

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA

FACULTAD DE INFORMÁTICA CULIACÁN

MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INFORMACIÓN



**ESTUDIO COMPARATIVO DE TÉCNICAS
METAHEURÍSTICAS PARA EL DESARROLLO DE
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS Y CRISTALES FOTÓNICOS**

TESIS

COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS DE LA INFORMACIÓN

PRESENTA:

ING. MAURO ALEJANDRO MONTENEGRO MEZA

DIRECTORES DE TESIS:

DR. ARTURO YEE RENDÓN

DR. CRISTO MANUEL YEE RENDÓN

CULIACÁN , SINALOA, OCTUBRE DEL 2018

**ESTUDIO COMPARATIVO DE TÉCNICAS
METAHEURÍSTICAS PARA EL DESARROLLO DE
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS Y
CRISTALES FOTÓNICOS**

Mauro Alejandro Montenegro Meza

Septiembre del 2018



Dedicatoria:

*A mis padres Mauro Montenegro González y María del Socorro Meza,
quienes me han guiado y cuidado desde siempre.*

*A mi hermano Jonathan,
por ser además un amigo en quien confiar.
A mi familia quien me ha apoyado en mis decisiones,
en especial a mi tía Aidee.*

Agradecimientos

A mis directores de tesis: Dr. Arturo Yee Rendón y Cristo Manuel Yee Rendón por compartir su tiempo, conocimiento, experiencias y guiarme en el camino de la investigación.

A mi familia por apoyarme y brindarme el cariño necesario para continuar adelante.

Agradezco a mi novia Tania por cuidarme, aconsejarme y estar siempre a mi lado sin importar la situación.

A las personas y compañeros que he conocido en estos dos años. Agradezco a mi amiga y colega Jessica, a quien admiro y agradezco el compartir ideas, experiencias, pensamientos y sobretodo compartir su amistad. Y agradezco especialmente a María a quien también admiro por su constancia, por sus consejos y honestidad.

Al Dr. Rolando Menchaca Méndez por ser un gran mentor, amigo y guía durante todo el tiempo que lo he conocido.

A la Universidad Autónoma de Sinaloa, y a la Facultad de Informática Culiacán por brindarme la oportunidad de realizar mis estudios de posgrado, y especial agradecimiento a la Dra. Xiomara Penélope Zaldívar Colado por motivarme y guiarme durante esta experiencia.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por financiar mis estudios de maestría.

Índice general

Glosario	VII
Índice de Ecuaciones	IX
Índice de Figuras	XI
Índice de Tablas	XII
1 Introducción	1
1.1 Planteamiento del problema	2
1.2 Objetivos	5
1.3 Hipótesis	6
1.4 Organización de la tesis	6
2 Estado del arte	9
2.1 Marco Teórico	9
2.1.1 Optimización	9
2.1.2 Algoritmos Genéticos	11
2.1.3 Particle Swarm Optimization	17
2.1.4 Heteroestructuras semiconductoras y ópticas	19
2.1.5 Teoría de bandas	23
2.2 Trabajos Relacionados	32
3 Metodología	37
3.1 Modelado Sistema 2DEG	37
3.2 Modelado Cristal Fotónico	39
3.3 Algoritmo Genético	42
3.3.1 Representación de individuos en problema de formación de un 2DEG	42

3.3.2	Representación de individuos en problema de formación de un Cristal Fotónico	43
3.3.3	Operador de Selección	43
3.3.4	Operador de Cruza	45
3.3.5	Operador de Mutación	46
3.4	Algoritmo Particle Swarm Optimization (PSO)	48
3.4.1	Representación de individuos	48
3.4.2	Actualización de Partículas	49
4	Resultados	53
4.1	Sistema 2DEG	53
4.1.1	Algoritmo Genético	54
4.1.2	Particle Swarm Optimization	57
4.1.3	Análisis de resultados	60
4.2	Cristal Fotónico	60
4.2.1	Algoritmo Genético	60
4.2.2	Particle Swarm Optimization	62
4.2.3	Análisis de resultados	64
5	Conclusiones	67
	Bibliografía	73

