



Optimisation des structures nanophotoniques pour le photovoltaïque

Mamadou Aliou Barry

► To cite this version:

Mamadou Aliou Barry. Optimisation des structures nanophotoniques pour le photovoltaïque. Autre [cond-mat.other]. Université Clermont Auvergne [2017-2020], 2018. Français. NNT : 2018CLFAC096 . tel-02389464

HAL Id: tel-02389464

<https://theses.hal.science/tel-02389464>

Submitted on 2 Dec 2019

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.

UNIVERSITE CLERMONT-AUVERGNE

ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES FONDAMENTALES

THESE

Présenté pour obtenir le grade de

DOCTEUR D'UNIVERSITE

Spécialité : PHYSIQUE

Par : Mamadou Aliou BARRY

Master en Systèmes Energetiques et Environnement

**OPTIMISATION DES STRUCTURES
NANOPHOTONIQUES POUR LE PHOTOVOLTAIQUE**

Soutenu publiquement le 21 mars 2018, devant la commission d'examen

Président : Emanuel CENTENO
Rapporteur : Dominique COQUILLAT
Rapporteur : Christian SEASSAL
Directeur de thèse : Antoine MOREAU

JE DÉDIE CETTE THÈSE :

— A MON TRÈS CHER PÈRE FEU **Mamoudou Ditinn BARRY**

TU REPRÉSENTES POUR MOI UNE PERSONNE À QUI JE M'INSPIRE TOUJOURS. MALGRÉ QUE TU N'ES PLUS EN FACE DE MOI PAPA SACHES QUE JE MENERAI LE COMBAT JUSQU'AU BOUT. TA PRIÈRE ET TA BÉNÉDICTION M'ONT ÉTÉ D'UN GRAND SECOURS POUR MENER À BIEN MES ÉTUDES.

AUCUNE DÉDICACE NE SAURAIT ÊTRE ASSEZ ÉLOQUENTE POUR EXPRIMER CE QUE TU MÉRITES POUR TOUS LES SACRIFICES QUE TU N'AS CESSÉ DE ME DONNER DEPUIS MA NAISSANCE, DURANT MON ENFANCE ET MÊME À L'ÂGE ADULTE. TU AS FAIT PLUS QU'UNE MÈRE PUISSE FAIRE POUR QUE SES ENFANTS SUIVENT LE BON CHEMIN DANS LEUR VIE ET LEURS ÉTUDES. JE TE DÉDIE CE TRAVAIL EN TÉMOIGNAGE DE MON PROFOND AMOUR. PUISSE DIEU, LE TOUT PUISSANT, TE PRÉSERVER LE PARADIS ÉTERNEL.

— A MA TRÈS CHER ÉPOUSE **Néné Loua BARRY**

QUAND JE T'AI CONNUE, J'AI TROUVÉ LA FEMME DE MA VIE, MON ÂME SŒUR ET LA LUMIÈRE DE MON CHEMIN. MA VIE À TES COTÉS EST REMPLIE DE BELLES SURPRISES. TES SACRIFICES, TON SOUTIEN MORAL ET MATÉRIEL, TA GENTILLESSE SANS ÉGAL, TON PROFOND ATTACHEMENT M'ONT PERMIS DE RÉUSSIR MES ÉTUDES DOCTORALES. SANS TON AIDE, TES CONSEILS ET TES ENCOURAGEMENTS CE TRAVAIL N'AURAIT VU LE JOUR. QUE DIEU RÉUNISSE NOS CHEMINS POUR UN LONG COMMUN SEREIN ET QUE CE TRAVAIL SOIT TÉMOIGNAGE DE MA RECONNAISSANCE ET DE MON AMOUR SINCÈRE ET FIDÈLE.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Antoine MOREAU qui m'a encadré, qui m'a même compléter le financement pour débiter une thèse en France particulièrement au laboratoire d'Institut Pascal de l'Université Clermont-Auvergne. C'est lui qui m'a initié à la recherche et m'a suivi jusqu'à l'aboutissement de cette thèse. Il a su m'encadrer avec beaucoup de professionnalisme. il est quelque part à la base de cette réussite.

Je tiens également à remercier Dominique Coquillat Directeur de Recherche au CNRS Laboratoire Charles Coulomb (L2C) à l'Université de Montpellier, et Christian Seassal Directeur de Recherche au CNRS à l'Institut des Nanotechnologies de Lyon pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de ma thèse.

Que Monsieur Emmanuel CENTENO responsable adjoint de l'axe Photonique, Ondes, Nanomatériaux de l'Institut Pascal, soit remercié pour avoir accepté d'être membre du jury et pour l'intérêt qu'il a toujours manifesté concernant l'optimisation des structures naturelles.

Je remercie aussi l'ensemble des collègues de l'Institut Pascal avec lesquels j'ai collaboré tout au long de ces années de thèse, dont notamment : Alvear Eduardo, Pitelet Armel Doctorants, qui m'ont considéré comme un frère en m'apportant à chaque fois que c'était nécessaire des soutiens inestimables ;

Je remercie chaleureusement Monsieur Cellou KANTE, Directeur de l'Institut Supérieur de Technologie de Mamou, pour son action vis-à-vis de la réussite de la jeunesse Guinéenne. C'est lui qui m'a recruté à l'IST Mamou et m'a appuyé sur ma formation du Master au LEREA jusqu'à la Thèse. Sans sa vision et son amour pour le travail, ce projet n'aurait pu être possible. Que Monsieur Idrissa DIABY mon encadreur du master soit remercié pour ses différents soutiens inestimables. Je tiens à remercier sincèrement Monsieur Yagouba Diallo ancien chef de département Energetique.

Mes remerciements s'adressent aussi à l'ensemble de mes professeurs du LEREA sans oublier Fadel KEBE du Cheik Anta Diop de Dakar ,non seulement pour m'avoir ouvert l'esprit pour faire une thèse mais aussi d'avoir accepté de d'être consultant de mon sujet de stage en master Systèmes énergétiques et environnement.

Que tous mes collègues de l'IST Mamou soient remerciés pour leurs soutiens, avec une pensée particulière pour tous ce qui nous ont quittés notamment Monsieur Foula BARRY ancien Directeur général adjoint chargé de la recherche . Que son âme repose en paix AMEN. Monsieur Foula BARRY qui m'a toujours encouragé dans la persévérance et a souvent su

trouver les mots justes pour me motiver. Il m'a poussé avec beaucoup de professionnalisme son expérience et m'a apporté son soutien à chaque que j'en avais besoin.

Que mes amis et connaissances trouvent ici l'expression de ma reconnaissance pour toutes les discussions enrichissantes et le réconfort qu'ils m'ont apportés durant mon séjour à l'Université Clermont Auvergne. J'ai une pensée toute particulière pour tous ceux qui n'ont pas pu voir aboutir ce projet. Je vous exprime à tous ma reconnaissance. Grand merci à mes frères Elhadj Boubacar, Aguib et Mamadou Lamarana vos soutiens n'ont permis de venir au bout de ce travail. Je remercie enfin ma maman et mon papa qui m'ont solidement soutenu dès le début. Le Combat Continue !!!

Table des matières

1	STRUCTURES PHOTONIQUES	6
1.1	Simulation en optique électromagnétique	7
1.1.1	Structures lamellaires & matrices S	7
	Solution des équations de Maxwell	8
	Matrices de diffusion	13
1.1.2	Moosh et la propagation de faisceaux	15
1.1.3	Méthodes modales	18
1.2	Structures photoniques	19
1.2.1	Couche anti-reflet	19
1.2.2	Miroirs de Bragg	20
1.2.3	Miroirs diélectriques à gradient	22
1.2.4	Cellules photovoltaïques	24
1.3	Structures naturelles	27
1.3.1	Élytres et miroirs diélectriques	29
	Miroirs de Bragg	29
	Miroirs diélectriques à gradient	30
1.3.2	Les ailes des papillons Morpho	30
1.4	Conclusion	34
2	OPTIMISATION DES STRUCTURES PHOTONIQUES	36
2.1	Introduction	36
2.2	Algorithmes d'optimisation	37
2.2.1	Méthodes d'optimisation locales	38
	Méthode de gradient	39
	Méthode de Nelder et Mead	40
2.2.2	Méthodes d'optimisation globales & stratégies évolutionnaires	45
	Les algorithmes évolutionnaires	46
	Stratégie d'évolution ES (Evolution Strategy)	48
	Méthode CMA-ES	49
	Les algorithmes génétiques	49
	Un algorithme évolutionnaire simple	50
	Évolution différentielle	53

2.3	Optimisation des structures photoniques	56
2.3.1	Miroir de Bragg	57
2.3.2	Indice bas en premier	63
2.4	Miroirs diélectriques à gradient	66
2.5	Structure Morpho	70
2.5.1	Performances des différents algorithmes	75
2.6	Conclusion	79
3	ETUDE D'UN ANTI-REFLET GÉNÉRÉ PAR OPTIMISATION	81
3.1	Introduction	81
3.2	Génération d'un anti-reflet pour le photovoltaïque	82
3.3	Analyse physique de l'anti-reflet	86
3.4	Comparaison à l'expérience	87
3.5	Conclusion	91
	REFERENCES	98

Introduction

Depuis les années 90, on dispose de méthodes de simulation efficaces et - parfois - rapides. Elles ont permis le développement accéléré du domaine de la nanophotonique, en permettant de prédire la réponse optique de nanostructures. Ainsi, ces méthodes de résolution des équations de Maxwell ont permis de comprendre et de proposer des design originaux pour énormément de composants optiques (filtres, multiplexeurs, cristaux photoniques) et de structures naturelles comme celles qu'on trouve dans le règne animal ou produites de façon empirique par l'homme (comme les nanoparticules des vitraux ou les émaux métalliques).

Dès l'apparition de ces techniques numériques, même des plus simples, on a voulu essayer de mener des optimisations numériques des nanostructures - c'est à dire d'améliorer des dispositifs sans avoir à les fabriquer pour les tester. C'est plus particulièrement dans le domaine des multicouches que ce genre de technique a été efficace pour produire des filtres optiques aux performances améliorées. Les algorithmes d'optimisation pour ce type de dispositif se sont révélés particulièrement efficaces – mais ils ne sont hélas pas transposables aux autres problèmes. Ils ont cependant inspiré de nombreux algorithmes “maison”, conçus par les opticiens eux-même, en ne réutilisant qu'à la marge les algorithmes généralistes proposés par la communauté informatique. Il faut admettre que les premiers algorithmes génétiques étaient très peu efficaces, mais la communauté de l'optimisation a proposé de nombreux autres algorithmes

depuis ces premières tentatives.

Il est assez vite apparu que le contrôle de la lumière par des nanostructures est quasiment sans limite, au sens où l'on peut en contrôler tous les aspects (polarisation, front d'onde) et obtenir des dispositifs réalisant pratiquement n'importe quelle fonction avec une bonne efficacité. C'est par exemple le cas des filtres optiques, des structures multicouches à base de deux matériaux en général seulement. En adaptant simplement la hauteur de chaque couche, on peut réaliser un spectre de transmission ou de réflexion parfaitement arbitraire. On peut citer, comme outils plus complexes maintenant disponibles les métamatériaux, les cristaux photoniques, les métasurfaces. Toute la difficulté semble être dans le design - plus tellement dans la réalisation. Récemment, des optimisations numériques ont démontré à quel point ce contrôle pouvait être étendu, même pour des dispositifs extrêmement miniaturisés^{7,50,57}. Cependant, il faut admettre que les dispositifs dont nous parlons sont très désordonnés et, le corollaire, leur fonctionnement n'est pas compréhensible pour un physicien.

Cela peut sembler d'autant plus paradoxal que les structures d'origine naturelles sont de façon générale très régulières parfois même périodiques⁶⁷. On peut donc se demander si cette régularité a été favorisée par l'évolution parce qu'elle constitue une simplification de la fabrication, ou si elle est présente parce qu'elle constitue un optimum optique. Et il est intéressant de savoir si on peut obtenir des structures régulières comme résultat d'une optimisation numérique - parce que ce sont des structures dont la réponse est plus facilement compréhensible. Mon travail a été de répondre à ces interrogations.

Dans un premier chapitre, je décris plus ou moins rapidement selon que je les ai plus ou moins utilisées, les méthodes numériques rapides (matrices de diffusion et méthode modale de Fourier) qui permettent la simulation des propriétés optiques des structures photoniques. Je présente aussi les dispositifs photoniques les plus importants et leurs propriétés, étudiées grâce aux outils numériques, que ces dispositifs soient naturels ou artificiels.

Dans un deuxième chapitre, je montre qu'il est possible de retrouver les architectures naturelles à l'aide d'algorithmes d'optimisation, et notamment à l'aide d'algorithmes évolutionnaires, qui sont directement inspirés par l'évolution elle-même. Je passe en revue les algorithmes adaptés aux problèmes photoniques avec un grand nombre de degrés de liberté continus - puis je montre qu'il est possible d'obtenir essentiellement toutes les structures photoniques emblématiques naturelles.

Enfin, dans un troisième chapitre, j'applique la technique aux anti-reflets pour les cellules photovoltaïques, pour montrer qu'on peut utiliser cette approche pour trouver de nouvelles structures régulières. J'étudie la physique de cet anti-reflet très contre-intuitif, et je compare à une réalisation expérimentale.

1

Structures photoniques

Grâce à l'arrivée d'ordinateurs très puissants et abordables vers les années 90, la physique numérique a connu une véritable révolution. Les physiciens numériques sont maintenant tout à fait capable de modéliser et de simuler la quasi totalité des phénomènes physiques et de connaître exactement le résultat des expériences sans faire l'expérience de ces phénomènes. En électromagnétisme, bien avant l'arrivée de techniques comme les éléments finis, qui sont coûteuses en temps de calcul mais qui permettent de tout simuler, on a disposé d'outils numériques adaptés à l'optique électromagnétique, pour l'étude des filtres optiques (empilements de

couches homogènes) ou des réseaux. Ces outils permettent l'étude de très nombreuses structures comme des détecteurs de molécules, des LED, des panneaux photovoltaïques ou de nouveaux types de lasers, mais aussi les carapaces des insectes ou les ailes des papillons.

Dans ce chapitre, je présente tout ce qui est nécessaire à la compréhension des résultats que j'ai obtenus, et qui sont détaillés dans les deux chapitres suivants. Une première partie concerne les méthodes numériques que j'ai utilisées, d'abord pour les structures lamellaires et ensuite pour les structures de type réseau. Une deuxième partie concerne les dispositifs les plus classiques, parce que leur compréhension est fondamentale en photonique. Finalement, je résumerai ce qu'on sait de quelques structures photoniques naturelles.

1.1 Simulation en optique électromagnétique

Au cours de ma thèse, j'ai utilisé deux types de méthodes numériques : l'une pour étudier les structures lamellaires (ce qui a été le cas de la majorité des architectures auxquelles je me suis intéressées), et l'autre que j'ai utilisée seulement pour les structures plus complexes comme celles des papillons Morpho.

1.1.1 Structures lamellaires & matrices S

Ici nous allons nous intéresser à des structures lamellaires, c'est à dire formées par un empilement de couches planes dont les milieux sont homogènes, linéaires, locaux et isotropes. Chaque couche est donc caractérisée par une épaisseur et un indice optique du milieu qui peut être complexe pour tenir compte de l'absorption. L'indice optique, dans l'absolu, est défini par $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ où ϵ est la permittivité électrique relative et μ la perméabilité magnétique relative. Nous allons voir jusqu'où on peut résoudre analytiquement les équations de Maxwell, et comment ensuite on peut utiliser une résolution numérique pour arriver à calculer toute la réponse optique de ces structures. J'ai utilisé d'abord les matrices S pour le calcul de leurs propriétés, et

pendant ma thèse tous ces outils ont été incorporés au sein d'un programme, Moosh, capable de faire tous ces calculs, et que j'ai utilisé pour la simulation de cellules photovoltaïques.

Solution des équations de Maxwell

Considérons des structures lamellaires pour lesquelles les multicouches caractérisées par ϵ et μ dépendent de z c'est à dire invariantes suivant les deux autres dimensions de l'espace Ox et Oy .

Nous allons considérer que la densité de courant est nulle ($J = 0$) et que la densité de charge est quasiment nulle ($\rho = 0$), donc qu'il n'y a pas de source. Dans ce cas les équations de Maxwell s'écrivent de la manière suivante :

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\text{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\text{div} \vec{B} = 0 \quad (1.3)$$

$$\text{div} \vec{D} = 0 \quad (1.4)$$

où $\vec{E}$ le vecteur champ électrique, $\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H}$ le vecteur champ magnétique, $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$ le vecteur d'induction électrique et $\vec{H}$ est le vecteur d'excitation champ magnétique. Le problème à résoudre est indépendant du temps, donc on se place en régime harmonique, c'est à dire qu'on peut faire une transformée de Fourier en temps de toutes les équations. Donc on cherche des champs de la forme suivante :

$$\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{E}(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (1.5)$$

$$\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{H}(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (1.6)$$

Les équations de Maxwell s'écrivent alors de la manière suivante :

$$\text{rot } \vec{E} = i\omega\mu_0\vec{H} \quad (1.7)$$

$$\text{rot } \vec{H} = -i\omega\epsilon\vec{E} \quad (1.8)$$

Dans la suite, on peut se limiter à un problème à deux dimensions sans vraie perte de généralité. On va donc poser que la dérivée partielle par rapport à y est nulle.

Ce choix fait que l'on doit distinguer deux polarisations différentes :

- Lorsque le champ électrique incident est perpendiculaire au plan de coupe c'est à dire polarisé suivant la direction Oy . Celle-ci est parallèle au plans des couches et rectiligne. Cette polarisation est appelée (Transverse Électrique) et est notée par TE . Donc en mode TE , $H_y = 0$.
- Lorsque tous les autres composants du champ magnétique $\vec{H}$ sont nulles sauf la composante H_y , cette polarisation est appelée (Transverse Magnétique) et est noté par TM .

Dans ce mode de polarisation $E_y = 0$

En faisant une projection sur les différents axes x, y, z , les équations de Maxwell en régime harmonique, prennent donc la forme de deux systèmes d'équations dissociés. Le premier système est en mode TE c'est à dire il fait intervenir la seule composante E_y du vecteur champ électrique $\vec{E}$, tandis que le second système est en mode TM . La composante H_y du champ magnétique est alors centrale dans ce sous-système et qui peut s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \partial_z H_y = i\omega\epsilon E_x \\ \partial_x H_y = i\omega\epsilon E_z \\ \partial_z E_x - \partial_x E_z = i\omega\mu_0 H_y \end{cases} \quad (1.9)$$

Et en mode TE on a le système que l'on peut présenter comme suit :

$$\begin{cases} \partial_y E_z = i\omega\mu_0 H_x \\ \partial_x E_y = i\omega\mu_0 H_z \\ \partial_z H_x - \partial_x H_z = -i\omega\epsilon E_y \end{cases} \quad (1.10)$$

où E_y est la quantité centrale.

Dans chaque milieu, l'évolution spatiale des champs magnétique et électrique en polarisation TM comme en TE vérifie l'équation de Helmholtz tirée des équations de Maxwell

$$\Delta \vec{E} + \frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} \vec{E} = \vec{0} \quad (1.11)$$

et

$$\Delta \vec{H} + \frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} \vec{H} = \vec{0}, \quad (1.12)$$

avec $k = nk_0$, $k_0 = \frac{\omega}{c}$, c est la vitesse de propagation de la lumière dans le vide et ω la fréquence de l'onde électromagnétique.

Le champ E_y en polarisation TE et le champ H_y en polarisation TM peuvent donc s'écrire sous la forme suivante :

$$V(x, y, z, t) = \phi(z)e^{-i(\alpha x - \omega t)} \quad (1.13)$$

Si on utilise l'équation de Helmholtz, on en déduit l'équation sur ϕ , qui peut se présenter sous cette forme :

$$\phi'' + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - \alpha^2 \right) \phi = 0, \quad (1.14)$$

où $k^2 - \alpha^2 = k_z^2$ avec $k^2 = \frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2}$ et $\alpha = k_x$.

Suivant le signe de la quantité $k^2 - \alpha^2$ on a deux expressions : si elle est positive on a

$k_z = \sqrt{k^2 - \alpha^2}$ et dans le cas contraire, elle s'écrit $k_z = i\sqrt{\alpha^2 - k^2}$ (ondes évanescentes suivant z).

Donc $\phi(z)$ peut être décomposé de la manière suivante :

$$\phi(z) = Ae^{ik_z z} + Be^{-ik_z z} \quad (1.15)$$

où A et B sont des constantes qu'il faudra déterminer grâce aux conditions aux limites. Alors on déduit que les champs s'écrivent sous la forme suivante :

$$\phi(z) = (Ae^{ik_z z} + Be^{-ik_z z})e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (1.16)$$

Dans les conditions de passage des couches (d'une couche à une autre couche), au niveau de la polarisation TE il y a une continuité de E_y et de $\frac{1}{\mu}\partial_z E_y$ et pour la polarisation TM il y a une continuité de H_y et de $\frac{1}{\epsilon}\partial_z H_y$. On peut résumer ce résultats sur la figure 1.1.

Les champs dans la j ème couche caractérisée par sa perméabilité μ_j et sa permittivité ϵ_j et située entre z_j et z_{j+1} peuvent se présenter sous la forme suivante :

$$(A_j^+ e^{ik_{z,j}(z-z_j)} + B_j^+ e^{-ik_{z,j}(z-z_j)}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (1.17)$$

où z_j est la position de la limite supérieure de la couche j , c'est à dire la coordonnée de l'interface entre le milieu $j - 1$ et le milieu j . $k_{z,j} = \sqrt{\mu_j \epsilon_j k^2 - \alpha^2}$, où $k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ et où la racine carrée est le prolongement analytique de la racine carrée au plan complexe. Les coefficients A_j^+ et B_j^+ sont considérés comme étant l'onde plane d'amplitude égale à 1 et de constante de propagation α .

Essayons de calculer les coefficients A_j^+ et B_j^+ pour pouvoir déterminer le coefficient de réflexion r et le coefficient de transmission t . Pour cela, nous allons résoudre un système

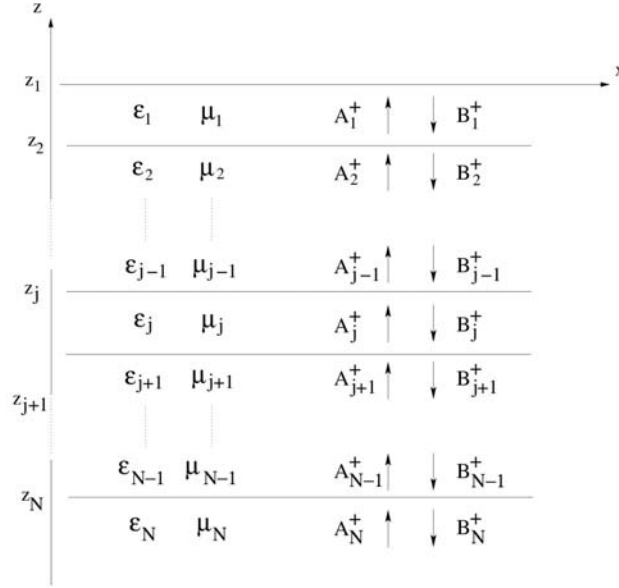


FIGURE 1.1 : Structure multi-couches chacune caractérisée par son épaisseur $Z_{j+1} - Z_j$ sa perméabilité μ_j et sa permittivité ϵ_j .⁹

d'équation provenant des relations de continuité des différents champs au niveau des interfaces. Considérons les différents milieux possédant plusieurs couches c'est à dire un empilement de N couches. En polarisation TM on aura le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} A_j^- + B_j^- = A_{j+1}^+ + B_{j+1}^+ \\ \frac{\gamma_j}{\epsilon_j} (A_j^- - B_j^-) = \frac{\gamma_{j+1}}{\epsilon_{j+1}} (A_{j+1}^+ - B_{j+1}^+) \end{cases} \quad (1.18)$$

avec

$$\begin{cases} A_j^- = A_j^+ e^{i\gamma_j (z_{j+1} - z_j)} \\ B_j^- = B_j^+ e^{-i\gamma_j (z_{j+1} - z_j)}. \end{cases} \quad (1.19)$$

Pour la polarisation TE nous remplacerons les ϵ_j par les μ_j , même si en pratique, dans tous les calculs que nous avons fait par la suite, on avait toujours $\mu_j = 1$.

Essayons de résoudre numériquement ce système d'équation. Pour cela, nous allons considérer en premier lieu qu'aucune onde n'entre dans la $N - \text{ème}$ couche c'est à dire $A_N^+ = 0$ et que l'onde plane incidente d'amplitude 1 provient du haut de la structure donc $B_1^+ = 0$. Le coefficient de transmission t peut être alors $B_N^+ = t$ et le coefficient de réflexion est $A_1^+ = r$. Dans ce cas, on peut alors éliminer les A_j^+ et les B_j^+ du système d'équations (1.18) pour obtenir l'expression de r et de t .

Si on veut une stabilité parfaite, on ne peut pas le faire grâce à la force brute. On ne peut pas non plus utiliser les matrices de transfert usuelles si on veut que cela fonctionne dans tous les cas. Elles sont en effet instables quand on a des évanescentes. C'est pour ça que les matrices S , ou matrices de diffusion, sont utilisées.

Matrices de diffusion

Le système (1.18) peut être écrit de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} A_i^- \\ B_{i+1}^+ \end{bmatrix} = \frac{1}{\frac{\gamma_i}{\epsilon_i} + \frac{\gamma_{i+1}}{\epsilon_{i+1}}} \begin{bmatrix} \frac{\gamma_i}{\epsilon_i} - \frac{\gamma_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} & 2\frac{\gamma_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} \\ 2\frac{\gamma_i}{\epsilon_i} & \frac{\gamma_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} - \frac{\gamma_i}{\epsilon_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_i^- \\ A_{i+1}^+ \end{bmatrix}. \quad (1.20)$$

Et pour faire une liaison des différents coefficients des ondes montantes A_j^+ B_j^+ avec les coefficients des ondes descendantes A_j^- B_j^- on peut réécrire le système (1.19) comme suit :

$$\begin{bmatrix} A_i^+ \\ B_i^- \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & e^{i\gamma_j h_j} \\ e^{i\gamma_j h_j} & 0 \end{bmatrix}}_S c \begin{bmatrix} B_i^+ \\ A_i^- \end{bmatrix} \quad (1.21)$$

avec $h_j = z_{j+1} - z_j$. La matrice Sc est appelé matrice de scattering (matrice S) ou matrice de diffusion de la j ème couche.

Pour donner une matrice correspondant à l'empilement des sous-structures il n'est pas

nécessaire de les multiplier entre elle, plutot de les combiner selon le schéma que nous allons décrire ci dessous. Cette opération est appelée cascading.

