10-03T17 :10 :52Z, oct. 2020.
- ¹⁸⁵*Open Optimization Competition 2022*.
- ¹⁸⁶E. CENTENO, A. FARAHOU, R. SMAALI, A. BOUSQUET, F. RÉVERET, O. TEYTAUD, A. MOREAU et al., "Ultra thin anti-reflective coatings designed using Differential Evolution", *arXiv preprint arXiv :1904.02907* (2019).
- ¹⁸⁷P. BENNET, E. CENTENO, J. RAPIN, O. TEYTAUD et A. MOREAU, "The photonics and ARCoating testbeds in Nevergrad", working paper or preprint, mai 2020.

- ¹⁸⁸M. LLC, *SPINS-B 0.0.2*, (2022) <https://github.com/stanfordnqp/spins-b> (visité le 31/08/2022).
- ¹⁸⁹L. SU, D. VERCRUYSE, J. SKARDA, N. SAPRA, J. PETYKIEWICZ et J. VUCKOVIC, *Nanophotonic Inverse Design with SPINS : Software Architecture and Practical Considerations*, oct. 2019.
- ¹⁹⁰C. M. LALAU-KERALY, S. BHARGAVA, O. D. MILLER et E. YABLONOVITCH, "Adjoint shape optimization applied to electromagnetic design", EN, *Optics Express* **21** (2013).
- ¹⁹¹C. LIU DONG et N. JORGE, "On the limited memory BFGS method for large scale optimization", *Mathematical programming* **45**, 503-528 (1989).
- ¹⁹²L. SU, D. VERCRUYSE, J. SKARDA, N. V. SAPRA, J. A. PETYKIEWICZ et J. VUCKOVIC, *Nanophotonic Inverse Design with SPINS : Software Architecture and Practical Considerations*, 2019.
- ¹⁹³P. BENNET, C. DOERR, A. MOREAU, J. RAPIN, F. TEYTAUD et O. TEYTAUD, "Nevergrad : black-box optimization platform", *ACM SIGEVOlution* **14**, 8-15 (2021).
- ¹⁹⁴B. DOERR, C. DOERR et J. LENGELER, "Self-Adjusting Mutation Rates with Provably Optimal Success Rules", in *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO '19* (2019), p. 1479-1487.
- ¹⁹⁵O. TEYTAUD, *This fork : adding black-box optimization in Spins-B*, (2022) <https://github.com/teytaud/spins-b/> (visité le 31/08/2022).
- ¹⁹⁶P. BOTTERO, *Le pacte des marchombres* (Rageot, 2009).
- ¹⁹⁷*Stockfish (chess)*, en, sept. 2021.
- ¹⁹⁸P. BOTTERO, *D'un monde à l'autre* (Rageot éditeur, 2006).
- ¹⁹⁹P. BOTTERO, *Les frontières de glace* (Rageot Editeur, 2006).
- ²⁰⁰P. BOTTERO, *L'île du destin* (Rageot Editeur, 2006).
- ²⁰¹P. BOTTERO, *Le souffle de la hyène* (Rageot Editeur, 2009).
- ²⁰²P. BOTTERO, *Les Âmes croisées*, fr, Google-Books-ID : BMsOyqGE8QQC (Rageot Editeur, mars 2011).



Formalisme des admittances

Les coefficients de réflexion et de transmission d'une onde à travers un matériau peuvent se calculer via différents formalismes. Nous présentons ici le formalisme développé par Angus Macleod dans son ouvrage *Thin-Film Optical Filters* [137].

Equations de Maxwell et définition générale de l'admittance.

Une onde électromagnétique obéit aux équations de Maxwell définies par

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (\text{A.1})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (\text{A.2})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \quad (\text{A.3})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (\text{A.4})$$

où $\vec{H}$ et $\vec{E}$ sont les champs magnétique et électrique, $\vec{j}$ le courant de densité, $\vec{D}$ et $\vec{B}$ les vecteurs induction électrique et magnétique, et ρ la densité de charge. Nous rajoutons à ces équations les relations constitutives du milieu, données par