Glosario

2DEG Gas de Electrónes en Dos Dimensiones. XII, XIII, XV, 3, 5, 6, 19, 25, 43, 48, 54, 67

AG Algoritmo Genético. XIII, 2, 4–6, 12, 43, 44, 54, 60, 61, 67

FDTD Finite Difference Time Domain. XIV, XV, 4, 44, 68

MEEP MIT Electromagnetic Equation Propagation. 31, 43

MOSFET Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor. 2

PCC Photonic Crystal Cavity. XIV, 3, 5, 6, 43, 67

PSO Particle Swarm Optimization. XIII, 2, 4–6, 50, 57, 62

Índice de Ecuaciones

1.1	Minimización de energía	3
1.2	Maximización del factor Q	4
2.1	Función general de optimización	10
2.2	Restricciones de un problema de Optimización	10
2.3	Cálculo de velocidad de partícula en PSO	17
2.4	Cálculo de nueva posición de partícula en PSO	18
2.5	Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	20
2.6	Solución a un electrón libre	20
2.7	Ecuación de energía para un electrón	20
2.9	Expansión en una serie de Fourier	22
2.11	Función Solución de un electrón en términos de funciones de Bloch	22
2.12	Ecuación de Poisson	27
2.13	Ecuación de Poisson como densidad de carga en Heterouniones	28
2.14	Ecuación de Schrödinger con potencial de banda y densidad de carga	28
2.15	Ecuaciones de Maxwell	30
3.1	Función de onda modificada de Fang-Howard	37
3.4	Bits necesarios para representar una variable en una cadena binaria	43
3.6	Factor de inercia en PSO	50
3.7	Cálculo de la nueva posición de partículas en PSO	50

Índice de figuras

2.1	Relación entre el vector de propagación \vec{k} y su energía asociada \mathbf{E} . . .	21
2.2	Diagrama de la realación de dispersión tanto en la zona extendida como en la zona reducida	23
2.3	Bandas de conducción y valencia en un semiconductor	25
2.4	Heteroestructura AlGaAs/GaAs	26
2.5	Interfaz formada por AlGaAs/GaAs	27
2.6	Tipos de cristales fotónicos según la periodicidad del material dieléctrico a través de uno o más ejes. Los diferentes colores representan diferentes materiales con diferente constante dieléctrica. a)1 dimensión, b) 2 dimensiones, c) 3 dimensiones	29
3.1	Diagrama de bloques ilustrando el proceso de solución autoconsistente	38
3.2	Cuadrícula de Yee utilizada en el método FDTD	40
3.3	Diseño de una cavidad L3. En la maximización del factor Q se cambia la posición de 3 pozos que rodean a la cavidad en el eje $\Gamma - J$, se ha etiquetado a los desplazamientos como S_{1x} , S_{2x} , S_{3x}	41
3.4	Gráfica de los valores de Q para diferentes S_{1x} , S_{2x} , y S_{3x} computados mediante el uso de FDTD.	42
3.5	Selección por torneo en el AG	44
3.6	Cruza en un punto en el AG	45
3.7	Mutación de una cadena binaria en el Algoritmo Genético	46
3.8	Representación de una partícula en el espacio y su desplazamiento en función de su velocidad (v_i), mejor posición personal (p_i) y mejor posición global (g_i)	49
3.9	Evolución de población a través de las generaciones en PSO	51
4.1	Distribución de energía en las simulaciones del AG	55
4.2	Convergencia del valor de energía en el AG	55
4.3	Distribución de energía en las simulaciones del PSO	58
4.4	Convergencia del valor de energía en el PSO	58

ÍNDICE DE FIGURAS

4.5	Maximización del factor Q utilizando un AG con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones	62
4.6	Maximización del factor Q utilizando un PSO con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones	63
4.7	Convergencia de partículas en el PSO con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones	64
4.8	Comparativa del factor Q a través de la evolución de los algoritmos	65