Si nous avons

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (1.22)$$

et

$$\begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \\ F \end{bmatrix} \quad (1.23)$$

En faisant un cascading, on obtient une relation de genre

$$\begin{bmatrix} A \\ E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} + \frac{L_{12}P_{11}L_{21}}{1-L_{11}P_{22}} & \frac{L_{12}P_{12}}{1-L_{11}P_{22}} \\ \frac{P_{21}L_{21}}{1-L_{22}P_{11}} & P_{22} + \frac{P_{21}L_{22}P_{12}}{1-L_{22}P_{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ F \end{bmatrix}. \quad (1.24)$$

Pour relier les coefficients A_j et B_j jusqu'à la première couche, on continue de cascader les matrices S

$$\begin{bmatrix} A_1^+ \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1^+ \\ A_j \end{bmatrix} \quad (1.25)$$

Et aux coefficients A_j et B_j de la dernière couche on a :

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_N^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_j^+ \\ A_N^- \end{bmatrix} \quad (1.26)$$

Après avoir déterminé la matrice S et la matrice U nous pouvons écrire A_j et B_j en considérant que l'amplitude de l'onde incidente est égale à 1 et que dans la dernière couche il n'y a

qu'une seule onde qui sort de la structure. Alors on a :

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{U_{12}}{1-U_{11}S_{22}} & \frac{U_{11}S_{21}}{1-U_{11}P_{22}} \\ \frac{S_{22}U_{12}}{1-S_{22}U_{11}} & \frac{S_{21}}{1-S_{22}U_{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_N^- \\ B_1^+ \end{bmatrix}. \quad (1.27)$$

En chaque point de la structure, nous pouvons connaître l'amplitude du champ créée par l'onde incidente à travers les coefficients A_j et B_j .

Par conséquent, le coefficient de réflexion de la structure est le coefficient de la première ligne et de la première de la colonne de la matrice. On peut alors l'étudier en faisant varier la longueur d'onde ou l'angle d'incidence.

Un premier exemple est montré sur la figure 1.2, où on voit le coefficient de réflexion sur une simple interface entre deux diélectriques. Le premier indice est $n_1 = 1$ et le second est $n_2 = 1,5$. On voit clairement que le coefficient de réflexion dépend de la polarisation de la lumière incidente. Dans le cas de la polarisation TM, on voit très nettement que le coefficient de réflexion s'annule pour un angle particulier appelé angle de Brewster. Lorsqu'une onde plane est réfléchi à l'incidence de Brewster, alors l'onde réfléchi est parfaitement polarisée, et son champ électrique est parallèle à l'interface puisque seule la polarisation TE est réfléchi.

1.1.2 Moosh et la propagation de faisceaux

Au départ, j'ai donc utilisé les matrices S directement, puis Moosh pour les calculs plus évolués, comme la propagation de faisceaux dans les structures, puisque c'est sur ce même principe que Moosh est basé.

Avec l'ensemble de programmes, en fait, qui constitue Moosh, on peut par exemple étudier la propagation des faisceaux dans les structures. Le principe est de diviser le faisceau incident en une superposition d'ondes planes progressives monochromatiques homogènes. Ensuite cela consiste à résoudre notamment les équations de Maxwell pour chacune de ces ondes planes.

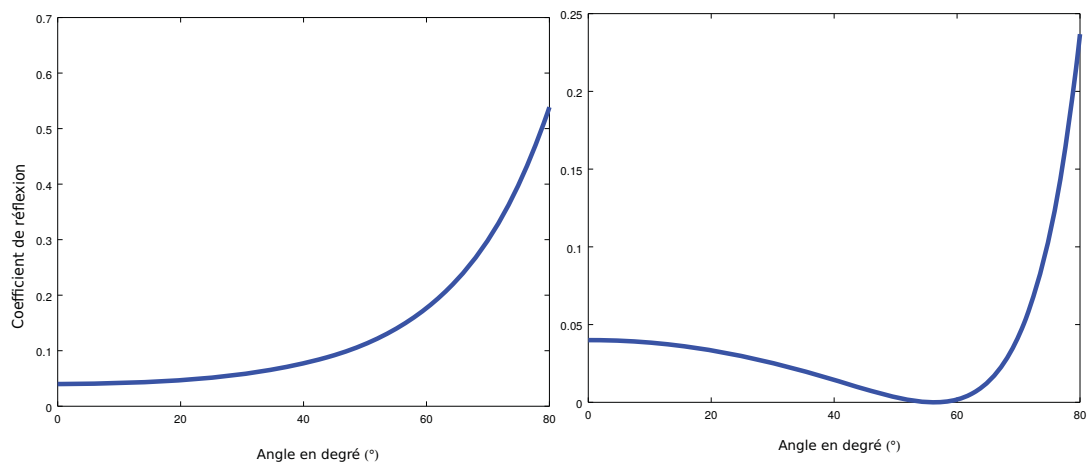


FIGURE 1.2 : Module au carré du coefficient de réflexion en fonction de l'angle d'incidence pour une polarisation. La figure gauche représente le coefficient de réflexion en polarisation TE et celle de la droite montre la le coefficient de la réflexion en polarisation TM

Enfin, la réponse de la structure à chaque onde plane est prise en compte pour générer une carte du champ électrique ou magnétique dans toute la structure éclairée par le faisceau et ainsi visualiser la propagation de ce dernier.

La figure 1.3 montre ce qui arrive à un faisceau arrivant sur une interface entre deux diélectriques à l'incidence de Brewster en polarisation TM. On voit clairement qu'il n'y a pratiquement pas de réflexion, et que l'intégralité de la lumière est transmise dans le second milieu. Ce serait très intéressant de pouvoir faire ce genre de choses à incidence normale, nous verrons plus loin que les anti-reflets font exactement cela.

Ensuite avec le programme Moosh on peut simuler le faisceau de la réfraction de la lumière venant de l'air sur un milieu d'indice 1.5 en polarisation TE ., On voit le rayon incident le plus intense, le rayon transmis et le rayon réfléchi. (Figure 1.4)

L'avantage de Moosh c'est qu'il est facile à utiliser, même dans des cas un peu compliqués, qui utilisent énormément de couches, comme les miroirs de Bragg (Figure 1.5).

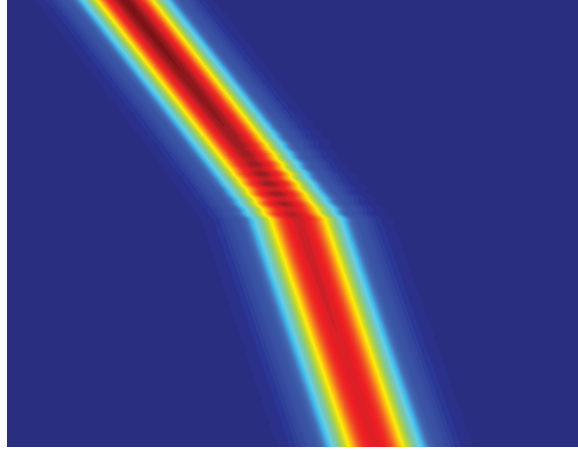


FIGURE 1.3 : Résultat d'une simulation électromagnétique réalisée avec le programme Moosh en polarisation TM montrant un faisceau réfracté à l'incidence de Brewster par un dioptre entre deux milieux d'indice $n_1 = 1$ et $n_2 = 1.5$.

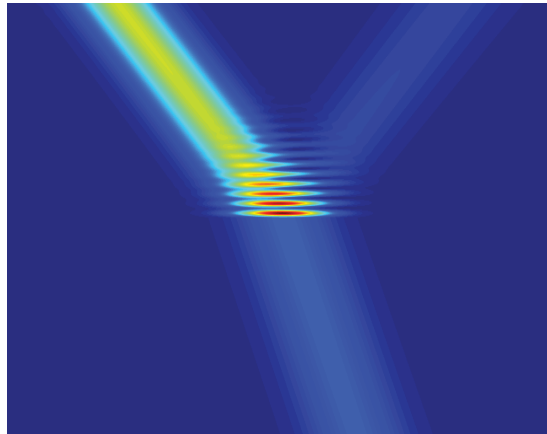


FIGURE 1.4 : Résultat d'une simulation électromagnétique réalisée avec le programme Moosh en polarisation TE montrant un faisceau entre deux milieux d'indice $n_1 = 1$ et $n_2 = 1.5$.

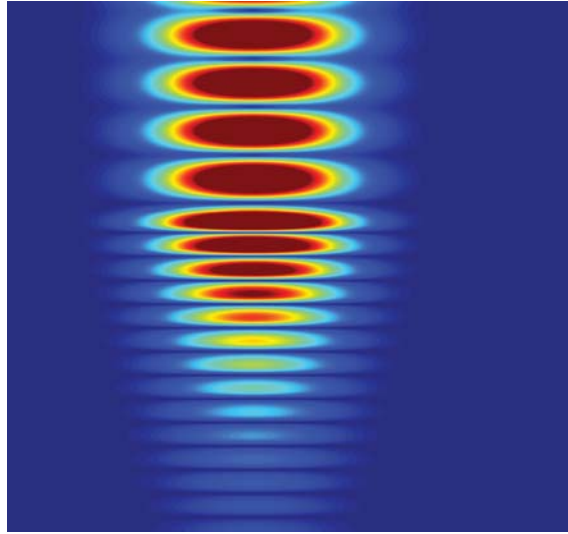


FIGURE 1.5 : Propagation d'un faisceau dans un miroir de Bragg, en incidence normale

1.1.3 Méthodes modales

Les méthodes modales de Fourier ont été inventées au milieu des années 90 par Moharam et Gaylor⁴¹, mais elles étaient instables en polarisation TM . C'est, m de scilicium indépendamment, Philippe Lalanne et Gérard Granet qui ont trouvé comment la rendre plus stable^{32,20}, ce qui a ouvert la voie à énormément d'utilisations de ces méthodes qui ont l'avantage d'être légères, même si elles ne prennent en compte que des géométries qui peuvent se découper en couches périodiques.

Le principe des ces méthodes est de décomposer la structures en couches invariantes suivant z . Pour chacune de ces couches, on calcule les modes qui peuvent s'y propager et leur constante de propagation verticale. Cela ressemble beaucoup à la méthode de résolution dans les milieux lamellaires, sauf que si on choisit de considérer 25 modes, il y a 25 coefficients pour les modes montants et 25 pour les modes descendants.

Ensuite, on écrit les conditions aux limites entre les couches réseaux, ou les couches ho-

mogènes. Ce sont les mêmes conditions de continuité que pour les milieux lamellaires, mais on obtient alors des matrices de diffusion pour chaque interface qui sont plus grandes : toujours avec notre exemple des 25 modes, la matrice d'interface est une matrice carrée de côté 50.

On peut aussi, facilement, écrire des matrices de couches de la même taille et généraliser le cascading pour pouvoir associer les matrices S pour les interfaces et les couches exactement de la même manière qu'on associe les matrices S pour les milieux lamellaires.

1.2 Structures photoniques

Même si les ordinateurs et les méthodes de fabrication permettent aujourd'hui d'envisager des structures toujours plus compliquées, les objets photoniques les plus importants et les plus utilisés et compris sont des multi-couches comme la couche anti-reflet ou les miroirs de Bragg ou encore les cellules photovoltaïques. On peut parfaitement les simuler avec les techniques de matrices S et Moosh et ainsi mieux comprendre leur comportement.

1.2.1 Couche anti-reflet

La couche anti-reflet entre deux milieux d'indices n_1 et n_2 est une couche d'indice intermédiaire $n = \sqrt{n_1 n_2}$ et d'épaisseur optique $\lambda_0/4$, soit une épaisseur réelle de $\frac{\lambda_0}{4n}$ où λ_0 est la longueur d'onde de travail. On peut montrer que dans ces conditions, une résonance spectralement très large permet d'obtenir un coefficient de transmission de 1. Quand il n'est pas possible de faire un milieu d'indice exactement n , on peut au moins conserver la bonne épaisseur optique. Ces différents comportements sont illustrés figure 1.6.

Il est intéressant de regarder ce qui se passe quand on fait varier l'épaisseur de la couche anti-reflet (voire figure 1.7). Si elle ne varie que très peu, c'est juste la résonance qui se déplace. Mais si on la double, dans ce cas on obtient à la place une anti-résonance et la couche crée un coefficient de réflexion encore plus élevé. Si on triple cette épaisseur, on retrouve une couche

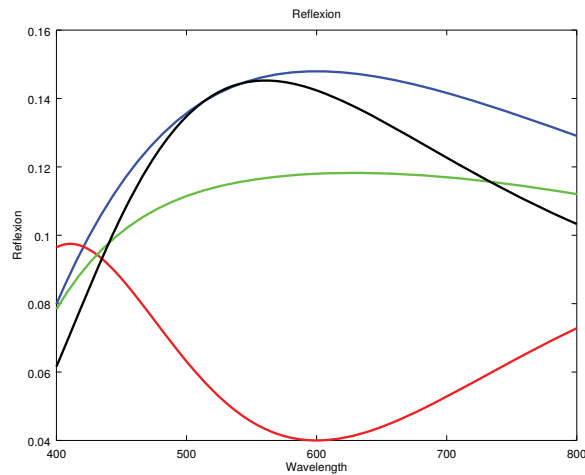


FIGURE 1.6 : La courbe en bleu montre le coefficient de réflexion pour une interface entre deux milieux d'indices 1 et 1.5. La courbe en rouge est le coefficient de réflexion pour une interface entre deux milieux d'indices 1.5 avec une couche anti-reflet dont l'indice est $\sqrt{1.5}$. En vert on a un indice 1.1 avec une épaisseur $\lambda/4 * 1.1$ enfin la courbe en noir montre qu'en changeant l'épaisseur, on change la longueur d'onde de résonance.

anti-reflet efficace, mais la largeur de la résonance a diminué par rapport à la couche la plus fine. C'est pour cette raison que la couche $\lambda/4$ est réellement le meilleur anti-reflet possible : elle fonctionne sur un large spectre.

1.2.2 Miroirs de Bragg

Le miroir de Bragg ou DBR (Distributed Bragg Reflector) est une superposition de couches planes transparentes d'indice de réfraction élevé et bas d'épaisseur $\frac{\lambda_0}{4n}$, où λ_0 est la longueur d'onde de travail et n l'indice optique de chaque couche. L'histoire des miroirs diélectriques est compliquée. On les appelle miroirs de Bragg par références aux travaux de William Lawrence Bragg (lauréat du prix Nobel de physique de 1915) sur la réflexion des rayons X par les couches atomiques, mais ce n'est pas à proprement parler Bragg qui a inventé le miroir diélectrique³⁶.

Grâce aux interférences constructives en réflexion et destructives en transmission, le mi-

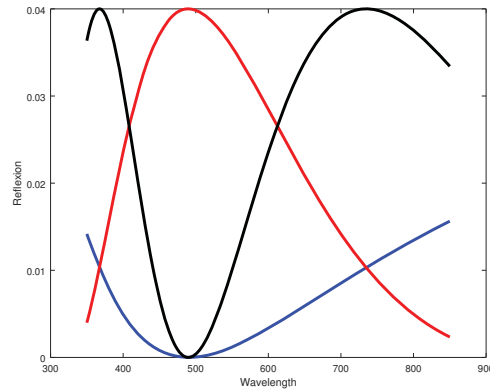


FIGURE 1.7 : Coefficient de réflexion en fonction de l'épaisseur de la couche antireflet. La courbe bleu indique la réflexion lorsque l'épaisseur de la couche est $\lambda/4$. On voit qu'elle montre la meilleur anti-reflet. La courbe rouge est la couche dont l'épaisseur est $\lambda/2$. Dans ce cas, le coefficient de réflexion est plus élevé à la longueur d'onde $600nm$; on a une anti-résonance. Enfin la courbe noire montre la réflexion de la lumière lorsque l'épaisseur de la couche anti-reflet est $3 * \lambda/4$. Avec cette épaisseur on obtient vraiment un anti-reflet où la résonance est plus étroite mais au même endroit que pour une épaisseur $\lambda/2$

roir de Bragg permet de réfléchir la lumière bien plus efficacement qu'un métal. Le coefficient de réflexion est d'autant plus élevé que le nombre de couches est élevé. Les miroirs de Bragg sont principalement utilisés pour la fabrication des cavités des lasers et diodes lasers. Leur forte réflectivité permet de réaliser des cavités optiques à fort coefficient de qualité assurant ainsi un bon confinement des photons.

Le changement d'angle d'incidence a tendance à décaler le spectre en réflexion du miroir (voir figure 1.8). Un miroir de Bragg possède donc des propriétés forcément sensibles à l'angle d'incidence.

Les miroirs de Bragg sont en réalité un exemple de structure photonique périodique qu'on appelle cristaux photoniques, justement à cause de leur régularité. Les cristaux photoniques ont été très étudiés dans les années 90, justement avec les techniques numériques évoquées ci-dessus. Les méthodes modales de Fourier, par exemple, ont été très utilisées dans ce contexte.

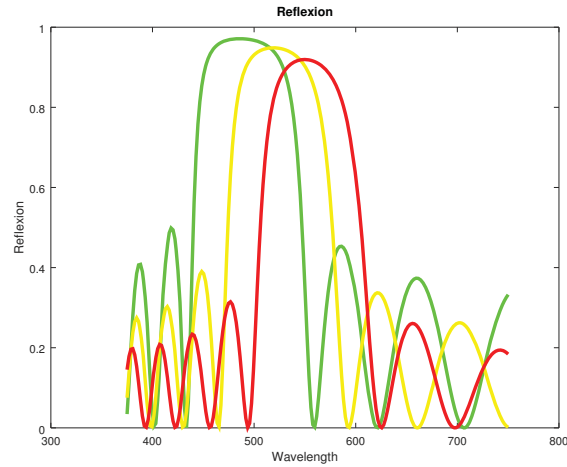


FIGURE 1.8 : Spectre de réflexion de la lumière pour divers angles d'incidence : $0^{\text{deg}} = 0$ pour la courbe rouge, $0^{\text{deg}} = 30$ pour la courbe jaune et $0^{\text{deg}} = 45$ pour la courbe verte. On constate que le spectre se déplace de la droite vers la gauche, donc vers les plus courtes longueurs d'ondes, au fur et à mesure que l'angle d'incidence augmente. Au passage, l'angle de réflexion augmente avec l'angle d'incidence, comme pour une interface simple.

Les miroirs de Bragg ont une largeur spectrale utile bien définie, et relativement étroite. Ce qui la définit, c'est le contraste d'indice. Plus celui-ci est grand, plus la bande interdite est large. La figure 1.9 montre sur quelques cas les modifications du spectre quand on modifie les indices des différentes couches en conservant leur épaisseur optique de $\lambda_0/4$.

1.2.3 Miroirs diélectriques à gradient

Comme illustré au paragraphe précédent, les miroirs de Bragg ont une largeur spectrale utile bien définie, et relativement étroite. On peut vouloir, pour des applications assez précises comme la mise en forme de pulse de lasers femto-seconde, avoir des miroirs diélectriques offrant un meilleur contrôle (une bande passante plus large, ou d'autres propriétés plus exotiques).

Dans ce cas, un certain type de structure peut être envisagé. Ce sont des miroirs diélec-

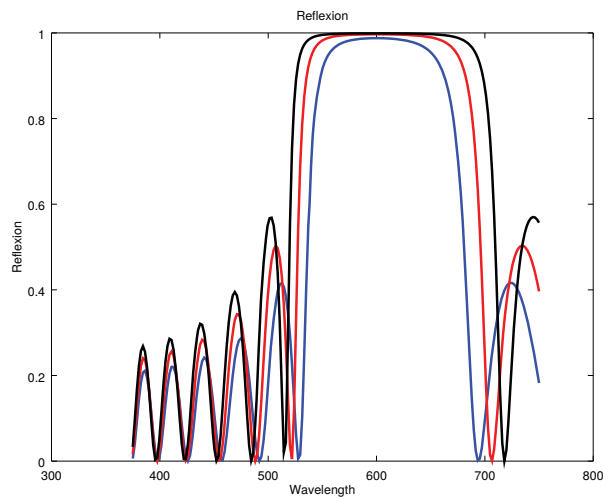


FIGURE 1.9 : Variation de la largeur du spectre de la lumière en fonction du contraste d'indices. Dans cette courbe, il est clair que la largeur de la bande interdite augmente en fonction de l'augmentation du contraste d'indice. L'indice optique de la première couche est $n_1 = 1.4$. La courbe indiquée en bleu, l'indice est 1.87. La largeur spectrale de cette courbe est visiblement inférieure à celle indiquée en rouge dont le second indice est 2. En fin la courbe tracée en noire a une largeur spectrale plus grande que les deux autres courbes du fait que son second indice a une valeur supérieure à celle de deux autres courbes égale à 2.12

triques dont les paramètres géométriques changeraient graduellement. On peut facilement comprendre pourquoi c'est intéressant dans le cas où on veut élargir la bande interdite : en empilant des miroirs de Bragg successifs, on élargit la bande interdite de la structure, même les différentes longueurs d'onde ne seront pas réfléchies au même niveau dans la structure.

De nombreux dispositifs existent^{61,60,26,49} utilisant ce principe et proposant des structures lentement variables, dites "chirped" en anglais. Un exemple est montré figure 1.10, provenant d'un article très cité de la communauté des lasers femto-seconde.

Ce que montrent les articles concernant ces miroirs diélectriques particuliers, c'est qu'ils ont une grande flexibilité. Au delà d'être réfléchissant, on peut les utiliser en contrôlant leur dispersion^{60,49}. Disposer de méthodes permettant de créer des miroirs diélectriques avec des fonctions modulables pourrait donc avoir un grand intérêt pratique.

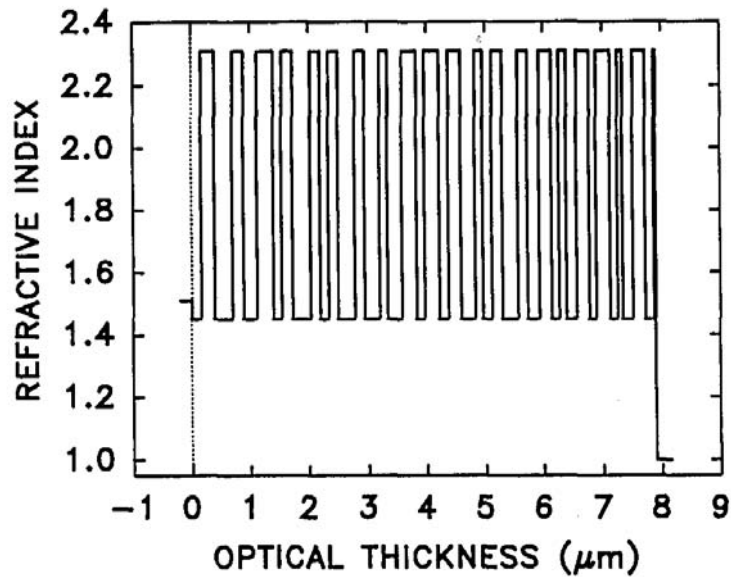


FIGURE 1.10 : Figure tirée de ⁶¹, montrant un miroir diélectrique à gradient utilisé pour les lasers femto-seconde.

1.2.4 Cellules photovoltaïques

Les cellules photovoltaïques peuvent être considérées comme des structures lamellaires en première approximation. En réalité certaines présentent une rugosité qui favorise l'absorption de la lumière, mais une modélisation de la cellule comme une structure multi-couche donne déjà de très bons résultats.

Le principe est de faire en sorte que la lumière soit absorbée dans une couche dite active, constituée d'un matériau semi-conducteur. Dans cette couche, des paires électron-trou sont alors générées. Comme le semi-conducteur est dopé de manière différente suivant la profondeur, on a des endroits dopés N et des endroits dopés P. Cela conduit à une séparation des électrons et des trous et à l'apparition d'une tension aux bornes du matériau semi-conducteur. Il faut ensuite pouvoir collecter ces porteurs de charge. L'arrière de l'électrode est en général

recouverte d'argent, qui en plus d'être conducteur, a l'avantage optique de réfléchir la lumière qui aurait pu traverser la couche active sans interagir. Des électrodes se trouvent aussi en face avant, en étant suffisamment proches pour collecter un maximum de courant, mais suffisamment éloignées pour permettre à la lumière de passer et d'atteindre la couche active. Pour la plupart des panneaux fabriqués à ce jour, la couche active est constituée de silicium.

La grandeur caractéristique à laquelle nous avons choisi de nous intéresser pour estimer l'efficacité optique d'une cellule est le courant de court-circuit. C'est le courant que la cellule est capable de générer lorsqu'elle est branchée en court-circuit. Pour la calculer, il faut

- Savoir quelle proportion de la lumière va être absorbée dans la couche active. Une façon de faire est de calculer la différence de flux du vecteur de Poynting entre l'interface supérieure et l'interface inférieure de la cellule grâce à une technique de matrice de diffusion, par exemple. C'est la partie optique de l'évaluation du courant de court-circuit. On notera $A(\lambda)$ la proportion du rayonnement incident ainsi calculée.
- Avoir une idée précise de la façon dont la cellule va être éclairée. Afin de pouvoir comprendre et analyser les différentes structures, on utilise les conditions standard. C'est à dire un éclairement idéal normalisé de 1000 W.m^{-2} avec un spectre solaire correspondant à $AM1,5$ (spectre solaire après avoir traversé l'atmosphère égale à $\frac{3}{2}$ fois celle de notre atmosphère) et à 25°C . Dans la suite on notera le spectre solaire par $\frac{dI}{d\lambda}$, $I(\lambda)$ représentant dans ce cas l'intensité lumineuse reçue si on cumule toutes les longueurs d'ondes plus petites que λ .
- Avoir une idée de l'efficacité de la transformation de photons en paires électron-trou, ce qu'on appelle le rendement quantique. Celui-ci est limité par les recombinaisons qui peuvent se produire - et qui se produisent souvent aux interfaces, par exemple. Comme nous nous intéressons surtout aux propriétés optiques, nous supposons que ce rendement est de 1 : tout photon absorbé par la couche active produit une paire électron-trou.

On peut alors définir, avec ce rendement unitaire, la densité spectrale de photons par

$$\frac{dN}{d\lambda} = \frac{1}{h\nu} \frac{dI}{d\lambda} = \frac{\lambda}{hc} \frac{dI}{d\lambda}. \quad (1.28)$$

et le courant de court-circuit est alors donné par

$$j_{sc} = \int A(\lambda) e \frac{dN}{d\lambda} d\lambda = \int A(\lambda) \frac{dI}{d\lambda} \cdot \frac{e\lambda}{hc} d\lambda \quad (1.29)$$

Une cellule photovoltaïque est donc la plus efficace lorsqu'on l'éclaire avec des photons qui ont juste l'énergie minimum nécessaire à la création d'une paire. Pour cette raison, il est intéressant d'utiliser plusieurs semi-conducteurs différents, que la lumière va rencontrer les uns après les autres. C'est les cellules multi-jonctions qui sont beaucoup plus efficaces mais beaucoup plus chères que les cellules simples à base de silicium. Le silicium lui-même n'est pas très absorbant dans la partie du spectre où les photons ont juste la bonne énergie, c'est pour cela qu'on utilise parfois d'autres matériaux comme le CdTe, plus absorbant, mais plus polluant et demandant des matériaux plus rares.