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (\text{A.5})$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \epsilon = \epsilon_r \epsilon_0, \quad (\text{A.6})$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}, \mu = \mu_r \mu_0, \quad (\text{A.7})$$

avec σ la conductivité électrique du milieu, et ϵ_r et ϵ_0 les permittivités relative du milieu et du vide. De même, μ_r et μ_0 sont les perméabilités relative du milieu et du vide. Les perméabilité et permittivité du vide sont liées par la relation

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2}. \quad (\text{A.8})$$

Considérons un milieu sans charge, donc pour lequel $\rho = 0$:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho = 0 = \epsilon \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \epsilon (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) = 0. \quad (\text{A.9})$$

L'expression A.2 implique

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 E = -\frac{\partial(\mu \vec{\nabla} \times \vec{H})}{\partial t} \quad (\text{A.10})$$

$$= -\mu \frac{\partial}{\partial t} (\vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}) \quad (\text{A.11})$$

$$= -\mu \frac{\partial}{\partial t} (\sigma \vec{E} + \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (\text{A.12})$$

$$= -\mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (\text{A.13})$$

i.e.,

$$\vec{\nabla}^2 E = \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (\text{A.14})$$

Une expression similaire pour $\vec{H}$ est obtenue en déroulant le même raisonnement. Considérons une onde plane polarisée linéairement de la forme :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega(t-z/v)}, \quad (\text{A.15})$$

qui se propage selon la direction z avec une vitesse v . $\vec{E}_0$ est le vecteur d'amplitude et ω est la pulsation de cette onde. Pour que $\vec{E}$ soit une solution de l'équation A.14, il faut que

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \omega^2 \epsilon \mu - i \omega \mu \sigma, \quad (\text{A.16})$$

avec

$$c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}. \quad (\text{A.17})$$

En multipliant l'équation A.16 par A.17, et en divisant par ω^2 , on obtient

$$\frac{c^2}{v^2} = \frac{\epsilon \mu}{\epsilon_0 \mu_0} - i \frac{\mu \sigma}{\omega \epsilon_0 \mu_0}. \quad (\text{A.18})$$

En définissant $N = c/v$ on a alors

$$N^2 = \epsilon_r \mu_r - i \frac{\mu_r \sigma}{\omega \epsilon_0}, \quad (\text{A.19})$$

ce qui implique

$$n^2 - k^2 = \epsilon_r \mu_r, \quad (\text{A.20})$$

$$2nk = \frac{\mu_r \sigma}{\omega \epsilon_0}. \quad (\text{A.21})$$

En injectant ces résultats dans l'expression de l'onde plane A.15 nous avons

$$\vec{E} = \vec{e} e^{i\omega t - i2\pi N z / \lambda} = \vec{e} e^{-2\pi k z / \lambda} e^{i(\omega t - 2\pi n / \lambda z)}. \quad (\text{A.22})$$

Finalement, si la propagation de l'onde s'effectue selon une direction donnée par $\vec{s} = \alpha \vec{i} + \beta \vec{j} + \gamma \vec{k}$, où $\vec{i}, \vec{j}$ et $\vec{k}$ représentent les vecteurs selon les directions x, y , and z , les expressions pour $\vec{E}$ deviennent

$$\vec{E} = \vec{e} e^{i(\omega t - \frac{2\pi N}{\lambda}(\alpha x + \beta y + \gamma z))}. \quad (\text{A.23})$$

En utilisant l'équation A.1 on a $\vec{\nabla} \times \vec{H} = \sigma \vec{E} + \epsilon \partial_t \vec{E} = (\sigma + i\omega\epsilon) \vec{E}$ et d'après l'équation A.19 on trouve

$$i \frac{\mu_r}{\omega \epsilon_0} \sigma = \epsilon_r \mu_r - N^2, \quad (\text{A.24})$$

$$\sigma = \frac{\omega \epsilon_0}{\mu_r i} (\epsilon_r \mu_r - N^2) = i(\omega \frac{\epsilon_0}{\mu_r} N^2 - \omega \epsilon), \quad (\text{A.25})$$

$$(\text{A.26})$$

d'où

$$\sigma + i\omega\epsilon = i \frac{\omega N^2 \vec{E}}{c^2 \mu}, \quad (\text{A.27})$$

et

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = i \frac{\omega N^2 \vec{E}}{c^2 \mu}. \quad (\text{A.28})$$

Avec $\partial_x = -i2\pi N / \lambda \alpha = -i \frac{\omega N}{c} \alpha$ et des expressions similaires pour ∂_y et ∂_z , on a