Índice de tablas

3.1	Algoritmo Genético utilizado en la tesis	47
3.2	Ejemplo de población inicial en el algoritmo PSO	48
3.3	Algoritmo Particle Swarm Optimization utilizado en la tesis	52
4.1	Parámetros del AG en sistema 2DEG	54
4.2	Resultados estadísticos obtenidos de la aplicación de un AG en la minimización de energía E en un sistema 2DEG	54
4.3	Parámetros del PSO en el sistema 2DEG	57
4.4	Parámetros PSO en sistema 2DEG	57
4.5	Contraste de Resultados AG y PSO en el problema de formación de 2DEG	60
4.6	Parámetros iniciales del AG en la optimización del factor Q	61
4.7	Resultados obtenidos por el AG en la optimización del factor Q con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones	61
4.8	Parámetros iniciales del PSO en la optimización del factor Q	62
4.9	Resultados obtenidos por el PSO en la optimización del factor Q con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones	63
4.10	Contraste de Resultados de algoritmos AG y PSO en la maximización del factor Q	65

Resumen

La computación es una ciencia que ayuda a resolver problemas complejos mediante el desarrollo de algoritmos. En la actualidad, existen problemas de optimización con espacios de búsqueda muy amplios, que no pueden ser resueltos con algoritmos en tiempo polinomial de una manera eficiente. Con el afán de brindar soluciones a estos problemas se utilizan metaheurísticas, las cuales son estrategias inteligentes para diseñar o mejorar procedimientos heurísticos utilizando información del problema, las cuales han mostrado ser altamente eficaces y eficientes [1] [2] [3].

En esta tesis se propone resolver problemas de la física de materiales, específicamente la optimización de parámetros en la formación y el diseño de heteroestructuras semiconductoras y estructuras fotónicas. Para ello, se utilizan algoritmos de optimización metaheurísticos, en particular: Algoritmo Genético (AG) y Particle Swarm Optimization (PSO), para explorar de manera eficiente el espacio de búsqueda de las posibles configuraciones del sistema.

En el primer problema se estudia la formación de un Gas de Electrones en Dos Dimensiones (2DEG), el cuál consiste en resolver las ecuaciones de Schrödinger y Poisson de forma auto-consistente en el límite cuántico electrónico. Utilizando la función de onda de prueba de Fang-Howard modificada [4] para generar una población de individuos, el sistema permite incorporar el uso de las características de los algoritmos metaheurísticos formulando un problema en el que se requiere la minimización del valor esperado de la energía como función de los parámetros de la función de prueba. Se realiza un análisis comparativo de los resultados obtenidos por los algoritmos de optimización metaheurísticos.

El segundo problema consiste en encontrar el factor de calidad Q de una cavidad en un cristal fotónico (PCC por sus siglas en inglés) como una función de la estructura que rodea la cavidad. En el presente estudio se tiene el cristal fotónico formado por una red triangular de agujeros en una placa semiconductor. La cavidad se obtiene removiendo 3 agujeros a lo largo de la dirección $\Gamma - J$ de la red. El factor Q de la cavidad se modifica mediante el desplazamiento de los 3 agujeros más cercanos de la cavidad a lo largo de la misma dirección $\Gamma - J$. El valor de Q es calculado usando el método Finite Difference Time Domain (FDTD), siendo el objetivo para este caso encontrar el conjunto de valores de desplazamientos de cada agujero que maximice el valor de Q . Se realiza un análisis comparativo de los resultados obtenidos por los algoritmos de optimización metaheurísticos.

Abstract

Computation Science helps to solve complex problems through an efficient algorithm design. Actually, there are optimization problems with huge search spaces that can not be solved in polynomial time. In order to solve such complex problems, metaheuristics are used, which are intelligent strategies to improve heuristic procedures using information of the problem which turns out to be highly efficient.

In this thesis, optimization algorithms (genetic algorithms and particle swarm optimization) are used to solve two problems related to the design of semiconductor and photonic structures.

In the first problem, the formation of a 2DEG is studied, which consists on solving Schrödinger and Poisson equations in a self-consistent way within electronic quantum limit. Using the Fang-Howard test wave function, the system allows the incorporation of the rules of the algorithms to minimize the energy. A comparative analysis of the results obtained by the metaheuristics optimization algorithms is carried out.