Une cellule photovoltaïque simple est finalement constituée, d'un point de vue optique,

- d'un substrat métallique (le contact arrière) qu'on peut considérer comme infini puisque la lumière n'y pénètre que de l'épaisseur de peau,
- d'une couche de semi-conducteur (la couche active) dont les propriétés optiques ne dépendent pas du dopage et sont supposées similaires à celle du matériau non dopé,
- d'une couche anti-reflet posée sur le semi-conducteur.

et on néglige les contacts avant, qui ne seront de toutes façons responsables que d'une diminution de l'éclairement incident (ombrage). En considérant ainsi une cellule photovoltaïque simple, on peut tout à faire utiliser Moosh pour la simuler.

La figure 1.12 montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde, ainsi que la densité

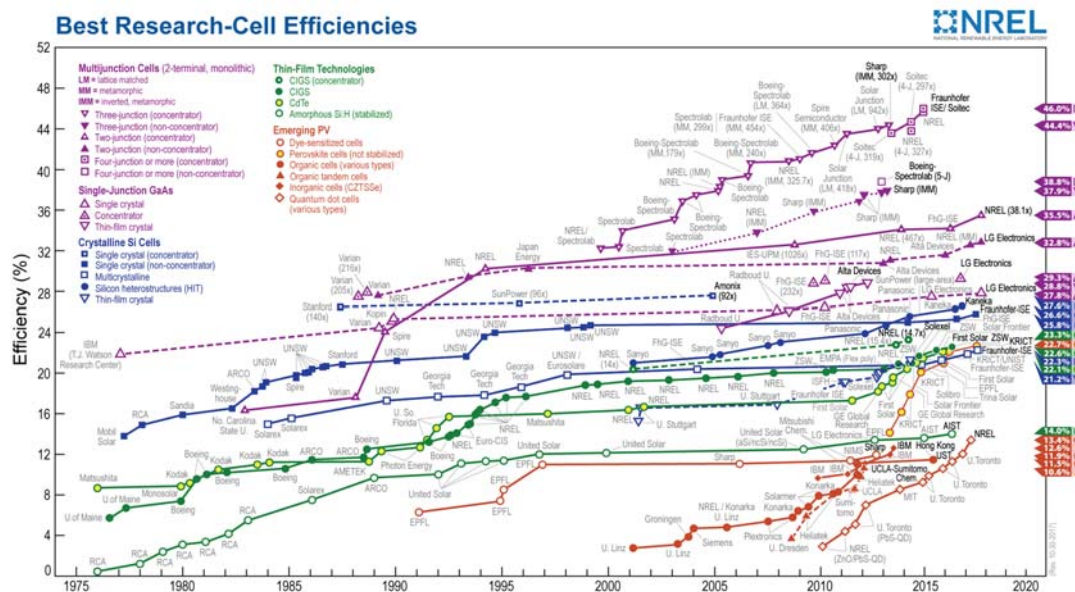


FIGURE 1.11 : Un diagramme célèbre de la NREL, montrant les différentes performances obtenues pour les cellules photovoltaïques, quelle que soit leur mode de fonctionnement.

spectrale de photons pour une cellule photovoltaïque constituée d'une couche anti-reflet d'indice 1.4 et d'épaisseur 116 nm, avec une épaisseur de silicium de 100 nm, posée sur de l'argent. On peut aussi voir les mêmes quantités sans l'anti-reflet.

1.3 Structures naturelles

Avec la généralisation de la microscopie électronique, on s'est aperçu dans les années 70 que nombreux insectes possèdent des structures photoniques, c'est à dire tirant partie d'effets interférentiels pour obtenir une réponse optique dont les colorants sont incapables. Les animaux ou les plantes ne pouvant pas utiliser de métal pour réfléchir la lumière, et les colorants ayant une réponse très faible, les structures photoniques ont énormément d'avantages, ce qui a pu favoriser certaines espèces lors de leur évolution. On soupçonnait ces effets interférentiels depuis Lord Rayleigh⁵² vers 1918, mais il a fallu attendre avant de pouvoir confirmer

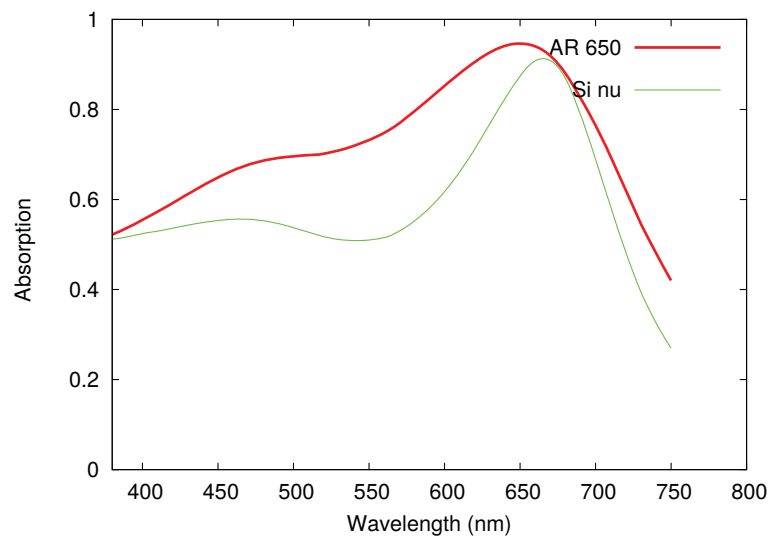


FIGURE 1.12 : Comparaison d'absorption d'une cellule quand celle ci est vêtue d'une couche anti-reflet de 116 nm et de 100nm de silicium et et lorsqu'on utilise pas un anti-reflet et en fonction de la longueur d'onde. La courbe montre que la présence d'un anti-reflet sur une cellule quelconque absorbe beaucoup de photon par rapport à une cellule photovoltaïque sans couche anti-reflet

pleinement cette intuition.

Les structures naturelles sont très nombreuses et très variées^{47,2}, et on en trouve chez énormément de plantes ou d'animaux, particulièrement chez les insectes. Nous allons voir ici notamment que les structures évoquées dans les sections précédentes (notamment les miroirs diélectriques) se trouvent aussi dans la nature^{3,56}.

Ces structures photoniques sont normalement faites des matériaux que l'on peut considérer transparents, comme la chitine, et dont les indices optiques varient typiquement de 1,4 à 1,7⁵. On obtient par exemple les indices les plus bas avec de la chitine pure, et les indices les plus élevés avec de la chitine contenant de la mélanine. Celle-ci est en général utilisée pour absorber la lumière (la pigmentation de la peau en est un exemple), mais aux échelles qui nous intéressent, sur de très petites épaisseurs, on peut dire qu'elle est transparente.

1.3.1 Élytres et miroirs diélectriques

Miroirs de Bragg

Les miroirs de Bragg sont les plus courantes des structures. Dans la nature, elles ont l'avantage de réfléchir la lumière fortement mais aussi d'être colorées. Les exemples d'insectes portant de tels miroirs de Bragg sont très nombreux. Parmi les plus communs en France, on peut citer les mouches de type *Lucilia*³⁸ ou les chrysomèles parmi les exemples les plus spectaculaires, même si on trouve ces structures aussi sur des crustacés (voir figure 1.14).



FIGURE 1.13 : Un exemple spectaculaire de miroir de Bragg sur une chrysomèle, un insecte qu'on trouve couramment dans la lavande (photo Jean-Raphaël Guillaumin).



FIGURE 1.14 : Miroir de Bragg présent sur la carapace de chitine d'un crabe *Ovalipes molle*⁴⁷

Miroirs diélectriques à gradient

Bien entendu, dans la nature, l'étroitesse spectrale des miroirs de Bragg peut ne pas suffire, et on peut aussi concevoir que modifier graduellement les propriétés d'un miroir de Bragg ne posent pas de réel problème à un organisme vivant. C'est ainsi qu'on trouve aussi des miroirs sur des crustacés (voir figure 1.15), par exemple. Il s'agit d'une structure qui n'est que très légèrement plus complexe que le miroir de Bragg, il ne faut donc pas s'étonner vu ses avantages optiques qu'on retrouve cette structure sur de nombreux animaux.

1.3.2 Les ailes des papillons Morpho

Les papillons Morpho ont depuis toujours suscité une grande curiosité et un grand intérêt pour leurs couleurs particulièrement éclatantes. Il faut aussi mentionner que la couleur bleue n'est que rarement présente dans les colorants naturels, donc les structures photoniques sont

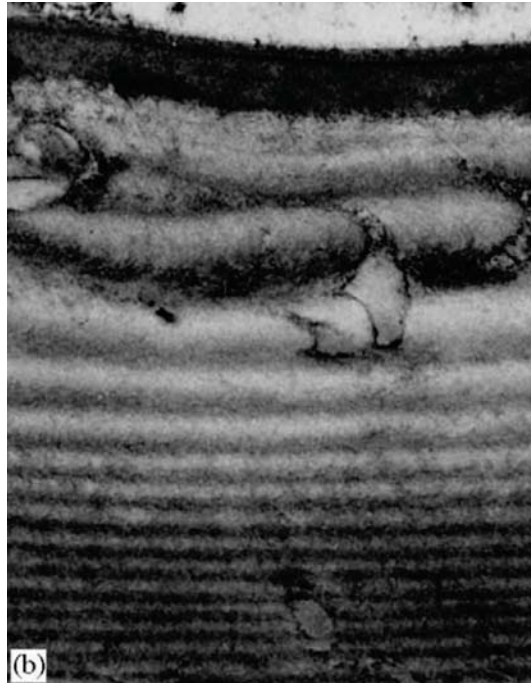


FIGURE 1.15 : Miroir diélectrique à gradient présent sur la carapace de chitine d'un crustacé Danaela⁴⁷

une façon efficace de les obtenir. Ils ont fait l'objet d'études très poussées dans les années 90^{64,1,27}.

Plusieurs espèces de Morpho existent et ils présentent chacun des propriétés optiques différentes - ce qu'on peut lier à une structure légèrement différente sur les ailes¹. Ces structures sont en matériau constitutif des écailles c'est à dire en chitine, un matériau presque parfaitement transparent d'indice 1.56^{19,68,33}.

La structure présente sur les ailes des Morpho est présentée figure 1.17. On peut voir qu'elles sont effectivement très variées et qu'elles peuvent être très complexes. Mais c'est aussi que dans un tel cas elles produisent des réponses optiques complexes.

L'exemple le plus emblématique est celui de Morpho rhetenor (voir figure 1.18), à la fois parce qu'il est d'un bleu très homogène et particulièrement éclatant, mais aussi parce que c'est

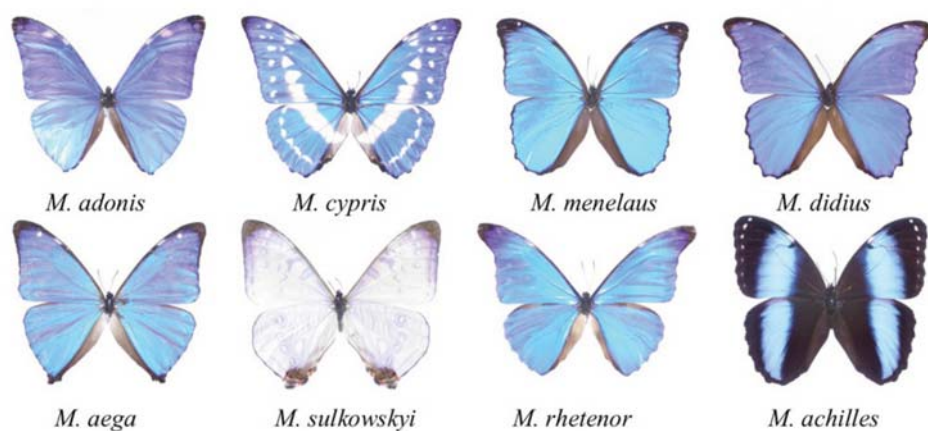


FIGURE 1.16 : Papillon de la famille des Morphidae. Cette image est tirée de²⁸.

l'espèce qui présente les structures les plus "pures".

Cette structure peut être caractérisée par un motif en "sapins" périodiques dans une direction, et essentiellement invariant dans l'autre (perpendiculairement à la coupe de la figure). On peut distinguer une périodicité verticale également, qui est à rapprocher de celle qu'aurait un miroir de Bragg constitué d'air et de chitine et réfléchissant la partie bleue du spectre.

Étant donné la nature presque périodique de la structure de *Morpho rhetenor*, il est possible de simuler sa réponse optique en utilisant une méthode modale de Fourier, ce qui a été fait très tôt¹⁹ (voir figure 1.19). Au sein de l'équipe, lors d'un stage en 2009, Marie-Claire Cambourieux a étudié ces structures également, pour mieux comprendre les raisons plus précises de la présence de certaines particularités.

Notamment, les structures des *Morpho* ont été présentées comme des miroirs de Bragg penchés pour expliquer leur périodicité apparente². En conséquence, quand on a tenté de reproduire ces structures, on a parfois négligé le côté inter-digité qui fait que les blocs de chitines alternent d'un côté et de l'autre du sapin. Cela n'a pas empêché d'obtenir un bleu soutenu, mais le stage de Marie-Claire Cambourieux a permis à l'équipe de comprendre que tout visait en

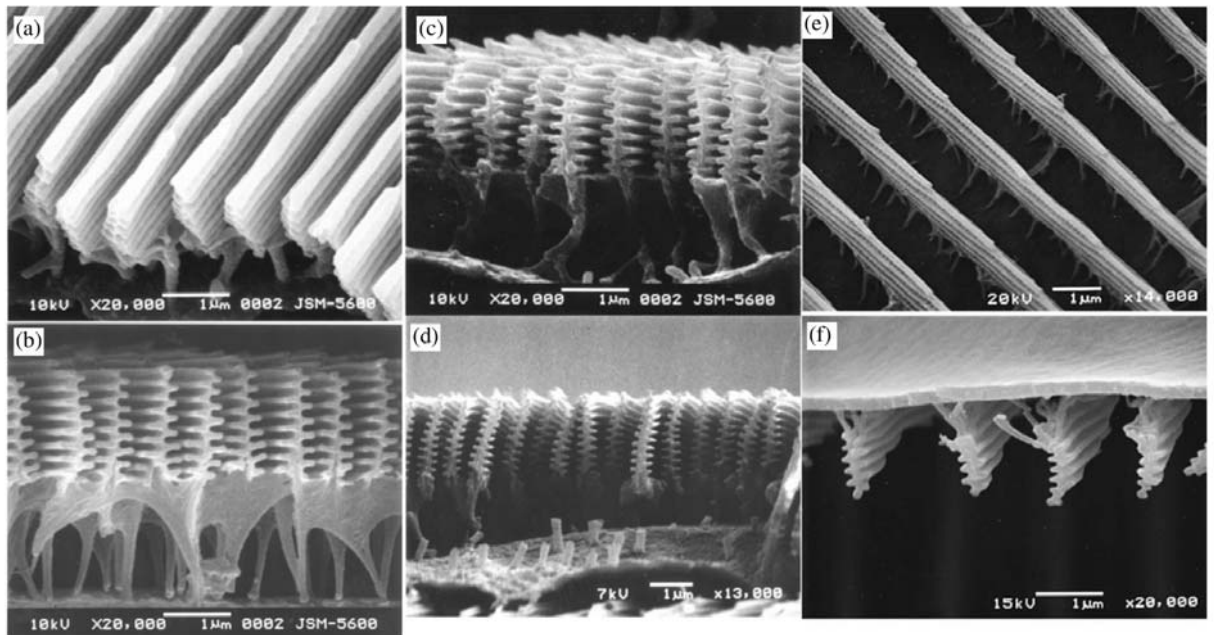


FIGURE 1.17 : Illustration tirée de²⁸. (a) et (c) écailles de base de *Morpho Didius*, (b) *Morpho Sulkowskyii*, (d) *Morpho Rhetenor*, (e) et (f) écailles de recouvrement de *Morpho Didius*.

fait à éliminer la réflexion spéculaire : à la fois le côté inter-digité, mais aussi la forme plus étroite de la structure vers le haut.

Il y a d'autres aspects de la structure sur lesquels il y a encore largement débat - notamment l'importance du désordre sur les propriétés optiques, certains allant jusqu'à dire que le désordre efface en quelques sorte complètement les aspects périodiques et les propriétés proches des réseaux de la structure tout entière. C'est un problème compliqué et intéressant, que nous n'avons pas abordé dans la suite.

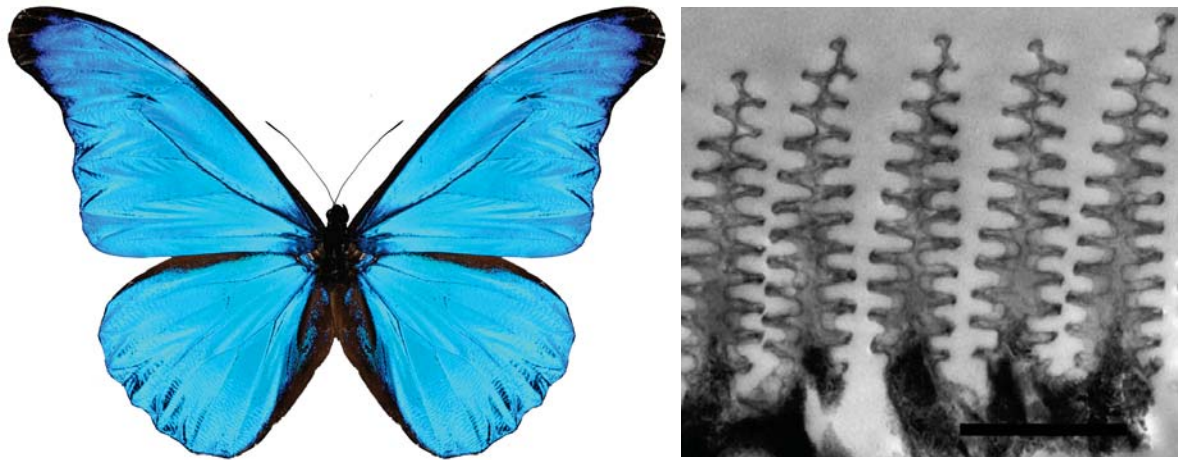


FIGURE 1.18 : A gauche on a le papillon *Morpho rhetenor* photographié par John Nielsen et à droite nous avons des images de la surface de cuticule de *Morpho rhetenor*⁵⁸

1.4 Conclusion

En définitive, la nature et la technologie sont finalement remplies de structures photoniques assez proches - d'ailleurs les scientifiques s'inspirent largement de la nature pour imaginer de nouvelles architectures, comme c'est le cas avec le *Morpho*. Et on sait simuler le comportement optique de ces structures grâce à des méthodes numériques adaptées qui ont le mérite d'être très légères et rapides. C'est pour cette raison d'ailleurs que très tôt, l'idée est venue d'essayer d'optimiser des structures photoniques pour aller au delà des structures bio-inspirées. Cette branche n'a cependant pas été couronnée de succès, et c'est ce qui a motivé notre étude : il nous semblait étrange que les optimisations de structures photoniques ne redonnent jamais ni les structures naturelles ni les structures artificielles (comme les cristaux photoniques). C'est pour cela que nous nous sommes lancés dans l'optimisation de structures photoniques sur des cas très simples tout d'abord, comme expliqué dans le chapitre suivant.

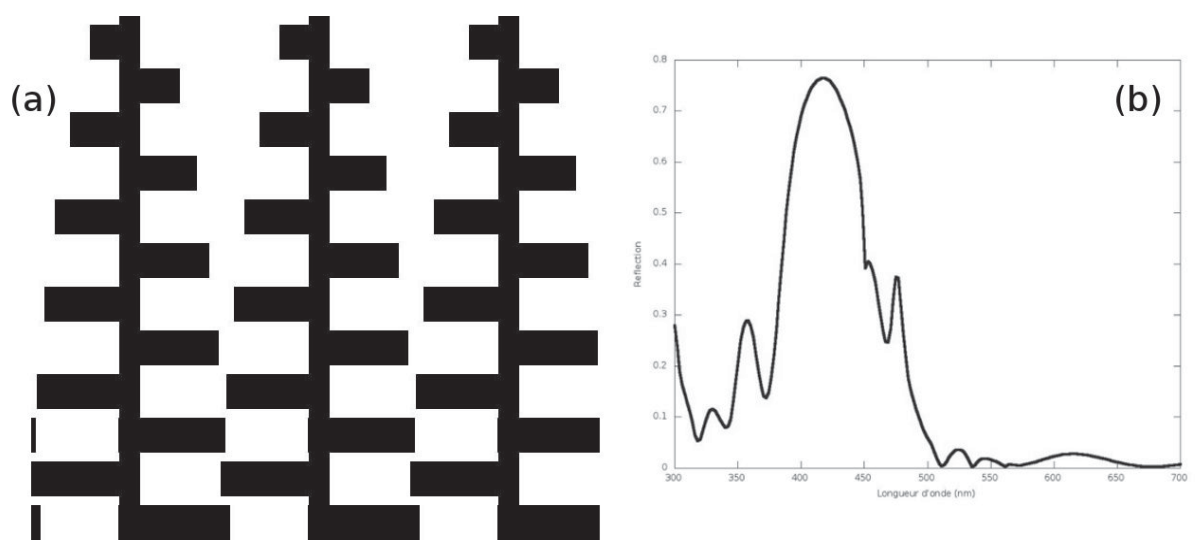


FIGURE 1.19 : (a) Motif de la structure des Morpho idéalisé et pris pour référence pour la simulation. La période est de 450 nm , la hauteur totale de l'ordre de $1.5\text{ }\mu\text{m}$ ici. (b) Spectre en réflexion calculé pour un éclairage en incidence normale, très comparable à ¹.

2

Optimisation des structures photoniques

2.1 Introduction

Alors que la nature est pleine de structures photoniques extraordinaires et qu'on sait qu'elles sont issues d'un très lent processus d'optimisation par la sélection naturelle, les exemples d'optimisation de structures photoniques complexes sont rares et n'aboutissent en général pas à des résultats possédant la même élégance que les structures naturelles. L'intérêt pratique de ce type d'optimisation est pourtant indubitable, et les algorithmes d'optimisation souvent directement inspirés de l'évolution ont fait des progrès très importants. Ici, nous montrons dans

ce chapitre qu'en appliquant des algorithmes évolutionnaires à l'optimisation de structures photoniques, il est tout à fait possible de faire émerger des solutions que l'on retrouve dans la nature. Cette approche fournit un éclairage inédit sur le rôle optique exact de ces structures, sur les contraintes qui les ont fait surgir et sur leur fonctionnement physique. Au delà de ces aspects, ces cas tests inspirés par la nature peuvent être utilisés pour comparer les différents types d'algorithmes évolutionnaires et mieux comprendre leur efficacité.

Je vais commencer par passer en revue quelques techniques d'optimisation numériques, en détaillant leur fonctionnement et leurs propriétés et en distinguant les techniques d'optimisation locales (souvent déterministes) et globales (en général stochastiques). Je détaillerai ensuite les premiers résultats que j'ai obtenus grâce à un algorithme évolutionnaire moyennement efficace, puis les résultats obtenus en collaboration avec l'INRIA utilisant des algorithmes très efficaces. Enfin, je discuterai des implications de ce travail.

2.2 Algorithmes d'optimisation

Depuis le 3^{ème} siècle avant notre ère les premiers problèmes d'optimisations ont été créés par un mathématicien de la Grèce antique du nom d'Euclide. Trois siècles plus tard, le mathématicien grec du 1^{er} siècle après J.-C Héron d'Alexandrie dans *Catoptrica* énonce le « principe du plus court chemin » dans le contexte de l'optique. Aujourd'hui, c'est dans un contexte différent que ces problèmes d'optimisation se posent. Les progrès des calculs sur ordinateur font qu'on peut aujourd'hui essayer de trouver le minimum de n'importe quelle fonction d'autant de variables que l'on veut, appelée fonction de coût, de façon numérique. C'est très intéressant en physique, parce que les progrès de la modélisation font qu'on peut comme ça trouver la meilleure structure pour une fonction précise.

On appellera l'espace déterminé par les variables de la fonction, l'espace de recherche. C'est comme un espace des phases en physique. Quand le nombre de variables augmente, il devient

très difficile de simplement représenter la fonction ou d'en faire une carte. Pour représenter une fonction d'une seule variable, on utilise souvent 1000 points. Si on accepte seulement 10 points pour chaque variable, dans des intervalles fixés, il faut 10^N points pour N variables. Et c'est une représentation très imparfaite. Dans la suite, on regarde des problèmes qui ont jusqu'à 40 variables. Il est impossible de calculer 10^{40} points de la fonction de coût. Il faut donc absolument des méthodes beaucoup plus efficaces.

Il existe plusieurs méthodes d'optimisations déterministes selon la complexité des problèmes à résoudre. On peut les classer en deux grandes catégories⁴⁶ : les méthodes locales et les méthodes globales.

2.2.1 Méthodes d'optimisation locales

Cette famille de méthodes recherche l'optimum le plus proche du point de départ de l'algorithme dans l'espace de recherche, en utilisant des méthodes d'explorations spécifiques.

Ces différentes méthodes sont déterministes du fait que lorsqu'on les applique à des problèmes, ils donnent des solutions qui ne varient pas quelque soit les nombres des exécutions et que le temps d'exécution reste toujours constant. Pour cette raison, ces méthodes locales déterministes sont appelées heuristiques. Elles ne sont vraiment utilisables lorsque la solution optimale obtenue est totalement au voisinage du point de départ ou bien si la représentation graphique de la fonction à minimiser ou à maximiser est entièrement située au dessus de chaque segment c'est à dire que la fonction optimale est convexe. Elles sont aussi des méthodes de choix quand on veut trouver ou améliorer une solution, mais que la fonction de coût est vraiment très difficile à calculer. C'est souvent le cas en milieu industriel.