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = -i\omega \frac{N}{c} \vec{s} \times \vec{H} = i\omega \frac{N^2}{c^2 \mu} \vec{E}, \quad (\text{A.29})$$

et

$$\vec{s} \times \vec{H} = -\frac{N}{c\mu} \vec{E}, \quad (\text{A.30})$$

d'où

$$\frac{N}{c\mu} (\vec{s} \times \vec{H}) = \vec{E}. \quad (\text{A.31})$$

La quantité $N/(c\mu)$ a la dimension d'une admittance et est connue sous le nom d'*admittance optique caractéristique* du matériau. On l'écrit $y = \frac{N}{c\mu}$.

Dans le vide, on montre facilement que l'admittance optique caractéristique du vide est donnée par

$$y_v = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} = 2.6544 * 10^{-3} S. \quad (A.32)$$

Dans un milieu non magnétique on a $\mu_r = 1$ d'où $y = Ny_v$.
Nous pouvons alors écrire

$$\vec{H} = y(\vec{s} \times \vec{E}) = Ny_v(\vec{s} \times \vec{E}). \quad (A.33)$$

Le vecteur de Poynting est donné par

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}, \quad (A.34)$$

et la moyenne du vecteur de Poynting, appelée irradianc, par

$$\vec{I} = \frac{1}{2} \Re(\vec{E} \times \vec{H}^*). \quad (A.35)$$

Comme $\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont perpendiculaires, on peut en déduire l'expression de l'intensité lumineuse

$$I = \frac{1}{2} \Re(\vec{E} \times \vec{H}^*). \quad (A.36)$$

Une onde de la forme A.23 vérifie $\vec{H} = y(\vec{s} \times \vec{E})$ et

$$\vec{I} = \Re\left(\frac{1}{2} y \vec{E} \cdot \vec{E}^* \cdot \vec{s}\right) = \frac{1}{2} ny_v \vec{E} \cdot \vec{E}^* \cdot \vec{s}, \quad (A.37)$$

avec :

$$\vec{E} \cdot \vec{E}^* = \vec{e} \vec{e}^* e^{-\frac{4\pi k}{\lambda}(\alpha x + \beta y + \gamma z)}, \quad (A.38)$$

d'où

$$I = \frac{1}{2} ny_v |\vec{e}|^2 e^{-\frac{4\pi k}{\lambda}(\alpha x + \beta y + \gamma z)}. \quad (A.39)$$

L'interface simple

Considérons un milieu non absorbant ($k = 0$) excité une onde plane harmonique de direction $\vec{s}_i = \alpha_i \vec{i} + \beta_i \vec{j} + \gamma_i \vec{k}$. Une interface sépare le milieu incident, d'indice de réfraction n_0 , du milieu émergent non absorbant, d'indice de réfraction n_1 . Le plan contenant la normale à l'interface et la direction de propagation de l'onde incidente est le plan d'incidence. L'axe z, normal à la surface, est pris positif dans la direction de la propagation de l'onde et l'axe x est parallèle à l'interface, les deux axes sont dans le plan d'incidence. Les composantes tangentielles à l'interface de $\vec{E}$ and $\vec{H}$ sont continues. Les directions des ondes réfléchi et transmise sont données par $\vec{s}_r = \alpha_r \vec{i} + \beta_r \vec{j} + \gamma_r \vec{k}$ et $\vec{s}_t = \alpha_t \vec{i} + \beta_t \vec{j} + \gamma_t \vec{k}$. La phase de l'onde incidente est donnée par

$$\phi_i = i(\omega t - \frac{2\pi n_0}{\lambda_i}(x \sin \theta_0 + z \cos \theta_0)), \quad (A.40)$$

et les phases des ondes réfléchi et transmise s'écrivent

$$\phi_l = i(\omega t - \frac{2\pi n_0}{\lambda_l}(\alpha_l x + \gamma_l z)) \quad (A.41)$$