The second problem is to find the quality factor Q in a cavity of a photonic crystal as a function of the structures in the neighborhood of the cavity, in the present work this modification is carried out by displacing 3 holes that limits the cavity along the $\Gamma - J$ orientation in the lattice, and the value of Q is calculated using the method Finite Difference Time Domain (FDTD). A comparative analysis of the results obtained by the metaheuristic optimization algorithms is carried out.

Capítulo 1

Introducción

Un problema de optimización consiste en buscar una configuración de un conjunto de variables tal que maximicen o minimicen una o varias funciones objetivo del problema [5]. El desarrollo de algoritmos de optimización para la solución de problemas complejos ha sido estudiado de manera exhaustiva, debido a la gran importancia que tienen en áreas como la toma de decisiones, electrónica, mecánica, ingeniería civil etc. [6] [7] [8].

En los últimos años se han desarrollado diferentes técnicas para la resolución de problemas complejos y con extensos campos de búsqueda, conocidas como técnicas metaheurísticas. Las técnicas metaheurísticas son procedimientos de búsqueda estocástica que no garantizan soluciones óptimas [9], pero que al abordar problemas de gran complejidad, en donde el desempeño de técnicas matemáticas es pobre debido a que no alcanzan a obtener soluciones viables en tiempos razonables (tiempo polinomial), permiten estudiar los problemas de una manera sencilla, explorando mejor los espacios de búsqueda eligiendo zonas prometedoras y obteniendo soluciones suficientemente buenas en tiempos razonables.

El gran auge del uso de las técnicas metaheurísticas para la optimización de problemas se debe a que:

- No se conoce una técnica matemática exacta que de solución a un problema.
- Existe una técnica que resuelve el problema pero computacionalmente su implementación es costosa(en tiempo y/o memoria).

En este trabajo de tesis se abordan problemas relacionados con el diseño de heteroestructuras semiconductoras y estructuras fotónicas. El diseño de estructuras con una funcionalidad específica es comúnmente un problema de gran complejidad computacional, por lo cuál el uso de metaheurísticas resulta una buena opción para atacar el problema. El primer problema se basa en encontrar el estado base de un gas de electrones en dos dimensiones (2DEG) que se forma en la interfaz de la heteroestructura AlGaAs/GaAs, el 2DEG es usado en diversos dispositivos electrónicos como los transistores MOSFET. El segundo problema consiste en maximizar el factor de calidad Q de una cavidad en un cristal fotónico. Ambos problemas son analizados y tratados mediante 2 técnicas metaheurísticas.

La primera de las técnicas metaheurísticas utilizadas es un Algoritmo Genético (AG), el cual se basa en la teoría neo-darwinista de la evolución, donde los individuos mejor adaptados sobreviven a través de las generaciones. Mediante el uso de operadores genéticos como *mutación*, *cruza* y *selección* se explora el espacio de búsqueda y se itera un número limitado de generaciones [10]. Al finalizar el algoritmo, el mejor individuo es seleccionado de la población y representa la configuración de variables que brinda la mejor solución encontrada que resuelve el problema.

La segunda metaheurística utilizada es Particle Swarm Optimization (PSO), basada en el mecanismo de toma de decisiones en ciertos organismos con base en su experiencia, posición actual y la influencia del entorno en donde se encuentra el individuo. La población de partículas dispuestas inicialmente aleatoriamente en el espacio de soluciones converge a zonas prometedoras de búsqueda a través de las iteraciones del algoritmo [11].

1.1. Planteamiento del problema

Una nanoestructura se define como un sistema físico en el cual la escala que lo caracteriza es del orden de los 10 nanómetros (nm). En particular, el empleo de estructuras semiconductoras permite el control y diseño de las propiedades ópticas y electrónicas de los materiales, las cuales tienen mayor impacto cuando se toman en cuenta los efectos cuánticos presentes debido a que las dimensiones de las estructuras son de orden nanométrico. Basados en el efecto cuántico en nanoestructuras se tiene que el espectro de emisión o de absorción está bien definido, esto permite diseñar emisores y detectores de luz que muestran una gran eficiencia [12].