Néanmoins ces algorithmes appelés heuristiques ne sont pas à hauteur de résoudre des problèmes vraiment difficiles et particulièrement complexes car l'objectif fondamental c'est de trouver le minimum global qui correspond à la meilleure solution du problème posé, pas

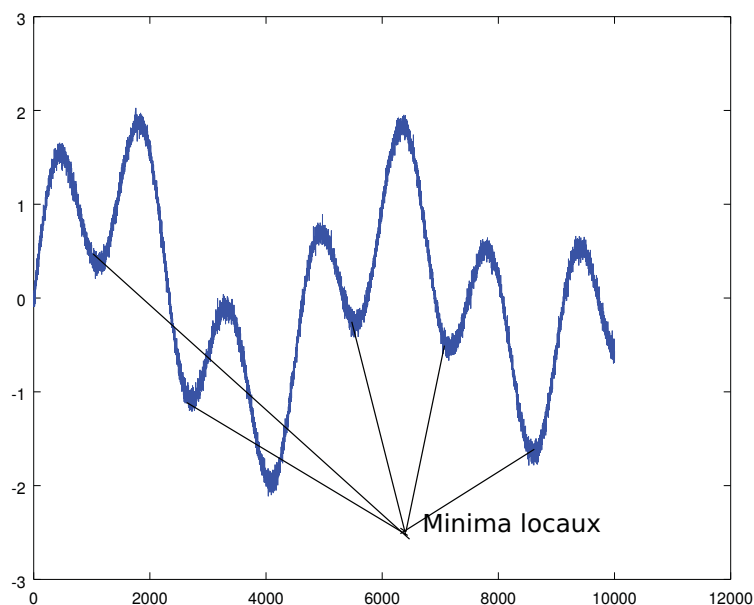


FIGURE 2.1 : Représentation schématique des minimum locaux dans pour une fonction non convexe - et que les heuristiques locales ne peuvent pas résoudre du fait de la complexité de trouver le minimum global de la fonction pour ces méthodes.

juste l'optimum local le plus proche (voir figure 2.1). Les méthodes globales seront l'objet de la section suivante. Pour l'instant, voyons deux méthodes locales très répandues : la méthode du gradient^{34,46} et la méthode du simplexe de Nelder et Mead³¹

Méthode de gradient

La méthode de gradient est utilisée depuis longtemps parmi les autres méthodes d'optimisations. Cet algorithme d'optimisation suppose que la fonction de coût à minimiser peut être différentiable de façon partielle. C'est un algorithme itératif, qui utilise une séquence d'instruction à répéter pour améliorer successivement la solution jusqu'à ce que le résultat soit considéré satisfaisant. C'est par exemple celui utilisé par Moosh⁹ pour trouver les zéros des relations de dispersion dans le plan complexe.

On considère une suite des valeurs x_i de façon itérative en fixant un point initial x_0 au

hasard. A partir du point initial, et pour chacun des points suivants, on détermine le gradient de la fonction de coût à minimiser au point x_k qu'on va noter ici $\nabla f(x_k)$. A partir du point on se déplace dans la direction opposée au gradient, pour que la fonction décroisse. On peut donc écrire qu'on trouve les points de la façon suivante

$$x_{i+1} = x_i - \lambda_i \nabla f(x_i) \quad (2.1)$$

où $-\lambda_i \nabla f(x_i)$ correspond au déplacement à chaque itération, et où λ_i est le pas. Si jamais $f(x_{i+1}) > f(x_i)$ on diminue en général le pas pour être sûr que la fonction de coût diminue. Après on se donne un critère d'arrêt de l'algorithme correspondant à notre satisfaction. Par exemple une condition sur le nombre maximum de pas ou bien lorsque $-\lambda_i \nabla f(x_i) < \epsilon$ un, seuil de tolérance supérieur ou égal à 0.

Cette méthode donne un bon résultat si la valeur de départ choisie x_0 est réellement très voisine de la valeur du minimum global de la fonction de coût plutôt que d'un minimum local, et aussi le pas d'apprentissage λ_i est suffisamment petit. Par contre si le pas d'apprentissage λ_i est trop grand et qu'on ne le fait pas varier, les méthodes de gradient présentent un comportement chaotique ou même divergent. Enfin lorsque la valeur de départ x_0 n'a pas été choisie au départ proche du minimum global ou dans son bassin d'attraction, on est sûr de converger vers le minimum local du bassin d'attraction dans lequel on se trouve.

En guise de conclusion, nous dirons que la méthode de gradient est une méthode d'optimisation qui ne peut être appliquée pour les problèmes d'optimisation même un peu complexes.

Méthode de Nelder et Mead

La méthode de Nelder et Mead^{44,34,35} est un algorithme d'optimisation locale très utilisé, peut-être même le plus utilisé. Elle a été publiée en 1965 par John Nelder et Roger Mead^{44,51}. Cette méthode est souvent appelée méthode du simplexe du fait qu'elle repose sur l'utilisation

de simplexes, la généralisation du triangle à une dimension quelconque. Si on note par N la dimension du problème à résoudre, on utilise un polytope, le simplexe de $(N+1)$ sommets dans l'espace de recherche. On peut se le représenter à deux dimensions, c'est un triangle. A trois dimensions, c'est une pyramide. Ensuite, il est très difficile de se le représenter. Cette méthode est importante du fait qu'elle trouve vraiment une population de solutions (les sommets du polytope) au lieu d'une solution unique et qu'elle n'utilise pas les dérivées de la fonction de coût à minimiser - elle utilise seulement les valeurs de f aux sommets polytope. En cela, elle ressemble beaucoup aux algorithmes d'optimisation globaux que nous verrons après.

Pour générer le polytope de départ, on choisit un point x_1 de l'espace de recherche, et on propose des points de telle sorte qu'ils forment une famille de $N + 1$ points $\{x_i\}$. Ce choix est généralement orthogonale de la manière suivante

$$x_{i+1} = x_1 + \lambda e_i \quad (2.2)$$

$\forall i \in [1, N]$, où les e_i sont les vecteurs unitaires linéairement indépendants et λ une constante adaptée à la caractéristique de l'espace de recherche. Il est possible dans certaines applications, de choisir des λ_i différents pour chaque vecteur de direction. En général, on prend une famille de vecteurs orthonormés.

Pour chaque itération, tous les différents points x_i du dernier polytope sont ordonnés de manière à satisfaire la condition

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq f(x_N) \leq f(x_{N+1}) \quad (2.3)$$

On prend alors le moins bon des points, et on applique différentes déformations géométriques au polytope pour améliorer ce point : la réflexion, la contraction, l'expansion et le

rétrécissement. A chaque itération, le polytope est remplacé par les meilleurs des nouveaux points calculés s'il se trouve que pour le nouveau point la valeur de la fonction de coût est plus basse. L'algorithme s'arrête lorsque la variation entre le meilleur et le plus mauvais point du polytope est plus petite qu'un seuil pré-déterminé.

Dans la figure 2.2 on a un polytope à quatre (4) points où on peut voir facilement les différents effets géométriques sur une fonction à trois (3) dimensions. On considère ici que le point x_4 est le moins bon en terme d'une fonction de coût donc le point mauvais. Lors de l'itération il sera donc remplacé par un autre point x'_4 si ce dernier point a une meilleure valeur de la fonction objectif.

Pour mieux détailler cette méthode, nous allons commencer maintenant par calculer un nouveau point x_G que nous allons appelé centre de gravité des points $(x_1, \dots, x_N)$ du polytope en choisissant d'enlever x_{N+1} du fait qu'on suppose que ce point est le moins bon, (vu qu'ils sont ordonnés).

$$x_G = 1/n \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq i_0}}^n x_i \quad (2.4)$$

où x_G représente le centre de gravité des différents points de solution qui est égal à la moyenne arithmétique des tous les points de 1 à N .

Cette méthode de simplexe avance en passant par plusieurs opérateurs que nous allons présenter dans la figure suivante¹⁶ (voir figure 2.2). On peut les appeler : réflexion, contraction, expansion, rétrécissement et on va les appliquer successivement au polytope, en remplaçant petit à petit les points du simplexe par les nouveaux, s'ils sont bien meilleurs.

Le simplexe commence sa transformation par une phase de réflexion. On obtient un nouveau point x_r dans l'espace de recherche qui s'écrit de cette manière :

$$x_r = (1 + \alpha)x_G - \alpha x_{N+1} \quad (2.5)$$

On a une réflexion de x_{N+1} par rapport au point x_G , avec un coefficient α qui module cette réflexion. On poursuit ensuite par

- La phase d'étirement. Dans ce cas, on a $f(x_r) \leq f(x_N)$ on est en phase d'étirement et on détermine le nouveau point x_e

$$x_e = \gamma x_r + (1 - \gamma) x_G \quad (2.6)$$

Ensuite on supprime les autres points et on les remplace par le $x - (N + 1)$ par les meilleurs des deux points x_r ou bien x_e .

- La phase de contraction. Lorsqu'on a $f(x_N) \leq f(x_r)$ on commence par la phase de contraction. Ici on a deux cas de contraction :
 1. Si on a $f(x_r) \leq f(x_{N+1})$ alors, on obtient un nouveau point que nous notons par x_c et on le détermine de la manière suivante :

$$x_c = \rho x_r + (1 - \rho) x_G \quad (2.7)$$

Partant de là si le point x_c est meilleur, on remplace x_{N+1} .

2. Si on a la condition $f(x_{N+1}) \leq f(x_r)$ dans ce cas le on obtient le nouveau point de cette façon :

$$x_c = \rho x_{N+1} + (1 - \rho) x_G \quad (2.8)$$

Et on remplace le point existant x_{N+1} par x_c s'il est vraiment le meilleur en terme du fonction de coût.

Pour chacun de ces deux cas, cette dernière transformation géométrique marque la fin de l'itération.

Lorsque l'itération est terminée, on trie à nouveau les points $f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq$

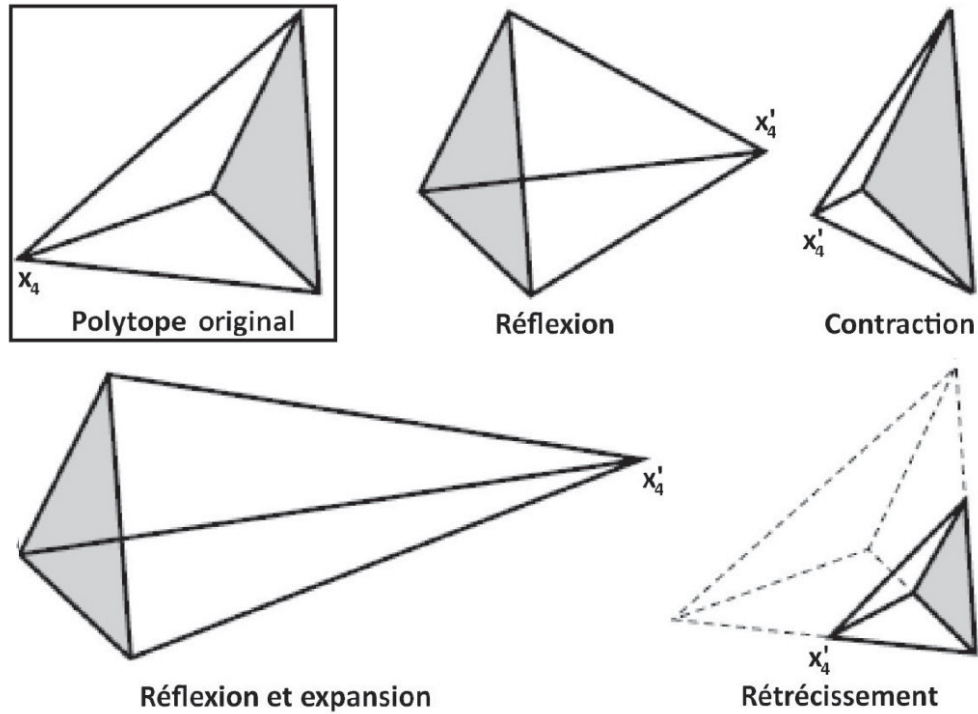


FIGURE 2.2 : Différentes représentation schématique du simplexe de Nelder et Mead Les traits discontinus représentent effectivement le simplexe avant la modification et le signe + montre le centre des sommets hors mis les points les plus mauvais en fonction de coût.¹⁶

$f(x_N) \leq f(x_{(N+1)})$ et on commence une nouvelle itération, tant que la condition d'arrêt n'est pas vérifiée. En général la recherche s'arrête lorsque les valeurs des fonctions de coût au sommets sont très proches.

Les coefficients α , γ , ρ et σ sont les paramètres de la méthode décrivant les transformations géométriques. Par défaut, on fixe $\alpha = 1$, $\gamma = 2$ et $\rho = \sigma = \frac{1}{2}$ ²¹.

On constate que cette méthode d'optimisation ne peut être appliquée que lorsque le minimum de la fonction de coût recherché est loin de la limite du domaine de recherche, ou bien que le domaine de définition de la fonction n'est pas trop complexe ou est globalement convexe. Ceci n'est pas toujours le cas. Ensuite, mais comme pour tous les algorithmes d'optimisation

finalement, au fur et à mesure que la taille N augmente, l'obtention de solutions satisfaisantes devient de plus en plus incertaine.

2.2.2 Méthodes d'optimisation globales & stratégies évolutionnaires

Les méthodes locales ont des domaines de compétences limités lorsqu'il y a plusieurs minima locaux car elles risquent de tomber vers une solution rapidement et de se tromper sur l'optimum réel de la fonction. C'est pour cette raison que les méthodes globales répondent aux attentes des problèmes très difficiles, avec des dimensions de l'espace de recherche importantes^{11,12}.

Ces algorithmes globaux sont des algorithmes stochastiques itératifs et traitent généralement des problèmes d'optimisation complexes c'est pourquoi on les appelle des métaheuristiques⁶. La plupart de ces algorithmes d'optimisation sont issus des domaines de la recherche opérationnelle et de l'intelligence artificielle. Pour donner une idée de leur efficacité sur les cas considérés dans ce chapitre, ils peuvent s'approcher de ce qui semble être un optimum global dans un espace à 40 dimensions en seulement 10^4 évaluations de la fonction de coût.

Pour réussir cette prouesse, cette catégorie de méthode est totalement basée sur des optimisations utilisant une information plus globale sur la fonction f à minimiser, et comme le préfigure Nelder et Mead, sur l'utilisation de "populations" de solutions^{40,46} que l'algorithme fait évoluer au fur et à mesure. Ces méthodes globales métaheuristiques incluent des algorithmes provenant d'analogies avec les phénomènes biologiques naturels appelés les algorithmes d'intelligence en essaim et les algorithmes issus de la théorie de l'évolution par la sélection naturelle que nous appelons par la suite des algorithmes évolutionnaires.

Les algorithmes évolutionnaires

Les Algorithmes Evolutionnaires (on parle souvent d'EC pour "Evolutionary Computation"), sont une famille d'algorithmes qui s'inspirent de la théorie de Darwin et de la sélection naturelle⁸. L'idée est que si les êtres vivants sont si efficaces pour survivre et produire des structures si extraordinaires, c'est parce qu'ils sont issus d'un processus de sélection naturelle qui ne permet qu'aux individus les plus adaptés de survivre et de transmettre leurs gènes à leur descendance. Des variations non dirigées appelées mutations peuvent en plus apparaître dans le code génétique des individus. Ces principes fondamentaux de la théorie de Charles Darwin ont été énoncés en 1859.

Dans les années passées, on a développé des métaheuristiques inspirées de ces processus en espérant qu'elle seraient efficaces pour optimiser des structures. La figure 2.3 décrit le squelette d'un algorithme évolutionnaire type, commun à la plupart des instances classiques d'AEs.

Le principe d'un algorithme évolutionnaire se présente de la manière suivante :

1. initialisation de la population $P(t)$, $t = 0$ au hasard ;
2. évaluation de la population courante $P(t)$: calcul de la fonction de coût pour tous les points de la population ;
3. sélection de certains individus de $P(t)$ en fonction de leur fonction coût f (par exemple les meilleurs) : les "parents" $P_0(t)$;
4. croisement entre parents et création des "enfants" (des nouveaux points) $\Rightarrow P_1(t)$;
5. mutation (perturbation aléatoire) des individus de $P_1(t)$ $\Rightarrow P_2(t)$;
6. évaluation de $P_2(t)$;
7. formation de la nouvelle population $P(t+1)$ à partir des individus de $P(t)$ et de $P_2(t)$, par exemple en choisissant les meilleurs individus appartenant à $P(t)$ et à $P_2(t)$;
8. $t \rightarrow t + 1$;

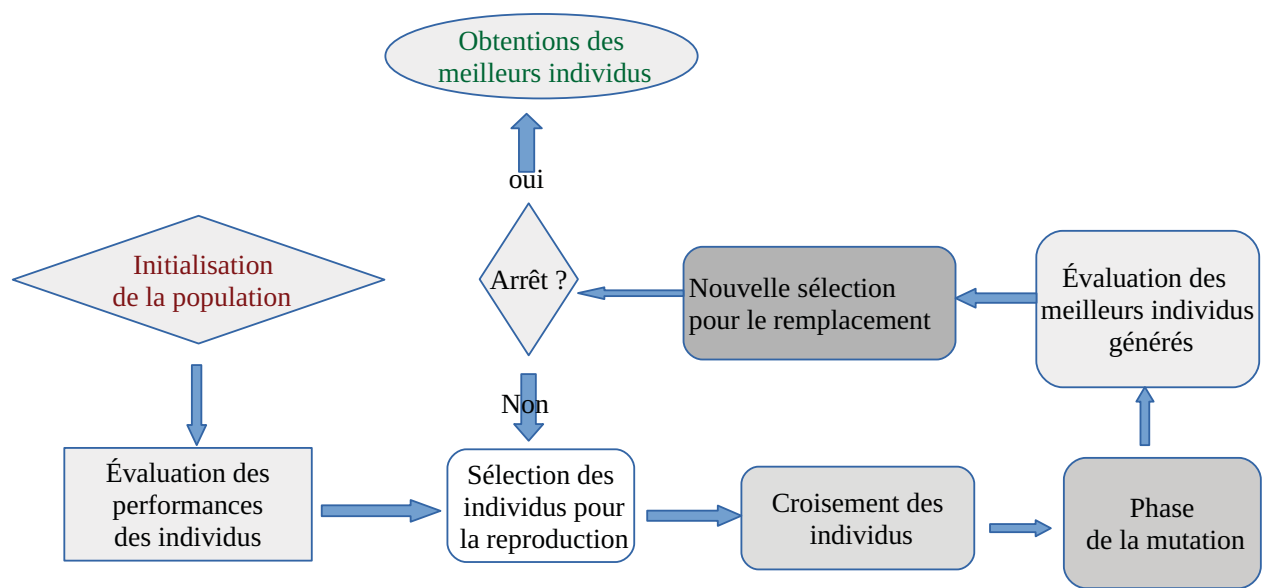


FIGURE 2.3 : Schéma résumant le fonctionnement d'un algorithme évolutionnaire

9. si le critère d'arrêt n'est pas satisfait, retour en 3.

Stratégie d'évolution ES (Evolution Strategy)

La Stratégie d'Évolution appartient à la classe des algorithmes évolutionnaires⁴⁸. Cette méthode d'optimisation a été proposée pour la première fois par Ingo Rencherberg⁵³. Elle est le tout premier algorithme évolutionnaire et est développée par les travaux de Ingo Rechenberg, P. Bienert et Hans-Paul Schwefel sur la conception de profils aérodynamiques durant la fin des années 1960.

L'algorithme de stratégie d'évolution *ES* le plus simple n'utilise qu'un seul individu. A chaque itération, il produit par mutation un enfant à partir de l'individu et on choisit par sélection l'un des deux pour pouvoir le conserver dans la "population". Cet algorithme est appelé *twomemberedES* et noté $(1 + 1) - ES$.

Comme sur cette version des *ES* on n'a pas vraiment pris en considération la notion de population, une version "multimembered" a été mise au point par Rechenberg que nous allons noter par $(+1) - ES$, où > 1 désigne les parents qui concourent à la génération d'un individu enfant. C'est pour cela que la recombinaison des parents dans ces algorithmes a été possible du fait d'introduire plus d'un parent. Il y a aussi d'autres versions de multimembered *ES*, qui sont basées sur la procédure de sélection des individus proposé par Schwefel. Pour obtenir une nouvelle génération, on génère λ individus à partir de μ parents et on ne conserve que les μ meilleurs individus. Lorsque la sélection se fait parmi les descendants et les parents, le multimembered est noté $(+) - ES$. Et lorsque la sélection ne porte que parmi les descendants, c'est à dire qu'il est nécessaire que λ soit supérieur à μ , alors dans ce cas, le schéma est appelé $(,) - ES$.

Il y a deux autres versions de *ES* connues dont les notations sont : $(\mu/\rho + \lambda) - ES$ et $(\mu/\rho, \lambda) - ES$ où ρ représente un paramètre supplémentaire qui est le nombre de parents

impliqués dans la procréation d'un individu enfant.

L'algorithme le plus connu est cependant la méthode Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES).

Méthode CMA-ES

Cette méthode a été proposée et étudiée en profondeur^{30 25 22 62}. Cet algorithme basé sur l'adaptation d'une matrice de covariance utilisée pour générer de nouvelles solutions, donc des recombinaisons au sein du nuage de points qui soient les plus pertinentes possibles. CMA-ES est un algorithme très utilisé, considéré comme évolutionnaire, mais avec une recombinaison mathématiquement très complexe. Il est cependant aussi considéré comme un des meilleurs algorithmes d'optimisation dans les cas continus, comme c'est le cas en photonique par exemple.

Les algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques (GA pour Genetic Algorithms) sont les algorithmes évolutionnaires les plus connus et les plus répandus²³. Ils ont notamment subi un grand élan lors de la parution du livre de Goldberg¹⁷. Ces algorithmes se détachent en grande partie par la représentation des données du génotype, initialement sous forme d'un vecteur binaire et plus généralement sous forme d'une chaîne de caractères.

Chaque étape de GA est associée à un opérateur décrivant la façon de manipuler les individus :

- **Sélection.** Pour déterminer quels individus sont plus enclins à se reproduire, une sélection est opérée. Il existe plusieurs techniques de sélection, les principales utilisées sont la sélection par tirage à la roulette (roulette-wheel selection), la sélection par tournoi (tournament selection), la sélection par rang (ranking selection), etc^{18 4}.
- **Croisement.** L'opérateur de croisement combine les caractéristiques d'un ensemble d'in-

dividus parents (généralement deux) préalablement sélectionnés, et génère de nouveaux individus enfants. Là encore, il existe de nombreux opérateurs de croisement, par exemple le croisement en un point, le croisement en n-points ($n \geq 2$) et le croisement uniforme [5]. Ils ont tous en commun de manipuler directement les bits qui codent pour les individus sans faire attention à leur signification.

- **Mutation.** Les descendants sont mutés, c'est-à-dire que l'on modifie aléatoirement une partie de leur génotype, selon l'opérateur de mutation.
- **Remplacement.** Le remplacement (ou sélection des survivants), comme son nom l'indique, remplace certains des parents par certains des descendants. Le plus simple est de prendre les meilleurs individus de la population, en fonction de leurs performances respectives, afin de former une nouvelle population (typiquement de la même taille qu'au début de l'itération).

Les algorithmes génétiques ne sont pas efficaces sur des problèmes où l'espace des solutions est continu, comme ceux que l'on considère bien souvent en pratique. Cela vient du fait que l'opérateur de croisement, en choisissant et en mélangeant au hasard des bits entre différentes solutions, n'a que très peu de chances de créer un individu pertinent. Au contraire, il a plutôt tendance à créer un nouvel individu presque aléatoirement dans l'espace de recherche. Beaucoup d'articles ont montré que cette approche était moins efficace qu'à peu près toutes les autres²⁴ pour les problèmes continus. Les stratégies évolutionnaires ou algorithmes évolutionnaires font appel à un codage flottant, ce qui permet de faire des combinaisons beaucoup plus efficaces, comme on va le voir dans l'algorithme suivant.

Un algorithme évolutionnaire simple

Quand j'ai commencé mes travaux, l'idée était au départ d'appliquer les méthodes d'optimisation à des structures photoniques, et notamment photovoltaïques pour savoir dans plu-

sièurs situations quel était l'optimum optique, pour voir si on pouvait améliorer encore des structures existant déjà. Cet algorithme a été mis au point initialement pour un problème de configuration d'agrégats moléculaires, justement parce que les algorithmes génétiques avaient l'air de ne pas être efficaces sur ces problèmes. Ces algorithmes ont ensuite été appliqués à la photonique^{43,42}. Cet algorithme est un bon exemple de stratégie évolutionnaire, même si il n'a en pratique jamais été comparé aux stratégies évolutionnaires plus modernes qui seront expliquées plus loin. C'est cet algorithme que j'ai utilisé pour commencer mon étude. Il a bien fonctionné jusqu'à un certain point. Ensuite, c'est les algorithmes plus modernes de l'INRIA qui ont pris le relais.

Premièrement, on choisit la zone de l'espace des paramètres à explorer, ensuite on choisit la taille de la population à considérer dans le processus, N . Nous avons utilisé une population de plusieurs centaines d'individus. Après cette démarche, on crée ensuite une première génération d'individus L dans la population tirée aléatoirement, de façon uniforme, dans la zone à explorer. A partir de cette génération, on crée la suivante, et ainsi de suite. Pour un début, nous avons choisi le nombre de générations maximales à $L = 500$, puis, au fur et à mesure que les problèmes devenaient compliqués, j'ai repoussé cette limite à $L = 5000$ générations au maximum. Le critère d'arrêt est que quand on atteint 60 générations sans avoir amélioré le meilleur individu, le programme s'arrête.

Pour créer la génération suivante, trois voies très différentes sont utilisées.

Ensuite on choisit au départ une constante de sélection naturelle $k = \frac{1}{\tau}$. Et nous avons fait varier τ pour pouvoir augmenter ou diminuer la constante de sélection naturelle pour comprendre sa performance. Et nous fixons une valeur $B = 200$ que nous supposons obtenue par reproduction k . Et la génération suivante est produite à partir de la génération précédente en utilisant trois notions nettement différentes pour engendrer des meilleurs individus qui sont :

- **Par Mutation.** On choisit un individu au hasard dans la génération précédente auquel on ajoute un vecteur aléatoire dont la longueur maximale est fixée d'avance, dimension par dimension. Le nombre de mutants, M , est important. S'il est trop grand, l'algorithme ne converge pas. Les mutations permettent d'explorer des parties de l'espace de recherche qui ne l'ont pas été. Dans la pratique, nous avons souvent abandonné la mutation, parce qu'elle ralentit la convergence en changeant rarement le résultat final.
- **Par élitisme.** Au niveau, de l'élitisme, les individus sont sélectionnés aléatoirement de la génération précédente, et on leur donne une probabilité d'être choisis directement proportionnelle à un terme $\exp -\frac{f}{\tau}$. La valeur de τ détermine le comportement de l'algorithme et contrôle le stress évolutif. Si la valeur de τ est grande, la sélection n'est pas féroce. Une fois ces individus choisis, ils sont directement envoyés à la génération suivante. Cela assure, statistiquement, que seuls les individus pour lesquels la fonction de coût est en gros à moins de τ du minimum f_{min} ont une chance d'être choisis.
- **Par croisement.**
 Dans le processus, on choisit deux individus de la génération précédente, auxquels nous accordons encore une chance d'être sélectionnés proportionnelle à $\exp -\frac{f}{\tau}$ là aussi. Pour obtenir un nouvel individu à partir des individu sélectionnés de la génération précédente c'est à dire les "parents", on décide de faire un croisement barycentrique. C'est ce croisement qui fait toute la différence avec un algorithme génétique : en faisant un barycentre entre deux parents soigneusement sélectionnés, on a plus de chances d'obtenir une descendance pertinente. On applique donc

$$p_i = ap_1 + (1 - a)p_2 \quad (2.9)$$

où les deux individus parents sont décrits par des vecteurs p_1 et p_2 . Et la valeur de a est un nombre qui sera choisi de façon aléatoire dans un intervalle qui permet à un individu

de ne pas se retrouver forcément entre les parents de la génération prétendante, pour garantir une exploration plus nette des environs. Cet intervalle est fixé à $[-0.2, 1.2]$. Ce croisement a pour rôle effectivement de faire naître des nouveaux individus plus importants que les autres. Dans ce cas on a deux options : soit le croisement se fait entre individus qui ne se trouvent pas dans la même région de l'espace, et cela permet d'explorer l'espace entre les zones d'intérêt, soit le croisement se fait entre individus proches du même minimum local, et cela favorise une exploration du bassin d'attraction du minimum.