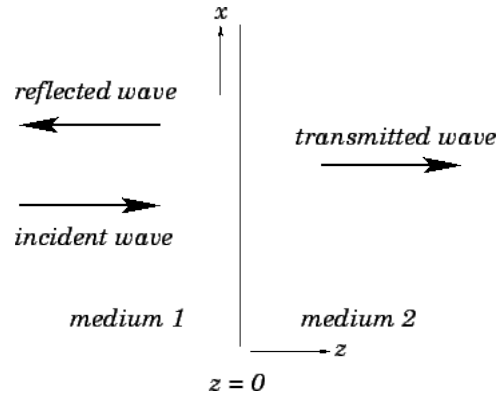


FIGURE A.1 – Représentation des ondes planes pour l'incidence normale.

où l se rapporte à r ou t pour l'onde réfléchie ou transmise. La direction de ces ondes est de la forme

$$\begin{cases} \alpha &= \sin \theta \\ \gamma &= \cos \theta \end{cases}$$

D'après les lois de Snell-Descartes nous avons $n_0 \sin \theta_0 = n_0 \sin \theta_r = n_1 \sin \theta_t$, et $\theta_0 = \theta_r$. En définissant $\theta_1 = \theta_t$ on obtient $n_0 \sin \theta_0 = n_1 \sin \theta_1$. Nous avons aussi $\alpha_r^2 + \gamma_r^2 = 1$ and $\alpha_t^2 + \gamma_t^2 = 1$.

L'incidence normale

Considérons une onde plane incidente qui se propage dans la direction de l'axe z . Les conditions aux limites nous donnent

$$\epsilon_i + \epsilon_r = \epsilon_t, \quad (\text{A.42})$$

$$H_i + H_r = H_t. \quad (\text{A.43})$$

En utilisant la notion d'admittance, nous pouvons relier les champ électrique et magnétique à travers la relation

$$H = \gamma \epsilon, \quad (\text{A.44})$$

d'où

$$\gamma_0 \epsilon_i - \gamma_0 \epsilon_r = \gamma_1 \epsilon_t = \gamma_1 (\epsilon_i + \epsilon_r). \quad (\text{A.45})$$

Nous pouvons déduire des expressions précédentes les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude

$$\rho = \frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} = \frac{\gamma_0 - \gamma_1}{\gamma_0 + \gamma_1} = \frac{n_0 - n_1}{n_0 + n_1}, \quad (\text{A.46})$$

$$\tau = \frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} = \frac{2\gamma_0}{\gamma_0 + \gamma_1} = \frac{2n_0}{n_0 + n_1}. \quad (\text{A.47})$$

Les expressions des coefficients de réflexion et transmission en énergie sont alors

$$R = \frac{I_r}{I_i} = \rho^2 = \left(\frac{y_0 - y_1}{y_0 + y_1} \right)^2, \quad (\text{A.48})$$

$$T = \frac{I_t}{I_i} = \frac{y_1}{y_0} \tau^2 = \frac{4y_0 y_1}{(y_0 + y_1)^2}, \quad (\text{A.49})$$

et ces quantités sont reliées par la relation $1 - R = T$.

L'incidence oblique

L'étude de l'incidence oblique conduit à l'étude de deux cas de polarisation : la polarisation TM (Transverse Magnétique) et la polarisation TE (Transverse Electrique).

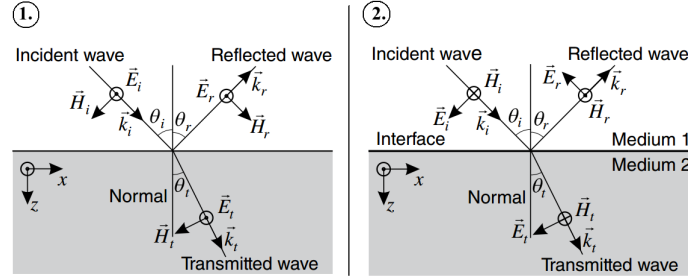


FIGURE A.2 – Représentation des polarisations TE (*gauche*) et TM (*droite*).