El primer problema que se aborda es la formación del Gas de Electrones en Dos Dimensiones (2DEG), el cual se forma cuando se tiene una interfaz entre dos materiales con distinto *bandgap* o brecha de banda. Normalmente se tiene que para una interfaz en donde existen dos materiales semiconductores (uno de ellos lo llamaremos barrera y el otro canal), el material de barrera tiene una banda de conducción con un valor más alto de energía que la del material que forma el canal, y se tiene que el material barrera se encuentra dopado tipo *n*, es decir, tiene un exceso de electrones. Por otro lado, el material que forma el canal tiene una banda de conducción de una energía menor, y se busca que éste no se encuentre dopado, o sea, ligeramente tipo *p*, es decir, con una falta de electrones. Al tener la anterior interfaz, el exceso de electrones se mueve hacia la región que tiene deficiencia de estos, lo que ocasiona una redistribución de carga. Estos electrones en esencia están libres, formando lo que se llama un gas de electrones. Ahora bien, al moverse los electrones, estos dejan atrás a los átomos de los cuales se originaron y como estos átomos no se pueden mover generan una densidad de carga que provoca un potencial eléctrico. Este potencial eléctrico inducido es el que da origen a un potencial de confinamiento dentro del canal, lo cuál origina que el gas tenga niveles bien definidos en un potencial unidimensional. El hecho de que para conocer la función de onda de los electrones (Ecuación de Schrodinger) sea necesario conocer el potencial eléctrico que a su vez es función de la densidad de carga (Ecuación de Poisson) requiere que el problema tenga que ser resuelto de manera auto-consistente.

Esencialmente se requiere encontrar la configuración de parámetros de la función de onda ψ que minimice la energía del sistema, es decir queremos encontrar ψ del estado base o fundamental del sistema como se muestra en la ecuación (1.1).

$$\min E(\psi_k) \tag{1.1}$$

El segundo problema es encontrar el factor de calidad Q de una PCC, el cuál está relacionado con el número de ciclos que oscila un pulso de luz antes de escapar de la cavidad como muestra la ecuación (1.2). Una cavidad se caracteriza por un modo resonante en la misma, el cual tiene un valor definido de la frecuencia. De esta manera, un pulso dentro de la cavidad oscilará con la frecuencia del modo y se atenuará a medida que pasa el tiempo, el factor de calidad es inversamente proporcional al

tiempo en el cual la energía del modo decae e^{-1} del valor original en $t = 0$.

$$U(t) = U(0) * \exp\left(-\frac{\omega_0 * t}{Q}\right) \quad (1.2)$$

donde U es la energía almacenada, t es el tiempo y ω_0 es la frecuencia de la cavidad.

Un método muy popular para incrementar los valores de Q es el de modificar la estructura que rodea la cavidad, esto permite la modificación de los campos electromagnéticos dentro de la misma, buscando eliminar aquellas componentes que son susceptibles a escapar de la cavidad. En el presente trabajo modificaremos la estructura que rodea la cavidad desplazando los agujeros que la limitan a lo largo de la dirección $\Gamma - J$ de la red triangular y el valor de Q se obtendrá utilizando el método Finite Difference Time Domain (FDTD).

Mediante la implementación de los algoritmos AG y PSO se pretende encontrar la configuración de la estructura que minimice E en la formación del 2DEG y los desplazamientos de los agujeros que rodean la PCC que maximicen el factor Q .

1.2. Objetivos

Objetivo General

Desarrollar e implementar algoritmos metaheurísticos para optimizar el diseño y formación de nanoestructuras, tal que:

- Minimicen la energía total de la función de onda que representa el 2DEG en la interfaz de una heteroestructura semiconductor, y
- Maximicen el factor de calidad Q de una PCC en un cristal fotónico

Objetivos Específicos

1. Definir una función de energía para la formación de un Gas de Electrones en Dos Dimensiones (2DEG).
2. Definir una función para el diseño de una Photonic Crystal Cavity (PCC).
3. Desarrollar las técnicas metaheurísticas de la literatura:
 - a) Algoritmo Genético (AG).
 - b) Particle Swarm Optimization (PSO).
4. Realizar un estudio comparativo de las diferentes técnicas metaheurísticas en la resolución de problemas de formación y diseño de nanoestructuras.