Avoir un algorithme stochastique est intéressant, mais le risque est qu'en créant la nouvelle génération, on oublie que le meilleur résultat est important. On s'arrange pour le transférer sans modifications à la génération suivante. On peut ainsi dire depuis combien de générations le meilleur individu est inchangé. L'évolution de la valeur de la fonction de coût pour le meilleur individu permet de surveiller la convergence de l'algorithme.

Évolution différentielle

L'algorithme d'Évolution Différentielle (abrégé DE pour Differential Evolution) est une autre famille d'algorithme évolutionnaire. Cette technique d'optimisation est beaucoup utilisée dans les optimisations continues et a été conçue exactement pour la première fois en 1997 par Storn et Price⁵⁹. Cette méthode d'optimisation utilise des informations issues de la population pour pouvoir déterminer l'évolution à venir de la recherche. Elle est considérée aujourd'hui généralement comme la plus efficaces des stratégies évolutionnaires. Plusieurs variantes existent pour cette méthode, même si une des variantes est plus particulièrement utilisée. Cette méthode a aussi pour mérite d'être simple à coder (le code tient en quelques lignes). Dans l'esprit, elle est une méthode dérivée des premiers algorithmes génétiques, mais sans le folklore qui les entoure concernant l'analogie entre *ADN* et codage binaire, les muta-

tions, etc. Au contraire, elle se focalise sur les meilleures méthodes pour générer des individus à partir de ceux existants - en utilisant le cross-over (le passage de caractéristiques directement aux descendants sans modification) et des moyennes entre individus (jusqu'à 4 individus différents).

Ici encore, on représente chaque point de l'espace de recherche par un vecteur X dont les composantes seront notées x_i pour $i \in [1, N]$.

Comme cet algorithme est un algorithme évolutionnaire¹³, il s'inspire en grande partie de la boucle évolutionnaire. C'est pour cette raison, on peut le structurer de la manière suivante :

- Initialisation : A ce niveau, la population de solution est initialisée par une loi normale appelé loi gaussienne du fait que l'évolution différentielle est une méthode d'optimisation continue.
- Mutation : la mutation permet la génération d'un vecteur variant qui est obtenu pour chaque vecteur X_j de la population. On peut par exemple créer ce nouveau vecteur en utilisant 3 vecteurs tirés aléatoirement dans la population et combinés de la façon suivante

$$V_j(t+1) = X_{r_1}(t) + F(X_{r_2}(t) - X_{r_3}(t)) \quad (2.10)$$

où les indices r_1 , r_2 , et r_3 sont tirés de façon aléatoire. F est une constante réelle qui permet de contrôler l'amplification de l'évolution différentielle et elle cherche à éviter l'arrêt du processus durant la période de la recherche. Selon¹⁴, il est préférable de prendre la valeur de F dans un intervalle appartenant à $[0,2]$. La variable t est le numéro de la génération courante. Il existe de nombreuses variantes de la mutation qui permettent de faire intervenir 2, 3 ou 4 vecteurs différents. Dans les différentes littératures cités dans^{63, 14, 54}, tous indiquent que pour obtenir les meilleurs résultats on utilise une méthode de mutation qu'on appelle la méthode *DE/best/2/bin*, qui est définie par l'équation suivante :

$$V_j(t+1) = X_{best}(t) + F(X_{r1}(t) + X_{r2}(t)X_{r3}(t)X_{r4}(t)) \quad (2.11)$$

où X_{best} est le meilleur individu dans la population à la génération t .

- Croisement : Pour pouvoir conserver un certain taux de diversité dans la population, on utilise le croisement. Dans cette étape de la boucle évolutionnaire, un vecteur d'essai est créé et l'opérateur de croisement garantit qu'au minimum un des éléments du vecteur variant sera conservé. Le vecteur U_j est créé par

$$U_j^i(t+1) = v_j^i(t+1) : \text{si } rand < CR \quad U_j^i(t) = X_j^i(t) \text{ si } rand > CR \quad (2.12)$$

où x_{ji} est la j ième composante du vecteur x_i , v_{ji} est le j ime composant du vecteur variant $V_j(t+1)$; $rand$ est une valeur aléatoire entre $[0, 1]$; CR est le taux de “*cross-over*”, c'est à dire le taux de caractéristiques passées telles quelles à la descendance.

- évaluation de la fonction de coût ;
- Sélection : l'étape de sélection permet de remplacer le vecteur X_i par le vecteur d'essai U_i dans la population si sa fonction de coût est plus basse.

Ces quatre étapes sont répétées jusqu'à ce qu'un nombre maximal d'itérations soit atteint ou jusqu'à ce qu'une solution soit trouvée. Une des grandes forces de l'évolution différentielle est qu'elle est relativement simple à programmer et que seuls trois principaux paramètres sont nécessaires à son bon fonctionnement : la taille de la population (N), le taux de croisement (CR) et le facteur d'échelle (F).

Dans la suite de ce chapitre, je détaille ce qu'ont donné les algorithmes d'optimisation lorsque nous les avons appliqués à des structures photoniques de complexité croissante.

2.3 Optimisation des structures photoniques

L'optimisation numérique de structures optiques ou photoniques a été explorée très tôt mais avec un succès très mitigé. Le premier constat est que les résultats obtenus sont très heurtés, chaotiques. Les propriétés peuvent être très intéressantes et permettre d'obtenir des structures efficaces. Mais le côté chaotique des solutions empêche de comprendre pourquoi exactement elles marchent si bien. Les résultats ne sont donc pas très utiles d'un point de vue fondamental. Évidemment, comme il est presque impossible pour un problème complexe de savoir si on a bien trouvé la solution optimale, on peut se poser des questions sur les solutions.

On sait que, optimiser une structure, revient systématiquement à chercher à minimiser la fonction de coût. Et mathématiquement c'est un problème très difficile et d'autant plus difficile en pratique qu'un grand nombre de paramètres sont laissés libres.

Certains les utilisent parfois pour des problèmes avec peu de paramètres libres qu'ils en deviennent triviaux et qu'il est impossible à une quelconque régularité d'apparaître. Au contraire, en laissant un trop grand nombre de paramètres libres, les problèmes deviennent si complexes que les solutions fournies apparaissent peu intuitives et chaotiques, bien loin de l'élégance des structures naturelles ce qui indique qu'elles sont probablement sous-optimales. C'est pour cette raison que nous pensons que le régime intermédiaire est mieux, quand les algorithmes sont bien adaptés à la difficulté du problème que l'on peut obtenir un ensemble de solutions intéressantes maximal.

On a pensé à des choses qui existent pour voir la crédibilité de notre algorithme évolutionnaire. Dans ce cas, on peut penser que le miroir de Bragg est mieux parce qu'il a été indépendamment découvert par l'évolution et par la science et probablement optimal en un sens. (Moosh l'a déjà prouvé) Mais rien n'est jamais venu étayer ce sentiment et la fonction objective à considérer est par conséquent pas connue.

Prenons l'exemple du miroir de Bragg. Il a été indépendamment découvert par l'évolution

et par la science et probablement optimal en un sens. Mais étrangement, on n'est même pas sûr que cette structure soit la meilleure possible - et dans quel sens exactement ? Alors qu'on la trouve vraiment partout. Et les essais pour la trouver par optimisation sont anciens et ont échoué. A cause de ce genre de problème, l'optimisation numérique de structures photoniques n'est pas très répandue comparé à ce qu'on aurait pu attendre. On peut dire que la communauté n'a pas une grande confiance dans ces techniques.

2.3.1 Miroir de Bragg

Le miroir de Bragg est donc naturellement la première structure que nous avons essayé de retrouver. C'est le point de départ de mon travail. Nous sommes partis de l'idée que si le miroir de Bragg était si présent partout, c'est qu'il était forcément optimal. Comme sa principale propriété est de réfléchir la lumière très efficacement à la longueur d'onde de travail, nous avons simplement demandé à l'algorithme de maximiser le coefficient de réflexion à la longueur d'onde de travail λ . Nous avons pris comme fonction de coût

$$f = 1 - r(\lambda) \quad (2.13)$$

où $r(\lambda)$ est le coefficient de réflexion de la lumière en fonction de la longueur d'onde. Cette fonction de coût a l'avantage d'être toujours comprise entre 0 et 1, ce qu'on essaiera de faire pour toutes les fonctions de coût par la suite. Les premiers essais pour trouver le miroir de Bragg utilisaient des fonctions de coût beaucoup plus compliquées, pour "aider" l'algorithme à mieux voir un éventuel minimum. Nous pensons maintenant qu'au contraire, cela a peut-être empêché l'algorithme de converger. Dans toute la suite de ce travail, nous avons utilisé les fonctions de coût les plus simples possibles. Ce sont celles qui donnent les meilleurs résultats, comme nous allons voir.

Nous avons commencé par fixer le nombre de couches, et contraint leurs indices optiques à

être entre 1, 4 et 1, 7. L'idée qu'il faille une telle contrainte est essentielle : la plus simple façon de réfléchir la lumière est d'avoir un milieu avec un indice optique infini. Ce n'est que si on impose des bornes aux indices optiques, que l'on peut s'attendre réellement à voir surgir des solutions nettement plus intéressantes. Le miroir de Bragg ne peut se comprendre que dans le cadre où tous les indices optiques ne sont pas possibles.

De la même manière, fixer le nombre de couches est important. Plus un miroir de Bragg possède de couches, plus il peut être efficace. Un miroir de Bragg donné ne peut pas être optimal pour un nombre infini de couches. Juste pour un nombre fini. Les contraintes qu'on impose expliquent en général pourquoi telle ou telle structure émerge.

On a commencé d'abord pour 5 couches pour des structures simples puis augmenté au fur et à mesure. Nous avons testé les algorithmes jusqu'à 40 couches. Cette procédure aussi est très importante. On ne peut pas avoir confiance en les algorithmes si on ne procède pas méthodiquement en commençant par des situations simples puis en allant vers du plus complexe. On sait qu'à un moment, de toutes les façons l'algorithme n'y arrivera plus si le problème est trop compliqué. Il faut savoir quand cela se produit, pour s'arrêter avant.

J'ai essayé d'abord avec l'algorithme évolutionnaire simple utilisé dans l'équipe que j'ai décrit dans la section ci-dessus. Pour contrôler les meilleurs paramètres de l'algorithme, on observe

- la fonction de coût du meilleur individu en fonction du nombre de générations, pour voir la convergence et savoir estimer si on peut s'attendre encore à de grands progrès ou pas,
- la variance de la fonction de coût calculée sur toute la population, pour savoir à quel point les individus sont tous très proches ou pas en fonction du nombre de générations,
- l'histogramme des valeurs de la fonction de coût, pour savoir comment sont répartis les individus plus précisément à la dernière génération obtenue.

Initialement, laisser les indices libres n'a pas conduit à des résultats très satisfaisants avec

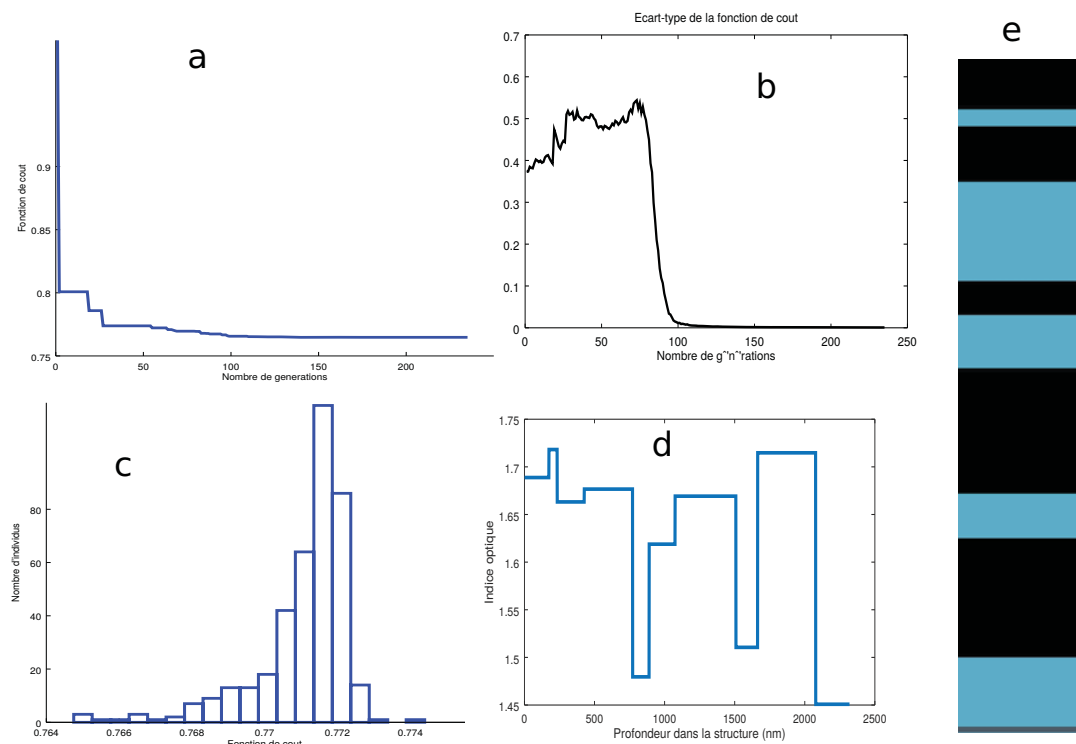


FIGURE 2.4 : Avec les indices optiques libres, le problème est trop compliqué pour nos algorithmes. Ils semblent assez vite trouver un minimum stable (a), et on voit que l'exploration ne va pas se poursuivre longtemps, parce que tous les individus ont une fonction de coût très proche, avec un écart-type qui chute à partir de la 100ème génération(b). On peut cependant penser qu'il s'agit d'un minimum local très étroit parce que les individus proches du meilleur ne sont pas nombreux (c), et que le résultats est chaotique tant en termes d'indice optique (d) que d'épaisseur (e)

l'algorithme que nous utilisons. Mais on pouvait voir que le miroir de Bragg n'était pas très loin, ou qu'il apparaissait pour un nombre de couches petit. Mais pour 10 couches, c'était un problème un peu trop difficile déjà pour notre algorithme. On voit aussi sur les courbes 2.4 que les solutions vers lesquelles les algorithmes tendent favorisent des variations brusques de l'indice - ce qui peut se comprendre facilement. Pour mieux réfléchir la lumière, il vaut mieux des coefficients de réflexion élevés, donc un grand contraste d'indice.

Alors nous avons essayé en fixant les indices. Mais pour le faire, deux choix se présentent : soit commencer, comme pour tous les miroirs de Bragg classiques par l'indice le plus élevé,

Couche	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Épaisseur	263.16	303.97	272.38	317.03	254.08	323.41	260.87	305.11	102.20	304.38

TABLE 2.1 : Épaisseur des différentes couches dans un miroir de 10 couches. La table est lue de haut en bas, de gauche à droite. Dans ce miroir, une couche mince est toujours suivie d'une couche plus épaisse. Les épaisseurs théoriques sont 87 nm et 106 nm, ou 260 nm et 318 nm pour les épaisseurs triples. On voit vraiment bien que toutes les épaisseurs sont proches de ces valeurs.

soit commencer par l'indice le plus bas ^{*}.

En commençant par l'indice le plus élevé, on obtient une convergence satisfaisante vers une structure qu'on peut rapprocher des miroirs de Bragg. Le cas montré ici reflète aussi un des soucis que nous avons eu lors des premières optimisations : si on multiplie par un nombre entier impair l'épaisseur théorique des couches du miroir de Bragg, on obtient le même coefficient de réflexion, mais une bande passante plus étroite. Le miroir obtenu ici (voir tableau 2.1) présente surtout ces épaisseurs trois fois plus grandes que l'épaisseur théorique.

La figure 2.5 montre une convergence plus lente, et satisfaisante, de l'algorithme.

Ce premier résultat est vraiment très important, pour deux raisons très différentes qui montrent bien le côté bidisciplinaire du problème :

- Il montre que le miroir de Bragg est bien la façon la plus efficace de réfléchir la lumière à une longueur d'onde donnée et donc que les solutions chaotiques ne sont pas des optimaux, comme on pouvait le penser.
- Il nous a permis d'avoir une confiance raisonnable en nos algorithmes, tout en montrant leurs limites. Cette notion de limite d'un algorithme donné est très importante. C'est elle qu'il faut trouver, à chaque fois, pour savoir si on doit avoir confiance ou douter des résultats.

Il faut aussi souligner qu'un algorithme génétique, n'étant pas basé sur des flottants, avait toutes les chances d'échouer sur un problème de ce type - simplement parce qu'il a une limite beaucoup plus basse.

*. Exactement comme on le trouve sur l'article français de Wikipedia sur le miroir de Bragg !

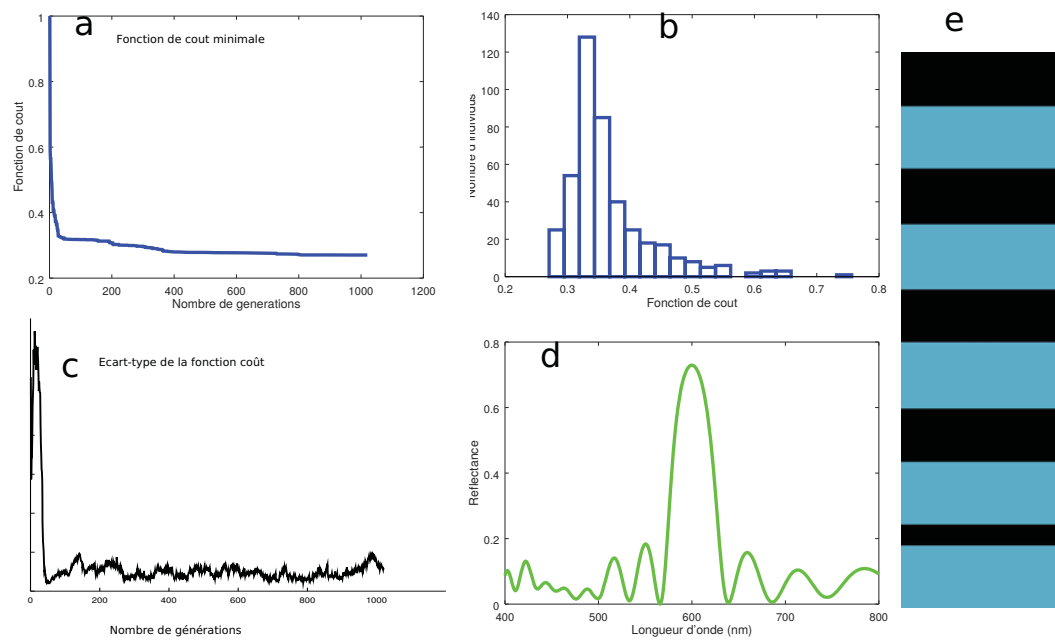


FIGURE 2.5 : Cette fois, la diminution de la fonction de coût est plus progressive (a), et même si l'écart-type s'effondre très rapidement, on voit qu'il continue à avoir des variations importantes (par exemple à chaque fois qu'un meilleur individu est trouvé) (b). La répartition finale de la fonction de coût présente un pic non loin de la meilleure fonction de coût, on peut voir que le résultat est convergé. Le spectre ressemble à ce qui est attendu pour un miroir de Bragg, avec des oscillations caractéristiques sur les côtés de la bande interdite (d) et on a des épaisseurs régulières (e).

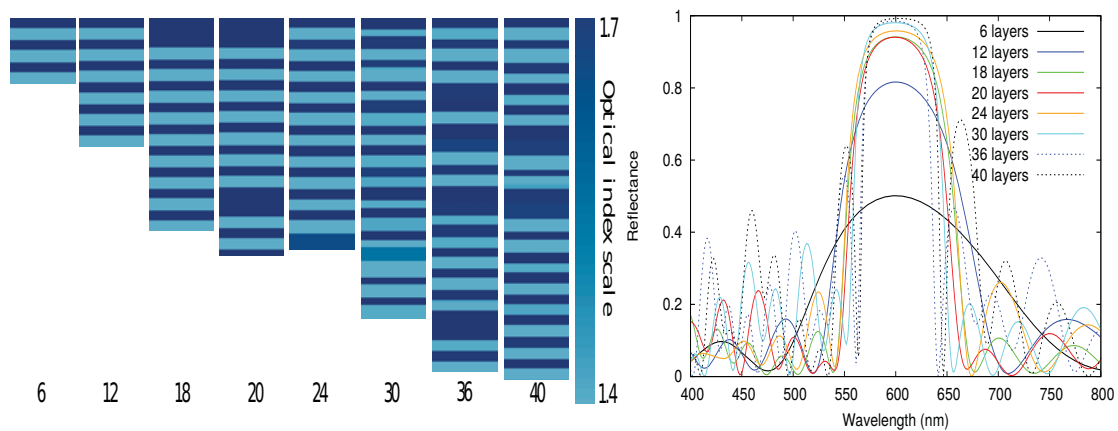


FIGURE 2.6 : Résultat de l’optimisation lorsqu’on demande l’algorithme à prendre les indices optiques compris entre l’intervalle $[1.4, 1.7]$, mais en les laissant libres et les épaisseurs des différentes couches. A droite, on a le résultat correspondant au spectre et à gauche nous montrons la structure, avec une couleur représentant l’indice.

En utilisant les algorithmes de l’INRIA décrits dans la section précédente (CMA-ES, DE, PSO, Nelder-Mead) avec nos fonctions de coût, les résultats ont été encore plus convaincants alors que chaque optimisation n’avait le droit qu’à 10^4 évaluations de la fonction de coût.

En laissant les indices libres, on trouve le miroir de Bragg systématiquement jusqu’à 20 couches (voir figure 2.6). Nous avons conseillé de prendre des épaisseurs faibles pour le tirage aléatoire initial, mais les épaisseurs plus grandes n’étaient pas interdites. On les voit alors de plus en plus souvent, et pour les très grands nombres de couches, la structure commence à être plus désordonnées. Cela montre que la limite des algorithmes de l’INRIA est plus haute, mais qu’elle existe aussi.

Soulignons que l’optimisation d’un miroir de Bragg à 40 couches est alors un problème à 80 paramètres libres parce que chaque couche possède son indice optique et que le coefficient de réflexion est très dépendant de chacun d’entre eux. Il s’agit dans ce cas, d’un problème d’optimisation très difficile, bien plus que ceux utilisés d’habitude, et c’est un bon test pour les algorithmes évolutionnaires.

La convergence étant manifestement plus difficile pour les grands nombre de couches, nous

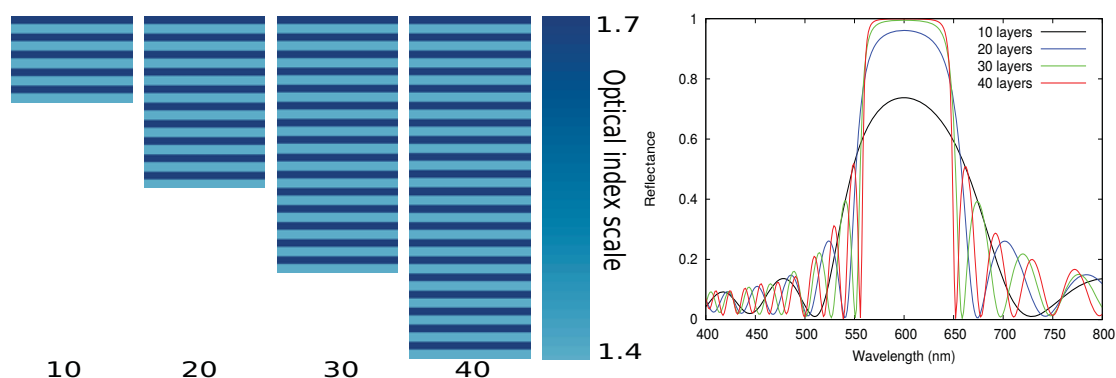


FIGURE 2.7 : Résultat d’optimisation lorsque les indices optiques sont fixes et en commençant par l’indice haut. A gauche, on a la structure obtenue suivant le nombre de couches utilisées, et à droite le spectre de réflexion correspondant.

avons remarqué que quelque soit le nombre de couches considérés les solutions proposées par les algorithmes se sont avérés posséder le contraste d’indice maximal autorisé de façon extrêmement systématique. Plus ce contraste est grand, plus chaque interface peut contribuer à la lumière réfléchi, on comprend ainsi que pour produire des structures efficaces il faille absolument un contraste maximal. Alors nous avons imposé à nos algorithmes un contraste maximal. Le résultat donne des miroirs de Bragg jusqu’à un très grand nombre de couches (voir figure 2.7). Aucune autre solution, à aucun moment, ne s’est révélée plus efficace pour réfléchir la lumière arrivant en incidence normale à cette longueur d’onde.

On peut donc affirmer avec un haut degré de confiance que les miroirs de Bragg, tels que nous les connaissons, sont la meilleure façon de réfléchir la lumière à une longueur d’onde donnée à l’aide de matériaux transparents, et que c’est ce qui explique pourquoi ils émergent si souvent dans la nature.

2.3.2 Indice bas en premier

Au moment de tester de l’algorithme sur les différents problème, j’ai pensé essayer aussi de commencer par l’indice bas pour la première couche. C’était en fait juste un essai.

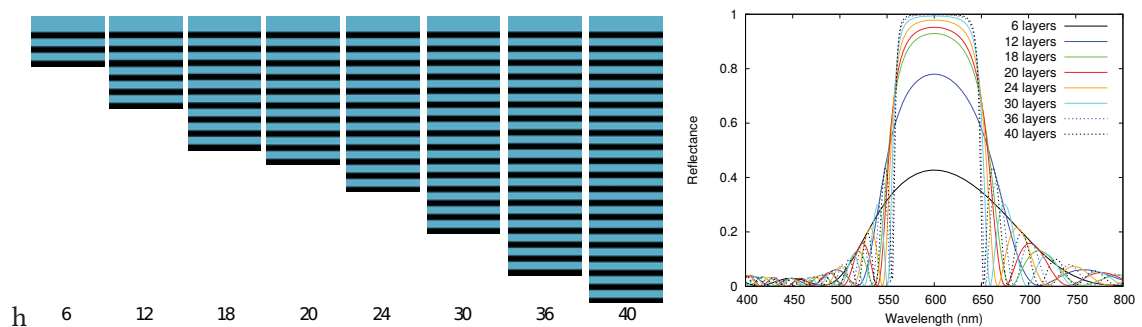


FIGURE 2.8 : Résultat d’optimisation lorsque l’on impose de commencer par l’indice bas. A gauche, les structures (la couleur bleu représente l’indice bas et la couleur noire représente l’indice haut); et à droite les spectres de réflexion correspondants.