Polarisation TE

La continuité des composantes des champs dans le cas de la polarisation TE s'écrit

$$\epsilon_i \cos \theta_0 + \epsilon_r \cos \theta_0 = \epsilon_t \cos \theta_1, \quad (\text{A.50})$$

$$y_0 \epsilon_i - y_0 \epsilon_r = y_1 \epsilon_t, \quad (\text{A.51})$$

d'où

$$\frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} = \frac{y_0 \cos \theta_1 - y_1 \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_1 + y_1 \cos \theta_0}, \quad (\text{A.52})$$

$$\frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} = \frac{2y_0 \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_1 + y_1 \cos \theta_0}. \quad (\text{A.53})$$

Nous avons alors

$$R = \left(\frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} \right)^2, \quad (\text{A.54})$$

$$T = \frac{y_1}{y_0} \left(\frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} \right)^2. \quad (\text{A.55})$$

En définissant

$$E_i = \epsilon_i \cos \theta_0; \quad H_i = y_0 \epsilon_i = \frac{y_0}{\cos \theta_0} E_i, \quad (\text{A.56})$$

$$E_r = \epsilon_r \cos \theta_0; \quad H_r = \frac{y_0}{\cos \theta_0} E_r, \quad (\text{A.57})$$

$$E_t = \epsilon_t \cos \theta_1; \quad H_t = \frac{y_1}{\cos \theta_1} E_t, \quad (\text{A.58})$$

on obtient

$$\rho_{TE} = \frac{E_r}{E_i} = \frac{\frac{y_0}{\cos \theta_0} - \frac{y_1}{\cos \theta_1}}{\frac{y_0}{\cos \theta_0} + \frac{y_1}{\cos \theta_1}}, \quad (\text{A.59})$$

$$\tau_{TE} = \frac{E_t}{E_i} = \frac{\frac{2y_0}{\cos \theta_0}}{\frac{y_0}{\cos \theta_0} + \frac{y_1}{\cos \theta_1}}, \quad (\text{A.60})$$

$$R_{TE} = \left[\frac{\frac{y_0}{\cos \theta_0} - \frac{y_1}{\cos \theta_1}}{\frac{y_0}{\cos \theta_0} + \frac{y_1}{\cos \theta_1}} \right]^2, \quad (\text{A.61})$$

$$T_{TE} = \frac{\frac{4y_0 y_1}{\cos \theta_0 \cos \theta_1}}{\left(\frac{y_0}{\cos \theta_0} + \frac{y_1}{\cos \theta_1} \right)^2}. \quad (\text{A.62})$$

Polarisation TM

Dans le cas de la polarisation TM, les composantes des champs sont données par

$$E_i = \epsilon_i; \quad H_i = y_0 \cos \theta_0 E_i, \quad (\text{A.63})$$

$$E_r = \epsilon_r; \quad H_r = y_0 \cos \theta_0 E_r, \quad (\text{A.64})$$

$$E_t = \epsilon_t; \quad H_t = y_1 \cos \theta_1 E_t. \quad (\text{A.65})$$

En appliquant la même méthode que pour la polarisation TE, on en déduit les expressions des coefficients de réflexion et de transmission

$$\rho_{TM} = \frac{E_r}{E_i} = \frac{y_0 \cos \theta_0 - y_1 \cos \theta_1}{y_0 \cos \theta_0 + y_1 \cos \theta_1}, \quad (\text{A.66})$$

$$\tau_{TM} = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2y_0 \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_0 + y_1 \cos \theta_1}, \quad (\text{A.67})$$

$$R_{TM} = \left(\frac{y_0 \cos \theta_0 - y_1 \cos \theta_1}{y_0 \cos \theta_0 + y_1 \cos \theta_1} \right)^2, \quad (\text{A.68})$$

$$T_{TM} = \frac{4y_0 \cos \theta_0 \cos \theta_1}{(y_0 \cos \theta_0 + y_1 \cos \theta_1)^2}. \quad (\text{A.69})$$

L'admittance optique pour l'incidence oblique

On introduit ici l'*admittance optique tiltée* : $\eta = \frac{H}{E}$. En fonction de la polarisation TE ou TM, on a

$$\eta_{TM} = \frac{y}{\cos \theta} = \frac{ny_v}{\cos \theta}, \quad (\text{A.70})$$

$$\eta_{TE} = y \cos \theta = ny_v \cos \theta. \quad (\text{A.71})$$

On rappelle que dans le cas de l'incidence normale, l'admittance optique est donnée par $\eta = y = ny_v$. Dans le cas d'une incidence oblique, nous obtenons

$$\rho = \frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1}, \tau = \frac{2\eta_0}{\eta_0 + \eta_1}, \quad (\text{A.72})$$

$$R = \left(\frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1} \right)^2, T = \frac{4\eta_0\eta_1}{(\eta_0 + \eta_1)^2}. \quad (\text{A.73})$$

La réflexion d'une couche mince

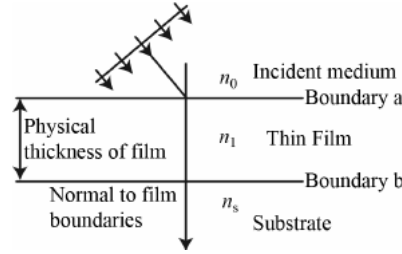


FIGURE A.3 – Onde plane incidente sur une couche mince.