1.3. Hipótesis

1. El uso de técnicas metaheurísticas permite modelar el comportamiento de un Gas de Electrones en Dos Dimensiones (2DEG) mediante el proceso de minimización de la energía total del sistema empleando funciones de pruebas parametrizadas.
2. El factor de calidad Q de una PCC puede ser maximizado mediante el uso de técnicas metaheurísticas que permitirán explorar de manera eficiente las modificaciones que se requieren hacer a la región que rodea la cavidad, en este caso el desplazamiento de los agujeros que delimitan la cavidad en el eje $\Gamma - J$.
3. Es posible seleccionar un esquema estratégico de optimización para cada uno de los problemas de esta tesis basados en el estudio comparativo de las técnicas de optimización.

1.4. Organización de la tesis

En el capítulo 2 de esta tesis se presenta el marco teórico sobre el que está sustentada la investigación. Se describen conceptos y fórmulas que se tratan a lo largo de los siguientes capítulos. Se definen las técnicas metaheurísticas: AG y PSO presentando los esquemas y teorías en las que se basan, variantes de cada algoritmo, y principales operadores. Además, se describe formalmente el concepto de heteroestructuras semiconductoras y cristales fotónicos junto con las teorías que sustentan su diseño. Se hace una revisión de la literatura actual acerca de los trabajos relacionados que se han realizado aplicando técnicas metaheurísticas a problemas de física de heteroestructuras semiconductoras y cristales fotónicos.

El capítulo 3 describe la metodología usada en la tesis para resolver los problemas que se presentan, así como las herramientas y procedimientos utilizados. Se describen los algoritmos utilizados y las funciones que se pretenden optimizar, tanto para encontrar el estado base del 2DEG así como maximizar el factor de calidad Q de una PCC.

En el capítulo 4 se presentan los resultados obtenidos a partir de la aplicación de los algoritmos metaheurísticos a los problemas de optimización de heteroestructuras y se realiza una comparación estadística.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

El capítulo 5 presenta conclusiones a partir de los resultados obtenidos en el capítulo 4 y el trabajo a futuro.

Capítulo 2

Estado del arte

2.1. Marco Teórico

2.1.1. Optimización

El concepto de optimización se puede definir como el análisis y resolución de problemas de decisión, donde se escoge una solución (mediante un criterio de selección) de entre un conjunto de soluciones posibles [13]. El objetivo es encontrar la mejor configuración posible de variables de una *Función Objetivo* o *Función de Aptitud* diseñada con el fin de cuantificar el desempeño y medir la calidad de las soluciones.

Si un aspecto adecuado de un problema puede ser aislado y caracterizado por un objetivo, la optimización puede proveer un marco de trabajo adecuado para su análisis [14].

Los problemas de optimización pueden definirse como maximizar o minimizar una función sujeta a restricciones de igualdad y desigualdad que limitan la selección de los valores que pueden tomar las variables de decisión. Una formulación matemática se observa en la ecuación (2.1).

$$\min/\max f(\vec{x}), \vec{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n] \quad (2.1)$$

sujeto a la ecuación (2.2):

$$\begin{aligned} g_i(\vec{x}) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, q \\ h_j(\vec{x}) &= 0, \quad j = q + 1, \dots, m \end{aligned} \tag{2.2}$$

El vector \vec{x} es la *variable de optimización*, y la función $f(\vec{x}) : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$ es la *función objetivo*.

La región factible de un problema es el conjunto de posibles soluciones que satisfacen todas las restricciones, y una solución del problema es factible si satisface todas las restricciones del mismo, además se considera óptima si proporciona el valor que favorece más a la función objetivo.

2.1.2. Algoritmos Genéticos

De acuerdo con la teoría de Darwin [15] la supervivencia de los individuos en una población se debe al principio de *selección natural* que favorece a las especies que estén mejor adaptadas al ambiente. Aquellos individuos que sean más aptos tienen una mayor probabilidad de reproducirse y multiplicarse. Otro aspecto importante que consideró Darwin para la evolución y diversidad de las especies es la *mutación* o pequeñas variaciones en el código genético que proporcionan ciertos cambios en las características físicas de un individuo.