Pour un petit nombre de couches, les algorithmes ont alors trouvé qu’une épaisseur nulle pour la première couche était optimale et ils ont ainsi ré-obtenu les solutions précédentes. Mais pour des structures plus épaisses, un miroir de Bragg légèrement différent a alors été désigné par les algorithmes comme la meilleure solution : la première couche doit être exactement deux fois plus épaisse pour que la solution soit optimale et donc d’épaisseur $e = \lambda/2n$.

En fixant le contraste d’indice et en imposant une première couche non nulle (au minimum de 10 nm), le résultat est très parlant, comme montré sur la figure 2.8. On voit que la première couche est presque exactement deux fois plus épaisse dans tous les cas, avec un miroir de Bragg classique en dessous.

Nous avons vite compris pourquoi. Quand on commence par l’indice bas, on a une couche anti-reflet : en prenant la racine de l’indice haut, on obtient 1.3, soit presque l’indice bas. On a presque la ”recette” de l’anti-reflet, avec un indice de 1.4 et une épaisseur optique de $\lambda/4$. Or mettre une couche anti-reflet sur un miroir de Bragg est une très mauvaise idée pour le coefficient de réflexion !

Quand on double l’épaisseur de la première couche, au lieu d’une résonance comme dans le cas de la couche anti-reflet, on trouve une anti-résonance, qui participe à la réflexion. Dans ce cas, les propriétés de ce nouveau miroir de Bragg sont aussi bonnes que celles d’un miroir

de Bragg commençant par l'indice haut. Le coefficient de réflexion à la longueur d'onde de travail est exactement le même. La nouvelle structure a même un léger avantage : son spectre de réflexion est légèrement plus large.

Cette solution obtenue est totalement nouvelle, probablement parce que nous, êtres humains, nous pouvons, lors de la fabrication d'un miroir de Bragg, toujours choisir arbitrairement l'indice par lequel nous souhaitons commencer. Ce design est seulement légèrement sous-optimal en moyenne (si le substrat est de l'air), comparé à un miroir de Bragg standard ce qui explique qu'elle ne surgisse que quand on impose une contrainte. Nous avons beaucoup cherché, et nous n'avons pas trouvé une trace de ce design dans la littérature, ni en demandant à des collègues spécialistes des miroirs de Bragg.

Nous nous sommes alors demandé si une telle solution pouvait être présente dans la nature, et en cherchant dans la littérature nous avons trouvé que les élytres d'un scarabée-bijou (Jewel beetle) japonais, *Chrysochroa fulgidissima* ont une structure qui correspond à ce schéma^{39 29 66 45 55}.

Bien que la structure ait été observée, le rôle spécifique de la première couche n'avait pas été souligné. C'est parce que l'optimisation nous a indiqué qu'elle était très importante que nous avons pu le comprendre !

Nos résultats sont résumés sur la figure 2.9 : sur la partie verte des élytres, on trouve un miroir de Bragg standard, avec un grand nombre de couches. Il commence par l'indice bas, même si on voit que la première couche d'indice haut est en fait mal formée. Sur les parties rouges des élytres, c'est vraiment la structure avec une première couche deux fois plus épaisse. Cela indique aussi peut-être que la première couche d'indice bas est une contrainte de fabrication pour l'insecte (ou d'efficacité optique, parce que les couches sombres contiennent de la mélanine qui est un peu absorbante).

Là aussi, deux leçons peuvent être tirées de ce résultat :

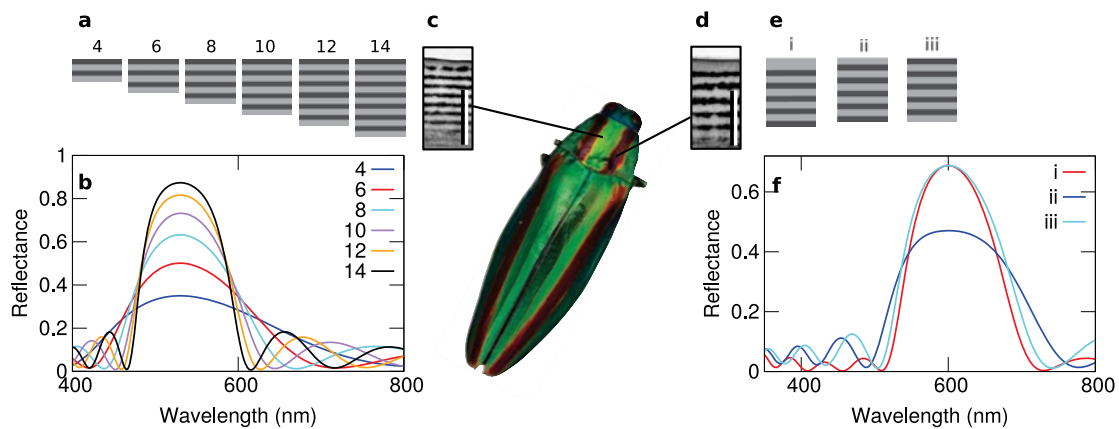


FIGURE 2.9 : Même en laissant les indices libres, les algorithmes disent que les miroirs de Bragg sont optimaux jusqu'à un assez grand nombre de couches (a), ce qui correspond bien aux structures qu'on trouve sur les insectes (c), avec des spectres bien connus (b). Avec un plus faible nombre de couches, l'effet de la première couche joue plus, ce qui explique que ce soit plus important qu'elle soit plus épaisse. On voit qu'en termes de propriétés optiques, une couche $\lambda/4$ aurait été mauvaise alors qu'une première couche plus épaisse permet de compenser le fait de commencer par un indice bas.

- Un miroir de Bragg commençant par l'indice bas est possible et efficace, à condition de doubler la taille de l'épaisseur de la première couche, un design simple et qu'on retrouve dans la nature mais que nous n'avons pas réussi à retrouver dans la littérature.
- Optimiser des structures, quand cela donne des architectures périodiques et compréhensibles, donne aussi des résultats physiques intéressants.

2.4 Miroirs diélectriques à gradient

Nous avons alors tenté de voir si des empilements nettement plus complexes pouvaient être retrouvés de la même manière, comme les structures graduées que l'on trouve chez des nombreux scarabées-bijoux tel *Aspidomorpha tecta* et qui rappellent les miroirs diélectriques dit "chirped" fabriqués pour les lasers femto-secondes notamment. Comme la propriété principale de ces structures est d'avoir une bande interdite plus large spectralement que les miroirs

de Bragg, nous utilisons la fonction de coût qui se présente de la manière suivante :

$$1 - \frac{1}{8} \sum_{n=0}^7 r(500 + 50 \times n) \quad (2.14)$$

où $r(\lambda)$ est le coefficient de réflexion en énergie de la structure à la longueur d'onde λ . L'objectif de la fonction est de trouver le coefficient de réflexion le plus élevé possible pour huit valeurs équidistantes de la longueur d'onde de 500 nm à 800nm. Ce nombre de points choisis dans le spectre est arbitraire. Il représente un compromis : plus de points, et l'optimisation est de meilleure qualité, mais plus la fonction de coût est longue à calculer. Ici aussi, le contraste d'indice est fixé - c'est un choix basé sur la constatation précédente que quand les indices ont un contraste maximal, on a de meilleurs résultats.

Nous n'avons pas besoin de demander une certaine transparence dans la partie bleue du spectre - c'est ce qui est réalisé naturellement pour toutes les structures que nous avons trouvées. La plus grande partie des résultats, obtenus avec les algorithmes mentionnés ci-dessus sont montrés sur la figure 2.10 et 2.11. Nous avons essayé avec notre algorithme "maison", mais là encore, comme avec les indices optiques laissés libres, la convergence n'était pas très satisfaisante même si nous commençons à voir émerger des structures graduelles. Enfin, les structures à gradient ont besoin d'un plus grand nombre de couches pour apparaître, comme on peut le voir sur les figures.

Le résultat obtenu ressemble étroitement à un miroir de Bragg, sauf que les épaisseurs varient lentement dans la structure. Certains (comme pour 40 couches) ont une période plus courte en haut, d'autres (comme pour 36 couches) ont une plus grande période au sommet. Les deux présentent des performances similaires, en fait. Comme on peut le voir, plus le nombre de couches est grand, plus la variation des épaisseurs est progressive. Les épaisseurs sont données ici pour le résultat à 20 couches table 2.2.

Un tel empilement peut être compris comme une réponse à la contrainte due au contraste

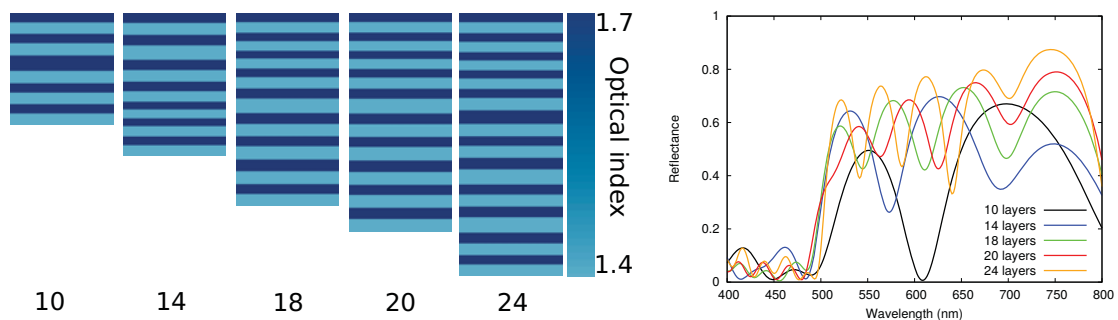


FIGURE 2.10 : A gauche, les structures trouvées par les algorithmes d'optimisation, pour un nombre de couches allant de 10 jusqu'à 24. À droite, les spectres correspondant à ces différentes structures.

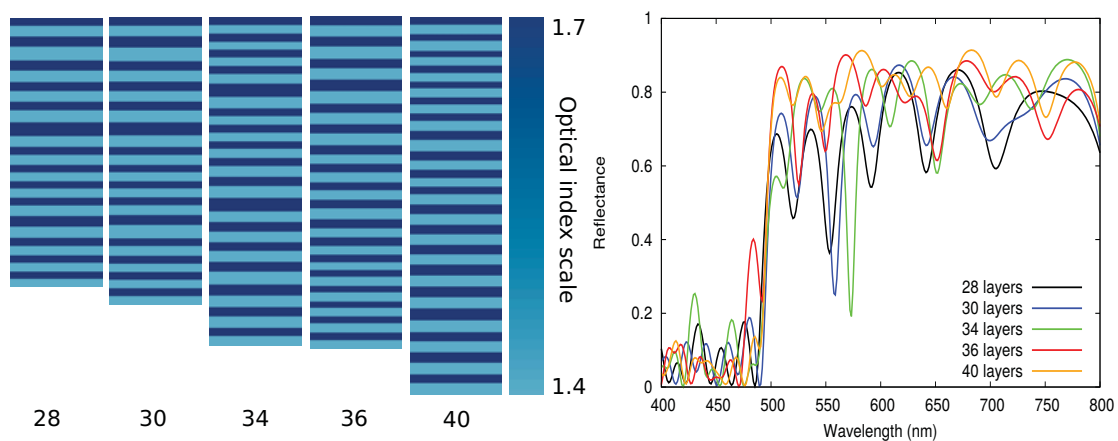


FIGURE 2.11 : A gauche, les structures trouvées par les algorithmes d'optimisation, pour un nombre de couches allant de 28 jusqu'à 40. À droite, les spectres correspondant à ces différentes structures.

d'indice : celui-ci limite en effet la largeur spectrale qu'un miroir de Bragg peut réfléchir. Avec le contraste d'indice que nous considérons ici une largeur spectrale d'une centaine de nanomètre peut être atteinte au maximum. Pour pouvoir réfléchir un spectre plus large, empiler des miroirs de Bragg fonctionnant à des longueurs d'ondes différentes peut être une solution, et c'est ainsi que peut être comprise la structuration des élytres d'*Asphidomorpha Tecta*. Partant vraiment de cette bonne compréhension, nous avons donc cherché la structure multicouche alternée avec des indices haut et bas présentant la plus grande réflexion possible de 500nm à 800nm, ce qui correspond à l'œil à une surface dorée. L'optimisation par nos algorithmes nous

Layers	1 & 2	3 & 4	5 & 6	7 & 8	9 & 10	11 & 12	13 & 14	15 & 16	17 & 18	19 & 20
Odd, thin	85.148	82.220	78.148	84.214	98.724	104.391	98.556	113.842	99.507	109.016
Even, thick	103.159	97.388	98.108	109.286	144.311	118.996	132.302	125.882	125.991	127.987

TABLE 2.2 : Épaisseur des différentes couches dans un miroir de 20 couches reflétant environ 50% du spectre visible. La table est lue de haut en bas, de gauche à droite. Dans ce miroir, une couche mince est toujours suivie d'une couche plus épaisse.

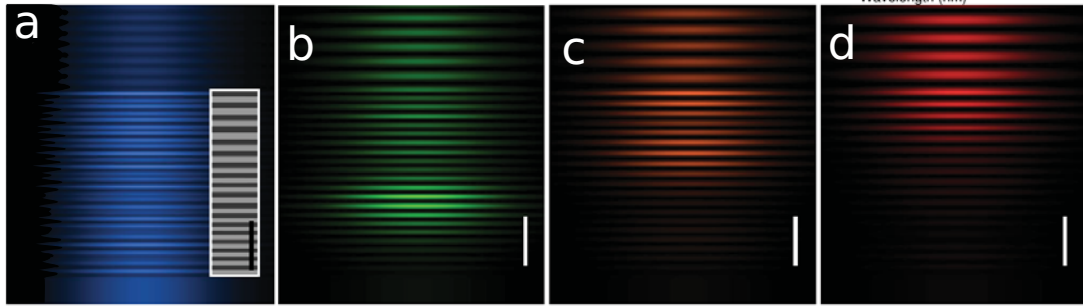


FIGURE 2.12 : Carte de distribution de champ électrique sur un éclairage à incidence normale montrant comment différentes longueurs d'onde (et donc couleurs) sont réfléchies à différentes profondeurs dans le miroir diélectrique à gradient. De gauche à droite : a) bleu (400 nm), b) vert (530 nm), c) orange (600 nm) d) rouge (700 nm). Barres d'échelle : 1 μm .

a donné des solutions qui présentent les mêmes caractéristiques que les empilements naturels et qui ont le même comportement physique. On peut d'ailleurs simuler leur comportement avec Moosh et vérifier que cette analyse physique est bonne, figure 2.12

De façon surprenante, les algorithmes ont trouvé ces solutions d'autant plus facilement qu'un grand nombre de couches était autorisé, et donc le problème théoriquement plus complexe. Les solutions pouvaient cependant parfois commencer par une périodicité courte, plutôt que de commencer par des couches épaisses s'amincissant dans les profondeurs du cuticule. Il semble en tous les cas que ces structures graduelles représentent là aussi un certain optimum, renforçant l'idée que les structures naturelles complexes sont le résultat d'un très longue optimisation.

2.5 Structure Morpho

Enhardis par ces succès, et la confiance que nous avons dans les algorithmes de l'INRIA, nous nous sommes alors intéressés à un problème plus compliqué.

Un travail, mené par Marie-Claire Cambourieux³⁷ en 2009 lors d'un stage de Master 2, avait permis d'étudier les structures des papillons Morpho avec une méthode modale de Fourier (RCWA^{32 20}). 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 calcul. Les méthodes modales que nous avons utilisées ici ont l'avantage d'être extrêmement rapides pour résoudre des problèmes périodiques horizontaux. Cette méthode est particulièrement adaptée aux problèmes périodiques, horizontalement comme celles du Morpho.

Les codes permettant de simuler des structures similaires aux Morpho étaient donc déjà prêts. L'étude menée par Marie-Claire Cambourieux avait permis de conclure que la majorité des caractéristiques de ces architectures était d'éviter la réflexion spéculaire.

Nous avons donc considéré ici des structures avec une période de $d = 600$ nm et 25 modes différents dans chaque couche. Ce nombre de modes a été choisi pour obtenir une bonne précision pour un faible coût de calcul, afin de pouvoir effectuer l'optimisation plus facilement. La périodicité est imposée, et nous avons choisi arbitrairement 600 nm ici car ce nombre est proche de la période des structures réelles⁶⁵.

La structure consiste donc en un nombre fixe de couches, contenant chacune un bloc rectangulaire de chitine, avec une épaisseur arbitraire, une largeur (inférieure à d) et un décalage par rapport à l'origine. Pour l'initialisation, chaque couche est définie par son épaisseur allant de 0 à 150 nm, son décalage à l'origine allant de 0 à 600 nm (la période complète), sa largeur de 0 à 600 nm et le dernier paramètre est l'espace entre cette couche et la suivante pris entre 0 et 75 nm. Pour chaque couche, ce sont donc 4 paramètres qui sont laissés libres : la posi-

tion du bloc, sa hauteur et sa largeur, et la distance qui le sépare de la couche suivante. Cela laisse, géométriquement parlant, une très grande latitude, puisque les miroirs de Bragg et les structures graduées font complètement partie des solutions possibles.

La méthode modale fournit les coefficients de réflexion dans les différents ordres de diffraction propagatifs $r - 1$, r_0 et $r + 1$, les coefficients de réflexion en énergie respectivement dans l'ordre -1 , 0 et $+1$. Le coefficient r_0 est le coefficient de réflexion pour la réflexion spéculaire, la réflexion en 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 ordres $r \neq 0$ ne sont pas nuls seulement si $\lambda < d$ car seule la réflexion spéculaire se produit pour $\lambda > d$.

Nous avons mené des optimisations différentes pour chaque nombre de blocs considéré en cherchant à minimiser la réflexion spéculaire quelle que soit la longueur d'onde, et à maximiser la diffraction par les ordres du réseau à la longueur d'onde de 450 nm seulement. La fonction objectif que nous avons utilisée s'écrit

$$1 - \frac{1}{2}(r_{+1}(450) + r_{-1}(450) - r_0(450)) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_0(\lambda_i) \quad (2.15)$$

où $\lambda_i = \{300, 400, 500, 600, 700, 800\}$, assurant la maximisation des ordres de diffraction à 450 nm et la minimisation de la réflexion spéculaire pour une large gamme de longueurs d'onde.

Les résultats obtenus sont représentés sur la figure 2.13 et les spectres de réflexion correspondants sur la figure 2.14.

Plus le nombre de couches augmente, plus la structure est efficace. La plus haute que nous ayons considérée comporte 12 couches, et elle est montrée figure 2.15.

On obtient des structures dont la caractéristique principale est d'être interdigitée, ce qui montre bien que cette caractéristique surgit quand on veut annuler la réflexion spéculaire. Cette interdigitation, ce décalage d'une demi-période du miroir de Bragg, en somme, produit

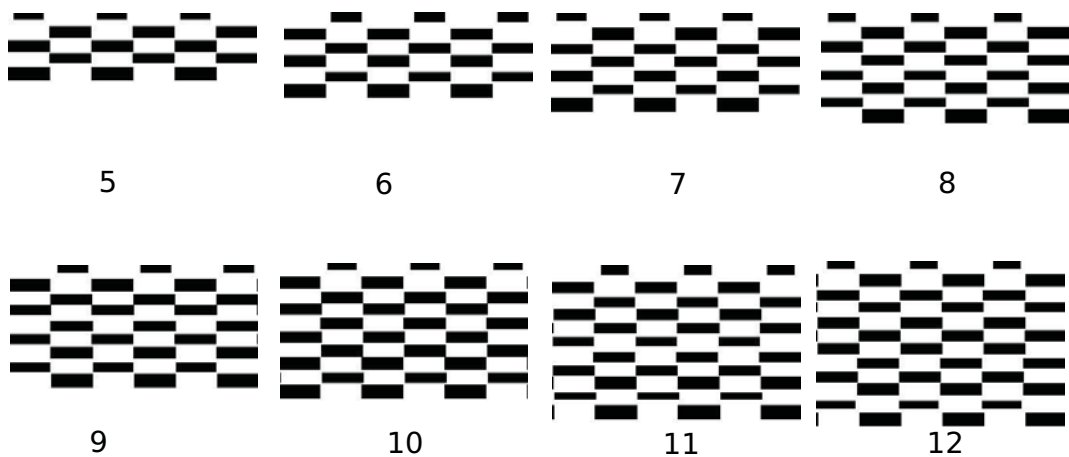


FIGURE 2.13 : Structures obtenues par optimisation pour différents nombres de couches, afin de maximiser la diffraction et d'annuler la réflexion spéculaire.

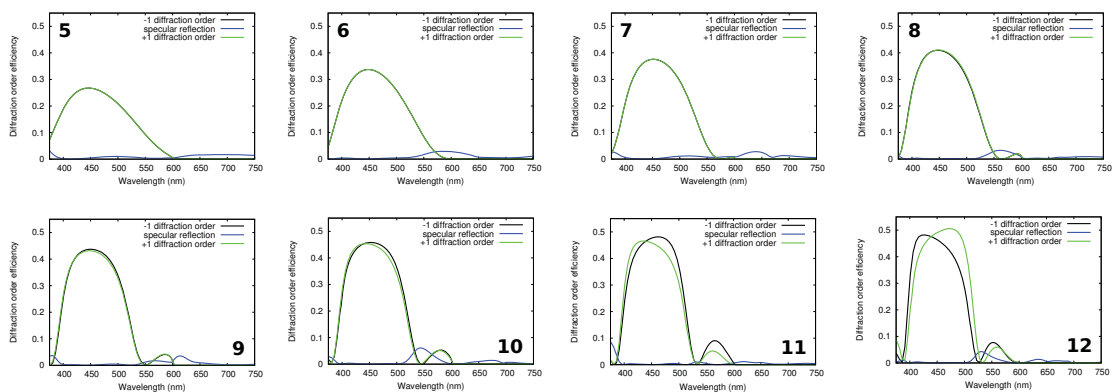


FIGURE 2.14 : Spectre pour les structures de 5 à 12 couches montrées sur la figure 2.13.

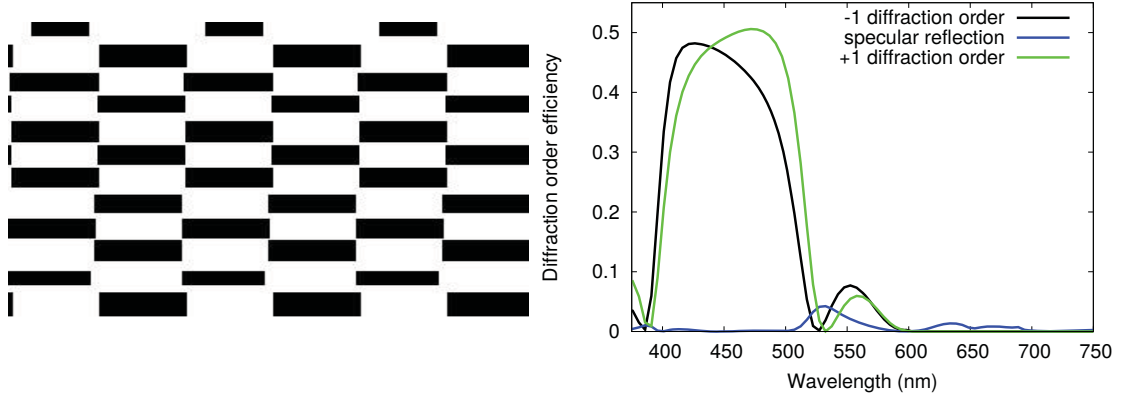


FIGURE 2.15 : Structure avec le plus grand nombre de couches, et le spectre correspondant.

un déphasage de π entre les deux parties de la structure, conduisant à des interférences destructives pour la réflexion spéculaire.

Les propriétés optiques de ces architectures sont excellentes, puisque 96 % de la lumière est réfléchie dans les ordres de diffraction à 450 nm, contre moins de 0.0001 % dans la réflexion spéculaire. Ces propriétés sont en fait bien meilleures que celles des Morphos.

Puisque d'autres contraintes, rendant l'architecture Morpho moins optiquement optimale, semblent jouer un rôle, nous avons ajouté un terme à la fonction objectif d'une fois le facteur de remplissage moyen des couches (le facteur de remplissage étant compris entre 0 et 1 pour chaque couche). La fonction coût est alors

$$1 - \frac{1}{2}(r_{+1}(450) + r_{-1}(450) - r_0(450)) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_0(\lambda_i) + \frac{a}{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} \frac{w_j}{d} \quad (2.16)$$

où n_b est le nombre de blocs supposés pour la structure et w_j la largeur du calque j . Le paramètre a contrôle le poids de cette contrainte particulière.

Les résultats montrés dans la figure 2.16 sont obtenus en utilisant $a = 0.5$. Cela pénalise les structures avec beaucoup de matière. Dans ce qui suit, on dit que ce cas est "avec pénalisation". L'ajout de cette contrainte unique produit des structures extrêmement similaires aux

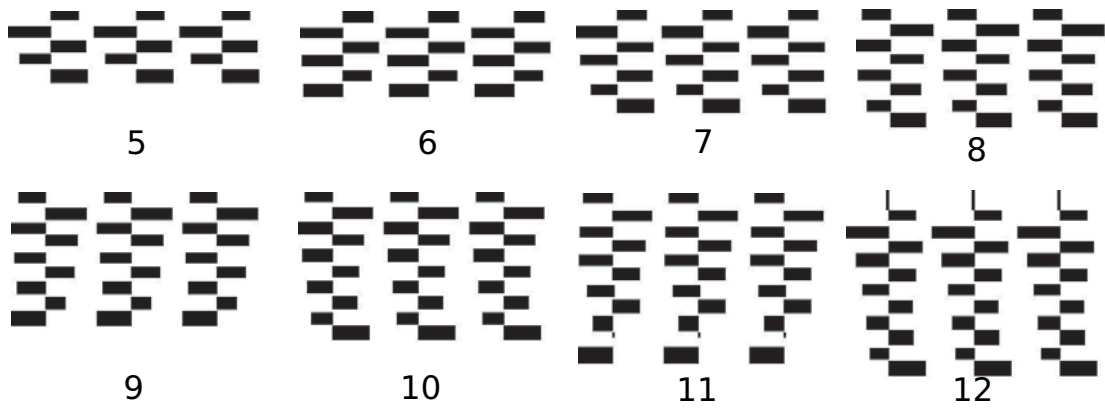


FIGURE 2.16 : Structures obtenues par optimisation pour différents nombres de couches lorsque deux contraintes sont ajoutées : moins de matière et une contrainte ajoutée.

premières, mais avec des blocs plus étroits, nous avons ajouté une contrainte de fabrication : que les blocs soient tous à la verticale d'un point choisi. Cela fait émerger des architectures qui ressemblent beaucoup aux structures réelles sur les ailes de Morpho (voir figure 2.16 et les spectres correspondants figure 2.17).