Considérons une couche fine sur un substrat. La présence de deux (ou plus) interfaces implique que des faisceaux vont être produits par les réflexions successives sur les interfaces. Les propriétés de la couche seront déterminées par la somme de ces faisceaux. On considère la couche mince lorsque tous les effets d'interférence peuvent être détectés. La situation est représentée en figure A.3. Il est ici utile d'introduire une nouvelle notation. Nous noterons par le symbole + les ondes dirigées vers le plan d'incidence et par - les ondes dirigées dans la direction opposée. Les interfaces entre la couche et les milieux incidents et le substrat, notés a et b , peuvent être traités exactement de la même façon que l'interface simple déjà abordée dans la section précédente. Considérons les composantes tangentielles des champs. Il n'existe pas d'onde revenant vers l'interface b dans le substrat. Dans la couche, nous avons une onde résultante se dirigeant de l'interface b vers l'intérieur de la couche (onde notée par le symbole -) et une onde résultante se dirigeant de l'intérieur de la couche vers l'interface b (onde notée par le symbole +). Au niveau de l'interface b , les composantes tangentielles des champs $\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont

$$E_b = E_{1b}^+ + E_{1b}^-, \quad (\text{A.74})$$

$$H_b = \eta_1 E_{1b}^+ - \eta_1 E_{1b}^-, \quad (\text{A.75})$$

ce qui implique

$$E_{1b}^+ = \frac{1}{2} \left(\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right), \quad (\text{A.76})$$

$$E_{1b}^- = \frac{1}{2} \left(-\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right), \quad (\text{A.77})$$

$$H_{1b}^+ = \eta_1 E_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b), \quad (\text{A.78})$$

$$H_{1b}^- = -\eta_1 E_{1b}^- = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b). \quad (\text{A.79})$$

Pour déterminer les expressions de ces champs au niveau de l'interface a , nous introduisons une phase positive pour l'onde se dirigeant vers l'interface et une phase négative pour l'onde se dirigeant vers l'intérieur de la couche tel que

$$E_{1a}^+ = E_{1b}^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} \left(\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{i\delta}, \quad (\text{A.80})$$

$$E_{1a}^- = E_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} \left(-\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{-i\delta}, \quad (\text{A.81})$$

$$H_{1a}^+ = H_{1b}^+ e^{i\delta} = \eta_1 E_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) e^{i\delta}, \quad (\text{A.82})$$

$$H_{1a}^- = H_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) e^{-i\delta}, \quad (\text{A.83})$$

avec $\delta = \frac{2\pi N_1 d}{\lambda} \cos \theta$, où d est l'épaisseur de la couche constituée d'un matériau d'indice de réfraction n_1 . On peut écrire

$$E_a = E_{1a}^+ + E_{1a}^- \quad (\text{A.84})$$

$$= E_b \left(\frac{e^{i\delta} + e^{-i\delta}}{2} \right) + H_b \left(\frac{e^{i\delta} - e^{-i\delta}}{2\eta_1} \right) \quad (\text{A.85})$$

$$= E_b \cos \delta + H_b \frac{i \sin \delta}{\eta_1}, \quad (\text{A.86})$$

et de même

$$H_a = H_{1a}^+ + H_{1a}^- = E_b i \eta_1 \sin \delta + H_b \cos \delta. \quad (\text{A.87})$$

La forme matricielle de ces équations est donnée par

$$\begin{bmatrix} E_a \\ H_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_b \\ H_b \end{bmatrix}. \quad (\text{A.88})$$

Cette matrice représente la matrice caractéristique de la couche mince.