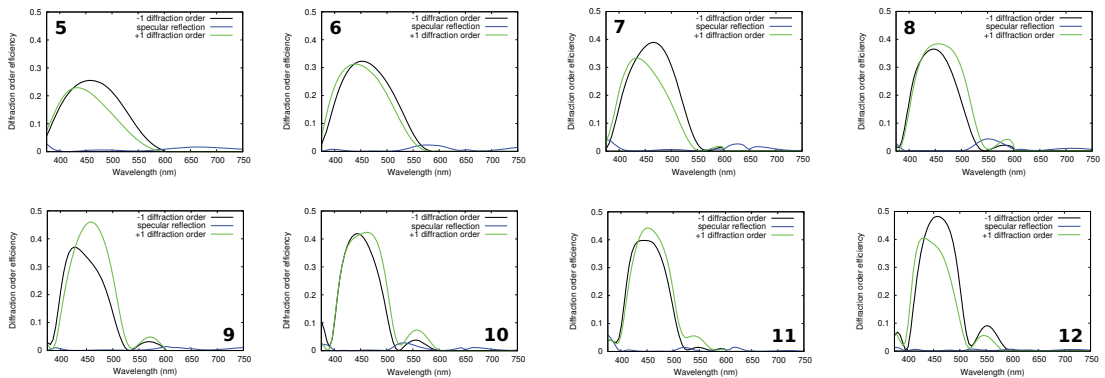


FIGURE 2.17 : Spectre obtenus par optimisation pour différents nombres de couches lorsque deux contraintes sont ajoutées : Là aussi c'est moins de matière et une contrainte ajoutée

Nos résultats montrent que nous avons bien compris la structure du Morpho, puisque la fonction de coût que nous avons utilisée nous a permis de la retrouver. En réalité, nous avons essayé d'autres fonctions de coût plus compliquées, mais encore une fois c'est la plus simple

qui a fourni les meilleurs résultats, quels que soient les algorithmes considérés. Et justement, ces cas d'optimisation permettent de comparer les algorithmes et de voir lesquels sont les plus efficaces sur des cas venant de problèmes réels.

2.5.1 Performances des différents algorithmes

Pour chaque cas (miroir de Bragg, structure à gradient et Morpho), chaque algorithme a effectué de l'ordre d'une centaine d'optimisations. Chaque optimisation avait le droit au même nombre de calculs de la fonction de coût, soit 10^4 . L'idée n'est pas seulement de trouver un minimum dans l'absolu, mais aussi de voir si un algorithme est fiable et si il retrouve facilement et souvent la même solution, pour être sûr que cela ne soit pas de la chance. Pour représenter les résultats, on place sur un graphique les valeurs des meilleures fonctions de coût obtenues en les ordonnant (la plus basse à droite, la pire à gauche). Dans la pratique, comme représenter tous les "runs" donne des graphiques trop lourds, on n'en représente qu'un sur quatre après les avoir ordonnés. Un exemple se trouve figure 2.18 pour le Morpho sans pénalisation. Mais de tels résultats ont été synthétisés par l'INRIA pour les trois cas test.

Sur tous les cas, l'optimiseur qui a le mieux fonctionné est l'évolution différentielle, un optimiseur inspiré de la reproduction sexuée et de l'évolution naturelle. Alors que les optimiseurs comme le CMAES ou le NM se sont bien comportés à certains moments, ils n'ont jamais été en mesure de vraiment défier DE. Le CMAES s'est bien comporté sur le problème le plus simple (miroir de Bragg usuel), pas trop mal sur les structures à gradient, mais a obtenu de piètres résultats sur la tâche difficile de récupérer les structures de l'échelle *Morpho*. Les performances de la variante Quasi-Random étaient cependant meilleures dans tous les cas que dans la version originale sur les premier et deuxième problèmes (Bragg et gradient). Sur le dernier, même si ce n'était pas le cas pour chaque statistique calculée, c'était toujours le cas pour le meilleur run.

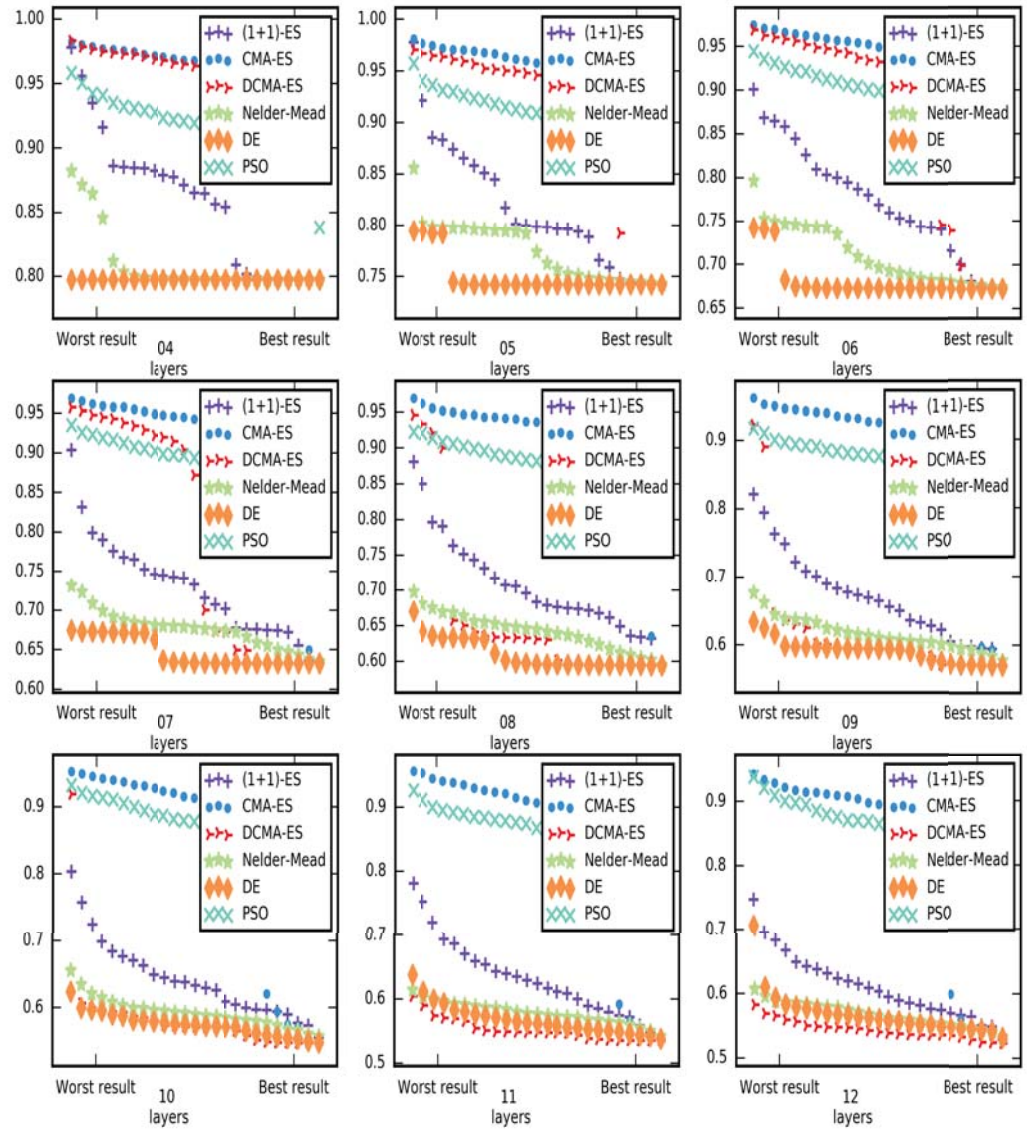


FIGURE 2.18 : Performance des différents algorithmes sur le problème du papillon sans pénalisation. L'axe des abscisses représente les différents runs (triés : meilleurs résultats sur la droite). DE domine pour la plupart des dimensions, mais était moins robuste que NM et DCMA sur le tout dernier cas.

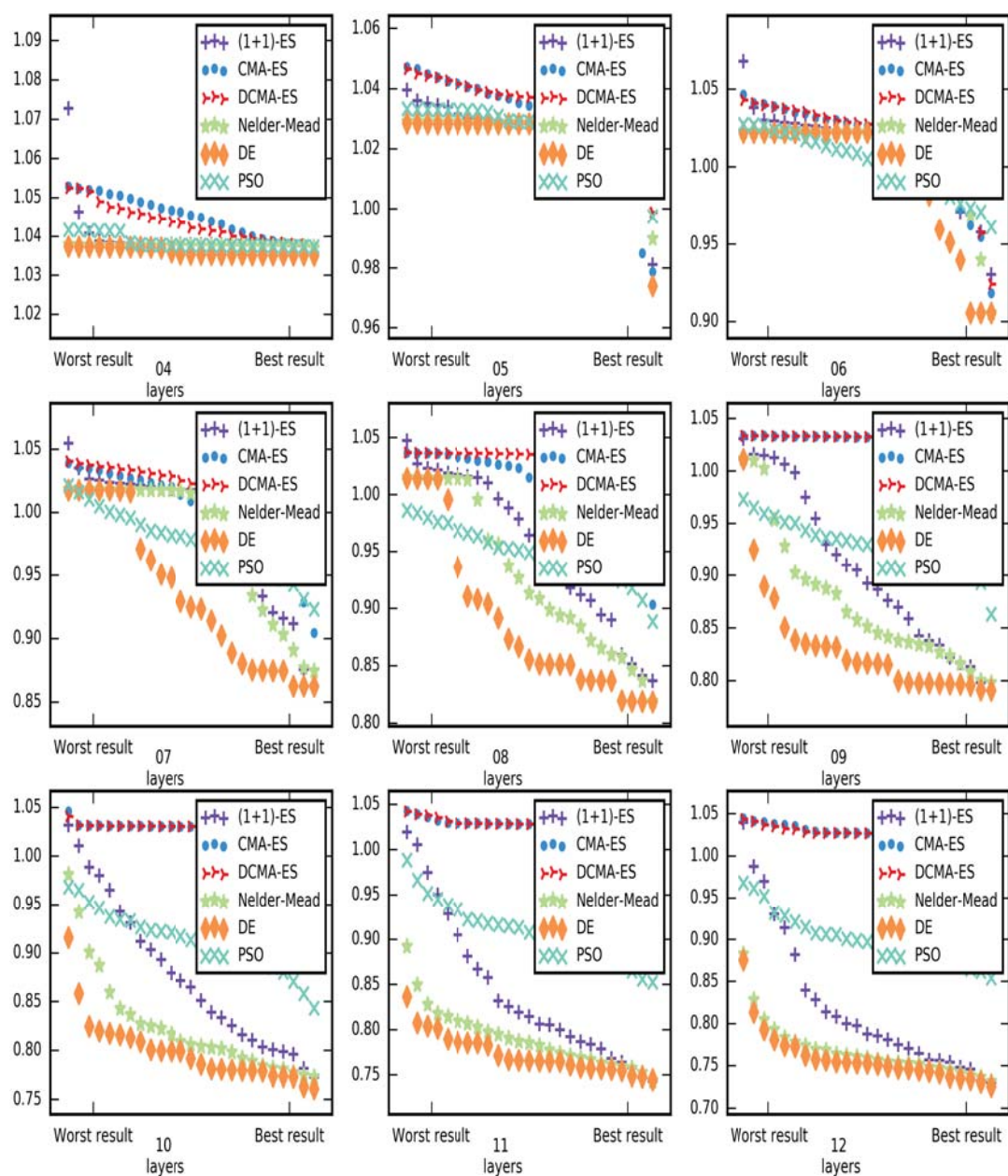


FIGURE 2.19 : Performance des différents algorithmes sur le problème du papillon avec pénalisation (plus le meilleur est bas). L'axe des abscisses représente les différents runs. Ici, DE domine clairement.

Les résultats individuels dans le cas sans pénalisation sont montrés dans la figure 2.19 ; Les résultats sans pénalisation dans la figure 2.18 montrent une plus forte domination de DE. DE toujours obtient d'excellents résultats, mais avec 11 et 12 couches est (légèrement) battu par NM, qui obtient de très bons résultats à travers tous les tests. $(1 + 1) - ES$ et PSO sont légèrement plus mauvais, et ne fonctionnent pas aussi bien sur ce problème. Le CMAES obtient de piètres performances : il parvient à approcher l'optimal avec 4 et 5 couches mais pas tout à fait. Après ça, il est complètement dépassé par tous les autres.

DE n'est pas le meilleur des algorithmes quand on utilise des cas-tests classiques en informatique, ceux qui sont forcément artificiels. Il est donc très intéressant de voir la force de cet algorithme sur les problèmes photoniques. L'interprétation que nous en avons est la suivante : ces cas sont caractérisés par une grande modularité, c'est à dire que des parties de chaque design sont capables de fonctionner presque seules. C'est clairement le cas pour les structures à gradient, évidemment, mais on peut faire le même raisonnement pour les Morpho. Un des "ingrédients" de DE est le cross-over, c'est à dire qu'il permet l'échange de caractéristiques entre individus, telles quelles, dans environ la moitié des cas. Cela est inspiré de la façon dont les gènes dominants s'expriment en biologie. Ceci lui donne un énorme avantage sur des stratégies évolutionnaires qui n'ont pas cette particularité.

Il est intéressant de voir aussi que DE est un des algorithmes les plus simples. On trouve des versions sur internet qui tiennent en 15 lignes de code. C'est clairement l'algorithme à utiliser pour la photonique.

2.6 Conclusion

En conclusion, nous avons montré que les structures qu'on pouvait trouver dans la nature sont effectivement optiquement optimales - ou presque. Quand elles ne le sont pas, c'est que d'autres contraintes que les contraintes optiques (par exemple des contraintes mécaniques, ou de fabrication) ont été prises en compte lors de l'évolution de l'espèce.

Cela signifie aussi qu'il faut toujours s'attendre à obtenir des solutions intelligibles ou régulières quand on fait de l'optimisation de structures photoniques - et donc supposer que l'optimisation a échoué si ce n'est pas le cas. En tous les cas, il faut commencer par des cas simples, puis les compliquer petit à petit. C'est cette stratégie qui permet d'évaluer si le problème posé a été résolu de façon satisfaisante ou pas.

Les problèmes d'optimisation que nous avons étudiés ci-dessus forment une classe de problèmes particuliers, difficiles, physiquement pertinents et dont on connaît les solutions parce qu'elles existent dans la nature. Ces problèmes permettent donc de tester les algorithmes d'optimisation évolutionnaires de la façon la plus pertinente possible. C'est essentiel parce que l'optimisation est un problème NP-complet et que rien ne garantit jamais que la solution trouvée est effectivement la meilleure. Savoir qu'un algorithme est capable de retrouver une solution connue donne donc confiance en le fait qu'il sera capable d'aborder un problème d'une difficulté comparable. On peut penser qu'avoir accès à ces cas tests, permettra aussi dans le futur de trouver de nouveaux algorithmes plus efficaces.

Grâce aux fonctions de coût particulières utilisés pour chaque cas, on peut comparer les différentes techniques d'optimisation inspirées de l'évolution. Toutes simulent l'évolution dans le temps d'un ensemble d'individus présentant chacun des caractéristiques uniques. Nos résultats montrent que parmi les algorithmes évolutionnaires, ceux qui sont les plus efficaces sur ces problèmes sont de façon constante ceux qui, à travers des opérateurs de croisement entre individus, s'inspirent directement de la reproduction sexuée.

Il faut souligner qu'en biologie, on ignore complètement pourquoi la reproduction sexuée existe, alors qu'elle a l'air d'avoir un coût apparent énorme (deux individus doivent se rencontrer pour ne générer qu'un seul autre individu). D'une certaine façon, notre étude fournit une réponse : le fait de partager des morceaux de solutions entre individus, si ces morceaux peuvent fonctionner séparément, est un énorme avantage évolutif parce que cela permet de trouver des solutions très efficaces à des problèmes donnés. Et bien entendu, les problèmes réels sont extrêmement modulaires, encore plus que les problèmes photoniques.

3

Etude d'un anti-reflet généré par optimisation

3.1 Introduction

Le chapitre précédent nous a donné confiance en nos algorithmes, et plus exactement capables de reconnaître leurs limites. Nous montrons dans ce chapitre que les mêmes techniques d'optimisation qui nous ont permis de retrouver des structures existant dans la nature peuvent être utilisées pour générer de nouvelles structures. Nous avons en effet appliqué nos algorithmes au problème de la génération de courant électrique par des cellules photovoltaïques en essayant d'optimiser l'anti-reflet et trouvé des structures surprenantes de façon très systé-

matique.

3.2 Génération d'un anti-reflet pour le photovoltaïque

On commence par choisir une structure avec quelques degrés de liberté et les algorithmes évolutionnaires permettent alors de trouver les meilleurs paramètres géométriques.

L'étude précédente montre que c'est en laissant un grand nombre de degrés de liberté aux algorithmes qu'on peut obtenir des résultats originaux, à condition que ce nombre soit raisonnable - pour que le problème ne soit pas trop difficile. Nous avons donc choisi de tester cette stratégie sur un type particulier de cellule photovoltaïque, basé sur l'utilisation de couches extrêmement minces de silicium amorphe.

Ces structures sont en effet beaucoup plus sujettes à des effets interférentiels que des cellules photovoltaïques conventionnelles. On peut utiliser ces effets pour permettre au silicium d'absorber un maximum de lumière alors qu'il est presque transparent - surtout à faible épaisseur et dans la partie rouge du spectre visible où l'on convertit le plus efficacement l'énergie lumineuse en énergie électrique. Nous avons cherché à optimiser le courant de court-circuit théorique produit grâce à une épaisseur de Silicium de $100nm$, en posant en guide de couche anti-reflet un empilement de couches d'indice alterné 1.4 et 1.7.

Le choix de ces indices conditionne énormément la structure obtenue. Nous avons fait ce choix d'après nos expériences précédentes : on a vu que pour avoir un effet maximum sur la lumière, les structures précédentes présentaient un contraste d'indice maximal. Nous avons donc forcé un contraste d'indice comparable à celui qu'on a dans la nature, et nous n'avons pas laissé les indices optiques libres. C'est un choix qu'on peut discuter, il s'avère qu'il a donné des résultats intéressants. Mais si nous avions laissé les indices libres, nous aurions plutôt obtenu des anti-reflets à gradient d'indice. Des résultats très récents obtenus dans l'équipe nous le laissent penser. L'anti-reflet que nous allons étudier ici n'est donc pas optimal dans l'absolu,

mais dans le contexte des contraintes que nous avons choisies. Les résultats présentés ici sont nos premiers essais, et cela suffit pour démontrer que des solutions élégantes et surprenantes peuvent émerger grâce à l'optimisation. Le reste est laissé pour de futurs travaux.

Pour la conception du revêtement antireflet (AR), nous avons utilisé notre méthode de matrice de diffusion pour les multicouches, Moosh¹⁰, pour calculer l'efficacité de la conversion. Nous avons utilisé les paramètres matériels standards qui accompagnent le programme. La fonction objectif est simplement prise comme une efficacité de conversion, calculée en supposant que chaque photon (dans la gamme $375 - 750\text{nm}$) qui est absorbé dans la couche active (silicium amorphe) est converti en une paire électron-trou puis collecté. Nous comparons ensuite le courant de court-circuit obtenu avec le courant de court-circuit maximal théorique qui peut être atteint lorsque tous les photons produisent une paire et sont ensuite collectés (toujours dans la gamme $375 - 750\text{nm}$ pour laquelle le silicium amorphe peut produire des excitons). Avec cette procédure, nous assurons que la fonction de coût, l'efficacité de la cellule photovoltaïque, est comprise entre 0 et 1.

Même si l'idée était d'étudier les cellules minces, nous avons effectué des optimisations sur deux cas (i) un cas où la couche de silicium amorphe est très fine (89 nm), que l'équipe avait étudié avant⁴³, et pour laquelle nous savons que 89 nm nous avons une résonance marquée dans le spectre d'absorption qui rend la couche plus absorbante et (ii) un cas où la couche est, au contraire, assez épaisse ($10\ \mu\text{m}$) pour être dans un cadre plus conventionnel pour du photovoltaïque.

Pour la couche mince de silicium amorphe, les structures résultantes et le spectre d'absorption correspondant sont montrés sur la figure 3.1. Pour être juste, nous avons comparé les performances du revêtement AR structuré avec 12 et 20 couches avec un revêtement AR monocouche (voir 3.1). Pour ce dernier, les caractéristiques optimales sont bien connues. L'épaisseur de la couche doit être choisie de sorte qu'elle soit égale au quart de la longueur d'onde de fonc-

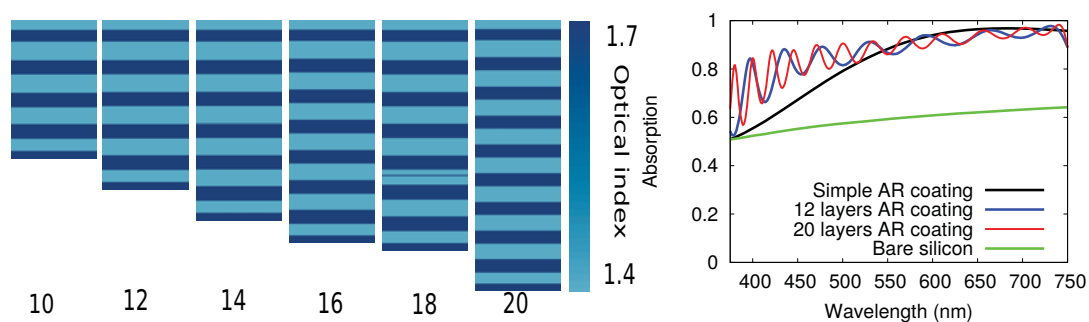


FIGURE 3.1 : Structures optimales produites par les algorithmes pour une épaisseur faible de silicium (89 nm), et absorption pour quelques structures.

tionnement central. Nous avons pris ici une couche avec un indice optique de 1,7 (plus efficace qu'un revêtement d'indice 1,4) et une épaisseur de 95,6 nm, correspondant à une longueur d'onde d'opération centrale de 650 nm.

Nous soulignons que, parce que la couche elle-même est résonnante, le nombre optimal de couches semble être de 12. Nous avons calculé l'efficacité de conversion de la structure pour différents nombres de couches et nous sommes arrivés à la conclusion qu'il est à son maximum pour 4 ou 5 périodes de la structuration interne et donc 10 ou 12 couches. C'est pourquoi les résultats de l'optimisation pour les couches 14 et 16 ressemblent exactement au revêtement AR 12 couches (les épaisseurs de certaines couches sont clairement extrêmement petites, de sorte qu'elles ne contribuent pas à la réponse optique).

Pour une couche de silicium plus épaisse, les résultats de l'optimisation sont beaucoup plus clairs car la couche n'est plus résonnante. L'avantage apporté par le revêtement AR structuré est cependant plus faible par rapport au simple revêtement AR (la même couche d'épaisseur 95,6 nm que précédemment). Il est frappant de constater que pour 12 couches, la structure optimale est la même pour la couche de silicium épaisse ou mince. L'avantage apporté par le revêtement AR structuré est cependant plus faible par rapport au simple revêtement AR (la même couche d'épaisseur 95,6 nm que précédemment).

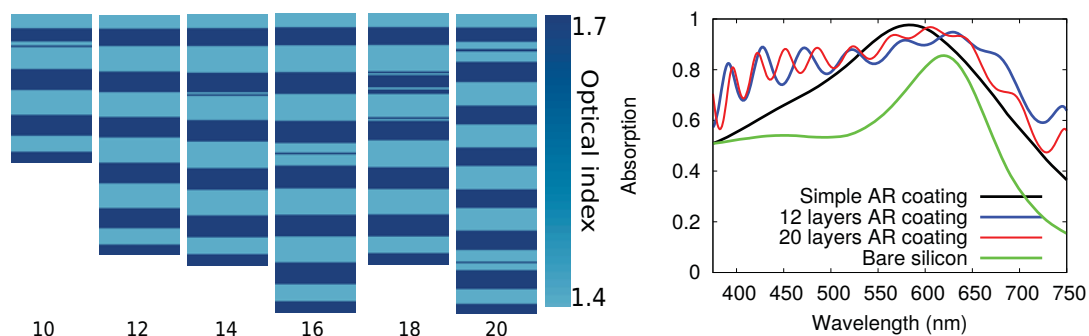


FIGURE 3.2 : Structures optimales produites par les algorithmes pour une épaisseur importante de silicium ($10\ \mu\text{m}$), et absorption pour quelques structures.

Structure type	J_{sc}	Efficacité
89 nm nu	12.859	0.55778
89 nm + couche AR	17.075	0.74067
$10\ \mu\text{m}$	13.759	0.59632
$10\ \mu\text{m}$ + couche AR	19.991	0.86639

TABLE 3.1 : Performances des structures que nous utilisons comme références : des épaisseurs de silicium de 89 nm et $10\ \mu\text{m}$ respectivement nues ou couvertes d'une couche anti-reflet classique centrée sur 650 nm.

Les résultats sont clairement des miroirs de Bragg avec des bords modifiés. Il est frappant de constater que pour 12 couches, la structure optimale est la même pour la couche de silicium épaisse ou mince. Bien sûr, le cas que nous avons traité ici est simple. Encore une fois, notre objectif n'était pas d'optimiser une structure réelle avec des paramètres de matériaux parfaitement précis (en général, les revêtements AR simples sont moins efficaces pour le silicium cristallin que ce qui est montré ici et les revêtements AR plus complexes sont donc encore plus pertinents). Ici, évidemment, les algorithmes pointent systématiquement vers une classe inattendue de revêtements AR plutôt que comme des solutions très différentes pour différentes épaisseurs de la couche de silicium actif ou différents nombres de couches dans le revêtement. C'est ce qui rend les résultats très prometteurs - on peut être sûr que cette méthode, appliquée à d'autres problèmes en photonique, sera capable de produire des structures efficaces, régulières et intelligibles.

Couches	89 nm		10 μm	
	J_{sc}	Efficacité	J_{sc}	Efficacité
10	19.011	0.79615	21.001	0.87949
12	19.062	0.79827	21.032	0.88080
14	19.042	0.79746	21.056	0.88181
16	19.047	0.79768	21.075	0.88261
18	19.021	0.79655	21.072	0.88245
20	19.057	0.79808	21.100	0.88364

TABLE 3.2 : Performances des différentes couches anti-reflet générées par les algorithmes.

Nombre de couche	1	2	3	4	5	6	7	8
Épaisseur des couches	1000	79	106.3	144.928	120.275	100	70	1000

TABLE 3.3 : Structure d'un anti-reflet à huit (8) couches

Quand on compare, pour différents nombres de couches, les efficacités des structures, on voit bien qu'il y a finalement très peu de différence entre une dizaine de couches et une vingtaine. Dans la suite, on va voir que les performances pour juste 6 couches sont déjà intéressantes. La propriété principale de ces structures et qui explique leur supériorité, c'est qu'elles arrivent à faire en sorte que la lumière soit absorbée par la couche active, même si celle-ci est très peu absorbante (ce qui est le cas dans le rouge). Au final, la réflexion sur ces structures est parfois importante, mais au final c'est ainsi que le courant de court-circuit est maximisé.

Évidemment, il s'agit maintenant de comprendre a posteriori pourquoi cette solution surprenante est optimale, et pour cela, en faire une analyse physique.

3.3 Analyse physique de l'anti-reflet

Quand on regarde les structures, on voit bien qu'il s'agit de miroirs de Bragg dont les extrémités supérieures et inférieures ont été modifiées - sans doute pour améliorer l'adaptation d'impédance avec l'air en haut et avec la couche active en bas. Il reste extrêmement peu intuitif que la meilleure structures soit un miroir de Bragg.

On peut commencer par se demander quelle est la longueur d'onde centrale du miroir de Bragg. Si on prend les couches les plus minces, correspondant à l'indice le plus élevé, on trouve que la longueur d'onde de travail est $\lambda_0 = 4n_h e$. Alors que si on prend les couches les plus épaisses, elles correspondent à l'indice le plus bas et on trouve que la longueur d'onde est $\lambda_0 = 4n_b e$. Les deux valeurs sont extrêmement proches, on est donc bien en présence d'un miroir de Bragg dont la longueur d'onde de travail est dans l'infra-rouge très proche. Ceci lui confère la propriété de réfléchir le spectre infra-rouge qui n'est pas absorbé par la couche active. Il se trouve que l'échauffement des cellules photovoltaïques a tendance à faire diminuer le rendement des cellules. Notre anti-reflet aurait l'avantage de limiter cet échauffement naturellement - et bien que nous ne l'ayons pas spécialement demandé.

On peut se demander ce qui se passe suivant l'épaisseur de silicium qu'on considère. Pour un anti-reflet donné, nous avons tracé l'efficacité en fonction de l'épaisseur de silicium (voir figure 3.3). Cela montre l'existence d'optimum locaux, surtout à faible épaisseur ou une résonance suffisamment large peut tout changer. A grande épaisseur, l'efficacité sature et tend vers une limite bien déterminée. C'est signe que les résonances de la couche active ne jouent plus vraiment de rôle.

Le fait que cet anti-reflet soit un miroir de Bragg présente cependant un inconvénient notable. Lorsqu'on fait varier l'angle d'incidence, comme nous l'avons montré dans le premier chapitre, la bande interdite est poussée vers le bleu. Dans ce cas, elle commence à avancer sur la partie intéressante du spectre que la couche active est capable de convertir. L'efficacité de la cellule chute donc plus vite qu'avec un anti-reflet à gradient, par exemple.

3.4 Comparaison à l'expérience

A l'été 2017, Perrine Juillet, en stage dans l'équipe et en collaboration avec l'équipe d'Angélique Bousquet à l'université de Clermont-Auvergne, a utilisé une technique de déposition de

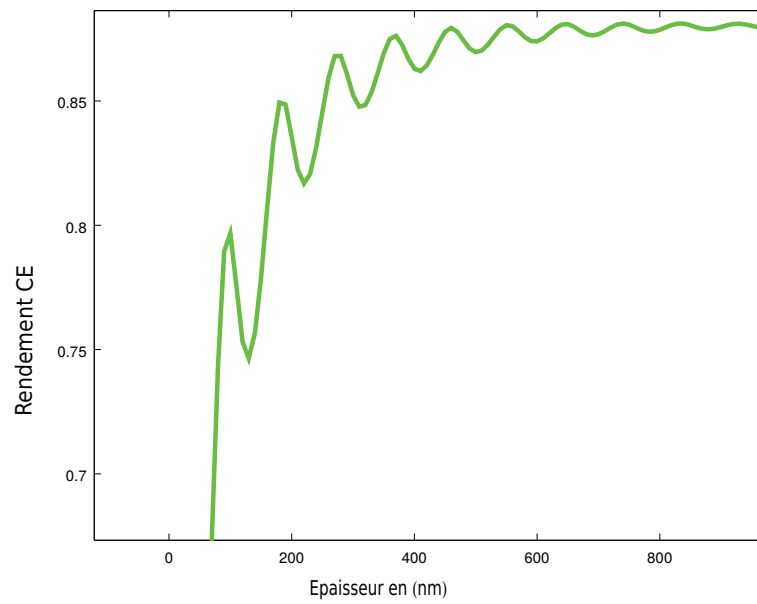


FIGURE 3.3 : Rendement de la cellule en fonction des épaisseurs de silicium pour une structure à 12 couches. On voit nettement que le rendement sature aux grandes épaisseurs.

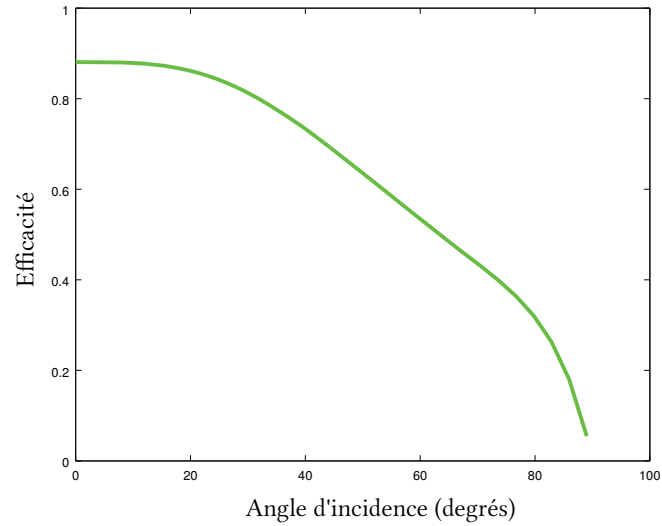


FIGURE 3.4 : Variation de l'efficacité de la cellule avec l'angle d'incidence, pour un anti-reflet à 16 couches (6 motifs du miroir de Bragg) placé sur une épaisseur infinie de silicium.

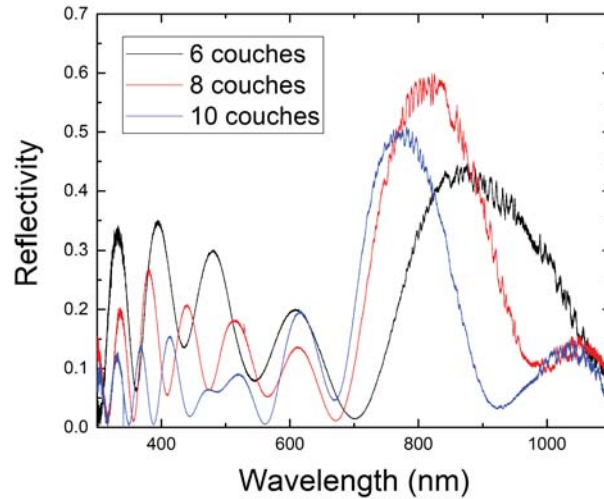


FIGURE 3.5 : Résultat de fabrication des couches anti-reflets pour différentes couches.

couches de diélectrique d'indices contrôlables¹⁵ pour réaliser quelques échantillons et vérifier leur bon fonctionnement. L'avantage de cette technique est qu'elle est déployable rapidement sur une ligne industrielle standard si elle intéressait l'industrie.

Les structures à 6, 8 et 10 couches ont plus particulièrement été choisies parce qu'elles incluent un nombre relativement modeste de couches, tout en offrant de très bonnes performances. Perrine Juillet a donc réalisé les structures, et pour les caractériser nous avons choisi de considérer le coefficient de réflexion en énergie, parce que nous n'avons pas de quoi mesurer ici un courant de court-circuit. Les résultats sont montrés sur la figure 3.5.

Grâce à Moosh, il est simple de calculer le coefficient de réflexion théorique, qu'on pourrait obtenir si la structure était parfaite. On voit que les principales propriétés sont bien reproduites, même si la structure à 8 couches a probablement connu quelques problèmes de fabrication. Les structures à 6 et 10 couches sont tout à fait en accord avec la théorie pour ce qui est de la position des pics de réflexion, situés dans l'infra-rouge proche, comme attendu. On peut noter

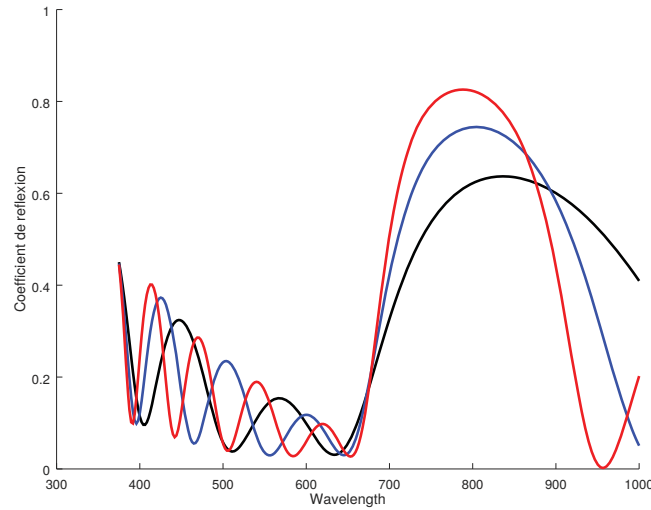


FIGURE 3.6 : Résultat d'optimisation des couches anti-reflets pour 6 couches, 8 couches et 10 couches.

cependant que le coefficient de réflexion est globalement plus faible pour la structure réelle que ce qui était attendu. Il est peu probable que cela se traduise par un plus grand courant de court-circuit en pratique, on peut plutôt penser à de la diffusion si les interfaces ne sont pas suffisamment planes.

En tous les cas, les résultats sont en bon accord avec la théorie. Cela montre que ces anti-reflets pourraient tout à fait être intégrés sur des cellules solaires rapidement si ils avaient vraiment un intérêt. Il est cependant difficile de juger de l'intérêt économique d'un tel anti-reflet. Il est forcément plus cher, donc difficile à envisager pour les plus simples des cellules - on cherche pour celles-ci à minimiser le coût et les matériaux. Mais un tel anti-reflet pourrait tout à fait trouver sa place dans des dispositifs à concentration, pour lesquels on peut envisager des cellules plus chères mais plus efficaces, et pour lesquels limiter l'échauffement de la structure serait encore plus pertinent. Dans un tel cadre, les performances très moyennes de la cellule quand on s'écarte d'un angle d'incidence faible (en dessous de 20 degrés) aurait moins

d'importance.

3.5 Conclusion

Nous avons montré qu'il était possible d'obtenir grâce à une optimisation une structure régulière, assez similaire à une structure naturelle, mais ayant des propriétés intéressantes technologiquement. Il faut souligner qu'aucun humain n'aurait probablement pu imaginer une telle structure - parce qu'on n'utilise pas naturellement un miroir de Bragg comme un anti-reflet. Cette technique peut donc être considérée comme une nouvelle source d'inspiration, au delà des structures bio-inspirées.

Il faut aussi insister sur le fait qu'une fois la structure produite par les algorithmes, on voit qu'elle est intelligible et qu'on peut tout à fait l'analyser physiquement, en apprenant des choses au passage.

Enfin, nous avons pu faire fabriquer la structure avec des techniques réalistes, et voir que l'anti-reflet fonctionnait effectivement à peu près comme attendu - notamment en améliorant l'absorption du rouge, importante pour la génération de paires électrons-trous, mais réfléchissant l'infra-rouge proche et donc limitant potentiellement l'échauffement de la cellule.

Conclusion

En reproduisant numériquement l'évolution d'un ensemble d'individus, nous avons réussi à retrouver des structures présentes dans la nature, mais qui sont si complexes et délicates qu'on peut avoir du mal à imaginer qu'elles aient spontanément été produites par l'évolution.

Cette thèse, en montrant que ces structures sont des optimums de problèmes bien posés, permet de comprendre comment elles ont émergé, et à quel besoin précis elles répondent. Ces problèmes compliqués sont un excellent moyen de mesurer la performance des différents algorithmes évolutionnaires, ce qui devrait permettre de les améliorer encore à l'avenir.

Une idée très forte est en effet que pour être efficaces sur des problèmes réels, les algorithmes doivent être modulaires - et permettre à des individus de s'échanger des "recettes" qui fonctionnent pour une partie de la structure. Les comparaisons entre les différents types d'algorithmes nous ont montré de façon très claire que les stratégies évolutives incluant une reproduction sexuée ont l'air d'être plus efficaces pour traiter ces problèmes inspirés par la nature. Notre génome, d'une certaine façon, est complètement modulaire - il n'est donc pas étonnant que la reproduction sexuelle soit aussi efficace pour produire des espèces avec des caractéristiques étonnantes, comme justement les structures photoniques qu'on trouve dans la nature. Il n'y a pas trop de doute sur le fait que la reproduction sexuée a effectivement favorisé l'émergence de ces structures, et nos travaux donnent une bonne raison pour cela.

En suivant ces idées, les personnes qui ont collaboré avec nous pour ces travaux et qui étudient ces algorithmes ont produit de nouveaux algorithmes probablement encore plus efficaces sur des problèmes photoniques, qui sont typiquement modulaires.

Nous avons compris aussi pourquoi les structures que l'on peut trouver dans la littérature ne présentent pas la même élégance que les structures naturelles : quand on laisse trop de degrés de liberté aux algorithmes, ils peinent à converger, produisant des structures désordonnées et incompréhensibles. Nous avons pu le constater parce que nous avons fait doucement varier la dimension (et donc la difficulté) de nos problèmes. Ces résultats indiquent qu'il faut suivre une procédure précise, en augmentant petit à petit la complexité du problème à traiter, pour s'arrêter quand on voit le désordre dominer.

Enfin, il semble possible de trouver de cette façon des solutions inédites à des problèmes pratiques comme celui de l'absorption de la lumière par une cellule photovoltaïque et potentiellement de bien d'autres. La structure anti-reflet étudiée dans ce manuscrit n'aurait sans doute pas pu être inventée par un être humain, parce qu'il n'aurait peut-être jamais eu l'idée de mettre un miroir diélectrique et de l'utiliser comme anti-reflet. À l'avenir, une compréhension encore plus fine de ces structures sera peut-être possible, ce qui conduira à considérer ces optimisations numériques comme une nouvelle source d'inspiration. Il faut accepter de ne comprendre le comportement physique de ces structures qu'*a posteriori*. On peut même aller jusqu'à penser que ces solutions sont celles que nous aurions pu trouver dans la nature si seulement elles avaient fourni un avantage évolutif à une espèce animale.

Bibliographie

- [1] S. Berthier, E. Charron, and J. Boulenguez. Morphological structure and optical properties of the wings of morphidae. *Insect Science*, 13 :145, 2006.
- [2] Serge Berthier. *Iridescences, les couleurs physiques des insectes*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [3] Serge Berthier. *Photonique des morphos*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [4] Tobias Blickle and Lothar Thiele. *A comparison of selection schemes used in genetic algorithms*, 1995.
- [5] Julie Boulenguez. *Caractérisation et modélisation de structures photoniques multi-échelles dans les bio-organismes, une espèce caractéristique des Morphidés : Morpho rhetenor*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2009.
- [6] Ilhem Boussaid. *Perfectionnement de métaheuristiques pour l’optimisation continue*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2013.
- [7] Roman Bruck, Kevin Vynck, Philippe Lalanne, Ben Mills, David J Thomson, Goran Z Mashanovich, Graham T Reed, and Otto L Muskens. All-optical spatial light modulator for reconfigurable silicon photonic circuits. *Optica*, 3(4) :396–402, 2016.
- [8] Charles Darwin and William F Bynum. *The origin of species by means of natural selection : or, the preservation of favored races in the struggle for life*. AL Burt, 2009.
- [9] Josselin Defrance, Caroline Lemaître, Rabih Ajib, Jessica Benedicto, Emilien Mallet, Rémi Pollès, Jean-Pierre Plumey, Martine Mihailovic, Emmanuel Centeno, Cristian Ciaraci, et al. Moosh : A numerical swiss army knife for the optics of multilayers in octave/matlab. *Journal of Open Research Software*, 4(1), 2016.
- [10] Josselin Defrance, Caroline Lemaître, Rabih Ajib, Jessica Benedicto, Emilien Mallet, Rémi Pollès, Jean-Pierre Plumey, Martine Mihailovic, Emmanuel Centeno, Cristian Ciaraci, David Smith, and Antoine Moreau. Moosh : A numerical swiss army knife for the optics of multilayers in octave/matlab. *Journal of Open Research Software*, 4(1), 2016.
- [11] Johann Dréo, Alain Pétrowski, Patrick Siarry, and Eric Taillard. *Métaheuristiques pour l’optimisation difficile*. Eyrolles, 2003.
- [12] Johann Dréo and Patrick Siarry. Métaheuristiques d’optimisation vues sous l’angle de l’échantillonnage de distribution. *Appl Jesa Journal Europeen Des Systemes Automatisés*, 42(1) :9, 2008.

- [13] Abbas El Dor. Perfectionnement des algorithmes d'optimisation par essaim particulaire : applications en segmentation d'images et en électronique. PhD thesis, Université Paris-Est, 2012.
- [14] Oussama El Gerari. Contribution à l'amélioration des techniques de la programmation génétique. Littoral, 2011.
- [15] A Farhaoui, A Bousquet, R Smaali, A Moreau, E Centeno, J Cellier, C Bernard, R Rape-gno, F Réveret, and 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(1) :015306, 2016.
- [16] Vincent Gardeux. Conception d'heuristiques d'optimisation pour les problèmes de grande dimension : application à l'analyse de données de puces à ADN. PhD thesis, Université Paris-Est, 2011.
- [17] David Goldberg. Genetic algorithms in optimization, search and machine learning. Reading : Addison-Wesley, 1989.
- [18] David E Goldberg and Kalyanmoy Deb. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms. *Foundations of genetic algorithms*, 1 :69–93, 1991.
- [19] B. Gralak, G. Tayeb, and S. Enoch. Morpho butterflies wings color modeled with lamellar grating theory. *Opt. Expr.*, 9 :567, 2001.
- [20] G Granet and B Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in tm polarization. *JOSA A*, 13(5) :1019–1023, 1996.
- [21] Hanaa Hachimi. Hybridations d'algorithmes métaheuristiques en optimisation globale et leurs applications. PhD thesis, INSA de Rouen ; École Mohammadia d'ingénieurs (Rabat, Maroc), 2013.
- [22] Nikolaus Hansen and Andreas Ostermeier. Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies. *Evolutionary computation*, 9(2) :159–195, 2001.
- [23] John H Holland. Adaptation in natural and artificial systems. an introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence. Ann Arbor, MI : University of Michigan Press, 1975.
- [24] Cezary Z Janikow and Zbigniew Michalewicz. An experimental comparison of binary and floating point representations in genetic algorithms. In *ICGA*, pages 31–36, 1991.
- [25] Grahame A Jastrebski and Dirk V Arnold. Improving evolution strategies through active covariance matrix adaptation. In *Evolutionary Computation*, 2006. CEC 2006. IEEE Congress on, pages 2814–2821. IEEE, 2006.
- [26] FX Kärtner, U Morgner, R Ell, T Schibli, JG Fujimoto, EP Ippen, V Scheuer, G Angelow, and T Tschudi. Ultrabroadband double-chirped mirror pairs for generation of octave spectra. *JOSA B*, 18(6) :882–885, 2001.

- [27] S. Kinoshita, S. Yoshioka, and K. Kawagoe. Mechanisms of structural colour in the morpho butterfly : cooperation of regularity and irregularity in an iridescent scale. *Proc. R. Soc. Lond. B*, 263 :1417, 2002.
- [28] S. Kinoshita, S. Yoshioka, and J. Miyazaki. Physics of structural colors. *Rep. Prog. Phys.*, 71 :076401, 2008.
- [29] S Kinoshita, S Yoshioka, and J Miyazaki. Physics of structural colors. *Reports on Progress in Physics*, 71(7) :076401, 2008.
- [30] Oswin Krause, Dídac Rodríguez Arbonès, and Christian Igel. Cma-es with optimal covariance update and storage complexity. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, pages 370–378, 2016.
- [31] Jeffrey C Lagarias, James A Reeds, Margaret H Wright, and Paul E Wright. Convergence properties of the nelder–mead simplex method in low dimensions. *SIAM Journal on optimization*, 9(1) :112–147, 1998.
- [32] Philippe Lalanne and G Michael Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for tm polarization. *JOSA A*, 13(4) :779–784, 1996.
- [33] R. T. Lee and G. S. Smith. Detailed electromagnetic simulation for the structural color of butterfly wings. *Appl. Opt.*, 21 :4177, 2009.
- [34] Marco Antônio Luersen. GBNM : un algorithme d’optimisation par recherche directe. Application à la conception de monopalmes de nage. PhD thesis, INSA de Rouen, 1993.
- [35] Marco Antônio Luersen and Rodolphe Le Riche. Globalisation de l’algorithme de nelder-meade : Application aux composites. Technical report, Technical Report, LMR, INSA de Rouen, France, 2001.
- [36] Angus Macleod. The quarterwave stack : 1. early history. *Society of Vacuum Coaters Bulletin*, pages 22–27, 2012.
- [37] Antoine MOREAU Marie-Claire CAMBOURIEUX. Etude théorique et numérique de l’iridescence des Morphidae. PhD thesis, Université Blaise Pascal, Institut Pascal, 2015.
- [38] Ivan Martincek, Dusan Pudis, Alexander Satka, Ivica Janigova, Katarina Csomorova, and Frantisek Cernobila. Temperature effect on optical properties of the cuticle of lucilia sericata. *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, 119(11) :523 – 527, 2008.
- [39] D Mckenzie and M Large. Multilayer reflectors in animals using green and gold beetles as contrasting examples. *Journal of experimental biology*, 201(9) :1307–1313, 1998.
- [40] Gustav Mie. Beiträge zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallösungen. *Annalen der physik*, 330(3) :377–445, 1908.
- [41] M. G. Moharam, Eric B. Grann, Drew A. Pommet, and T. K. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12(5) :1068–1076, May 1995.

- [42] Antoine Moreau, Christophe Lafarge, Nicolas Laurent, Kofi Edee, and Gérard Granet. Enhanced transmission of slit arrays in an extremely thin metallic film. *Journal of Optics A : Pure and Applied Optics*, 9 :165, 2007.
- [43] Antoine Moreau, Rafik Smaali, Emmanuel Centeno, and Christian Seassal. Optically optimal wavelength-scale patterned ito/zno composite coatings for thin film solar cells. *Journal of Applied Physics*, 111(8) :083102, 2012.
- [44] John A Nelder and Roger Mead. A simplex method for function minimization. *The computer journal*, 7(4) :308–313, 1965.
- [45] AC Neville. Metallic gold and silver colours in some insect cuticles. *Journal of Insect Physiology*, 23(10), 1977.
- [46] Badreddine Ounnas. Étude et optimisations de jets photoniques pour des applications non conventionnelles dans les domaines optique et hyperfréquences. PhD thesis, Saint-Etienne, 2015.
- [47] Andrew R Parker and Natalia Martini. Structural colour in animals—simple to complex optics. *Optics & Laser Technology*, 38(4-6) :315–322, 2006.
- [48] E Perrin, A Mandrille, M Oumoun, C Fonteix, and I Marc. Optimisation globale par stratégie d’évolution. *RAIRO-Operations Research*, 31(2) :161–201, 1997.
- [49] Volodymyr Pervak, Izhar Ahmad, MK Trubetskov, AV Tikhonravov, and Ferenc Krausz. Double-angle multilayer mirrors with smooth dispersion characteristics. *Optics express*, 17(10) :7943–7951, 2009.
- [50] Alexander Y Piggott, Jesse Lu, Konstantinos G Lagoudakis, Jan Petykiewicz, Thomas M Babinec, and Jelena Vučković. Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer. *Nature Photonics*, 9(6) :374–377, 2015.
- [51] William H Press. Numerical recipes 3rd edition : The art of scientific computing. Cambridge university press, 2007.
- [52] Lord Rayleigh. Vii. on the optical character of some brilliant animal colours. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 37(217) :98–111, 1919.
- [53] I. Rechenberg. Evolutionsstrategie-Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution. Friedrich Frommann Verlag, Stuttgart-Bad Cannstatt, 1973.
- [54] Rafael Rivera-Lopez and Juana Canul-Reich. A global search approach for inducing oblique decision trees using differential evolution. In *Canadian Conference on Artificial Intelligence*, pages 27–38. Springer, 2017.
- [55] Franziska Schenk, Bodo D Wilts, and Doekele G Stavenga. The japanese jewel beetle : a painter’s challenge. *Bioinspiration & biomimetics*, 8(4) :045002, 2013.
- [56] Ainsley E Seago, Parrish Brady, Jean-Pol Vigneron, and Tom D Schultz. Gold bugs and beyond : a review of iridescence and structural colour mechanisms in beetles (coleoptera). *Journal of the Royal Society Interface*, 6(Suppl 2) :S165–S184, 2009.

- [57] Bing Shen, Peng Wang, Randy Polson, and Rajesh Menon. An integrated-nanophotonics polarization beamsplitter with $2.4 \times 2.4 \mu\text{m}^2$ footprint. *Nature Photonics*, 9(6) :378–382, 2015.
- [58] Doekele G Stavenga, Bodo D Wilts, Hein L Leertouwer, and Takahiko Hariyama. Polarized iridescence of the multilayered elytra of the japanese jewel beetle, *chrysochroa fulgidissima*. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London B : Biological Sciences*, 366(1565) :709–723, 2011.
- [59] Rainer Storn and Kenneth Price. Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, 11(4) :341–359, 1997.
- [60] R Szipöcs, A Köházi-Kis, S Lakó, P Apai, AP Kovács, G DeBell, L Mott, AW Loudereback, AV Tikhonravov, and MK Trubetskov. Negative dispersion mirrors for dispersion control in femtosecond lasers : chirped dielectric mirrors and multi-cavity gires-tournois interferometers. *Applied Physics B*, 70(1) :S51–S57, 2000.
- [61] Robert Szipöcs, Christian Spielmann, Ferenc Krausz, and Kárpát Ferencz. Chirped multilayer coatings for broadband dispersion control in femtosecond lasers. *Optics letters*, 19(3) :201–203, 1994.
- [62] Olivier Teytaud and Sylvain Gelly. Dcma : yet another derandomization in covariance-matrix-adaptation. In *Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 955–963. ACM, 2007.
- [63] Christian Veenhuis. Tree based differential evolution. In *EuroGP*, pages 208–219. Springer, 2009.
- [64] P. Vukusic, J. R. Sambles, C. R. Lawrence, and R. J. Wootton. Quantified interference and diffraction in single morpho butterfly scales. *Proc. Roy. Soc. Lond. B*, 266 :1403, 1999.
- [65] P Vukusic, JR Sambles, CR Lawrence, and RJ Wootton. Quantified interference and diffraction in single morpho butterfly scales. *Proceedings of the Royal Society of London B : Biological Sciences*, 266(1427) :1403–1411, 1999.
- [66] P Vukusic and DG Stavenga. Physical methods for investigating structural colours in biological systems. *Journal of the Royal Society Interface*, 6(Suppl 2) :S133–S148, 2009.
- [67] Pete Vukusic and J Roy Sambles. Photonic structures in biology. *Nature*, 424(6950) :852–855, 2003.
- [68] D. Zhu, S. Kinoshita, D. Cai, and J. B. Cole. Investigation of structural colors in morpho butterflies using the nonstandard-finite-difference time-domain method : Effects of alternately stacked shelves and ridge density. *Phys. Rev. E*, 80 :051924, 2009.