En introduisant l'admittance optique $Y = \frac{H_a}{E_a}$, le problème se ramène à celui d'une interface simple entre un milieu incident d'admittance η_0 et un milieu d'admittance Y , et d'après les équations A.72 et A.73 on a

$$\rho = \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y}, \quad (\text{A.89})$$

$$R = \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right)^*. \quad (\text{A.90})$$

On peut normaliser l'équation (A.88) en divisant par E_b ce qui donne

$$\begin{bmatrix} \frac{E_a}{E_b} \\ \frac{H_a}{E_b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.91})$$

avec $\eta_2 = \frac{H_b}{E_b}$. On peut maintenant déterminer l'expression de $Y = \frac{H_a}{E_a} = \frac{C}{B}$ par

$$Y = \frac{C}{B} = \frac{i \eta_1 \sin \delta + \cos \delta \eta_2}{i \frac{\eta_2}{\eta_1} \sin \delta + \cos \delta}, \quad (\text{A.92})$$

et on peut alors en déduire l'expression du coefficient de réflexion en utilisant l'équation A.90.

La réflexion d'un ensemble de couches.

Dans cette partie nous considérons deux couches minces, la première d'indice de réfraction n_1 et d'épaisseur d_1 , et la seconde d'indice de réfraction n_2 et d'épaisseur d_2 . L'indice optique du milieu incident est noté n_0 et celui du substrat, n_3 . Les deux couches minces sont formées par les interfaces a, b et c . La matrice caractéristique de la couche la plus proche du substrat est

$$\begin{bmatrix} E_b \\ H_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i \sin \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_c \\ H_c \end{bmatrix}. \quad (\text{A.93})$$

Les champs au niveau de l'interface a sont reliés à ceux au niveau de l'interface c par

$$\begin{bmatrix} E_a \\ H_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i \sin \delta_1}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i \sin \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_c \\ H_c \end{bmatrix}. \quad (\text{A.94})$$

La matrice caractéristique de l'ensemble des deux couches est donc

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i \sin \delta_1}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i \sin \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.95})$$

Ce résultat peut être étendu au cas général d'un ensemble de q couches, dont la matrice caractéristique est le produit des matrices individuelles des couches, prises dans le bon ordre tel que

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^q \begin{bmatrix} \cos \delta_r & \frac{i \sin \delta_r}{\eta_r} \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix}, \quad (\text{A.96})$$

avec

$$\eta_r(S) = y_v N_r \cos \theta_r, \quad (\text{A.97})$$

$$\eta_r(P) = \frac{y_v N_r}{\cos \theta_r}, \quad (\text{A.98})$$

$$\delta_r = \frac{2\pi N_r d_r \cos \theta_r}{\lambda}, \quad (\text{A.99})$$

$$N_0 \sin \theta_0 = N_r \sin \theta_r = N_m \sin \theta_m. \quad (\text{A.100})$$

Pour la j -ème couche l'admittance Y_j s'écrit $Y_j = \frac{C}{B}$ où B et C sont donnés par la matrice caractéristique de la couche j .

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i \sin \delta_j}{\eta_j} \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B' \\ C' \end{bmatrix}, \quad (\text{A.101})$$

où B et C représentent les ondes au dessus de l'interface (dans la couche j), et B' et C' les ondes sous l'interface (dans la couche $j+1$). En divisant cette équation par B' nous obtenons

$$\begin{bmatrix} \frac{B}{B'} \\ \frac{C}{B'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i \sin \delta_j}{\eta_j} \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ Y' \end{bmatrix}, \quad (\text{A.102})$$

avec $Y' = \frac{C'}{B'}$ l'admittance optique de la couche $j+1$.

On peut maintenant exprimer l'admittance optique de la couche $j(Y)$ en fonction de celle de la couche $j+1(Y')$ de sorte que

$$Y = \frac{i \eta_j \sin \delta_j + Y' \cos \delta_j}{\cos \delta_j + Y' \frac{i \sin \delta_j}{\eta_j}}, \quad (\text{A.103})$$

et finalement

$$Y_j = \frac{Y_{j+1} + i \eta_j \tan \delta_j}{1 + i \frac{Y_{j+1}}{\eta_j} \tan \delta_j}, \quad (\text{A.104})$$

ce qui nous permet de déterminer le coefficient de réflexion de la structure grâce à l'équation A.90.