Las leyes de herencia genética de Mendel [16] han aportado a la teoría de Darwin nuevos aspectos que la complementan con mecanismos relativos a la herencia de características de los individuos en la producción de descendencia, dando lugar al neodarwinismo. De acuerdo a la teoría anterior las características de los individuos o *fenotipo* son consecuencia de su información genética o *genotipo*, conformada por *genes* que son la unidad básica de estas cadenas de información.

El concepto de Algoritmos Evolutivos engloba una serie de técnicas inspiradas en la teoría Neo-Darwinista de la evolución y constituyen una categoría importante de técnicas de búsqueda heurística y optimización.

Este tipo de algoritmos combina estrategias de búsqueda aleatoria y dirigida que provienen de los mecanismos de selección de individuos más aptos en la naturaleza. Lo anterior les permite explorar ampliamente en el espacio de soluciones de una forma más eficiente que los métodos puramente aleatorios.

Los distintos algoritmos evolutivos tienen una serie de características comunes descritas por Araujo [17] :

- Se procesan varios individuos o soluciones simultáneamente. Al conjunto de estos individuos se les denomina *población*.
- Los individuos de la población se van modificando a través de las *generaciones* o iteraciones del algoritmo mediante *operadores genéticos*.
- Cada generación tiene un proceso de *selección* que da preferencia a los mejores individuos en la población de acuerdo al valor de su *función de aptitud*. El proceso de selección tiene que tener una componente aleatoria que permita

al algoritmo salir de óptimos locales y explorar distintas zonas del espacio de búsqueda.

Las técnicas más conocidas son el Algoritmo Genético (AG), estrategias evolutivas y programación evolutiva, siendo los AG los más estudiados y analizados.

Los AG fueron desarrollados por John Henry Holland en la Universidad de Michigan en la época de los 70s [18]. La idea original de Holland era abstraer los procesos de adaptación y evolución que tienen los organismos en la naturaleza y llevarlos al campo computacional realizando un estudio formal de los procesos anteriores.

Los principales elementos del esquema general de un algoritmo genético son: representación, función de aptitud, condiciones de terminación, mecanismo de selección, mecanismo de reproducción (o cruza), operador de mutación, y proceso de reemplazo.

Representación de Individuos

La representación que más se utiliza en los AG para codificar a los individuos de una población o soluciones es la representación binaria. Cada individuo es representado como una cadena binaria o también llamada *genotipo* de la forma $\langle g_1, g_2, \dots, g_n \rangle$ cuya decodificación representa un punto x o *fenotipo* en el espacio de búsqueda del problema, donde g_i es un *gen* que es la codificación binaria de una determinada característica o variable del individuo.

Se debe de buscar una codificación tal que cada punto del espacio de búsqueda esté representado por el mismo número de cadenas binarias, y tal que sea capaz de representar todos los puntos del espacio del problema [17].

Adaptabilidad

La evolución de la población está definida por la calidad de los individuos que compiten por incrementar su presencia en la población. Esta calidad es comúnmente llamada *adaptación* del individuo y representa que tan buena solución representa para el problema.

Condiciones de Terminación

Se necesita especificar ciertas condiciones en las que el algoritmo deje de evolucionar y presente la mejor solución encontrada hasta el momento. Se tienen varias opciones para lo anterior, siendo las más comunes:

- Número de generaciones determinado.
- Alcanzar una solución de una determinada calidad.
- Detectar poco cambio en la diversidad entre poblaciones por cierto número de generaciones.

Selección de Individuos

La selección aplica cierta presión a la población de una manera similar a la de selección natural encontrada en sistemas biológicos. Individuos con mejor adaptabilidad tienen una mejor probabilidad de pasar su información genética a la siguiente generación.

Este proceso se puede realizar de formas diferentes, entre las más importantes se encuentran las siguientes:

- Selección proporcional
- Selección mediante torneo
- Selección de estado uniforme

Selección Proporcional

Corresponde a grupo de esquemas originalmente propuestos por Holland [18] en los cuales los individuos son seleccionados con base en la contribución de aptitud respecto al total de la población.

Ruleta

Técnica propuesta por DeJong [19]. Algoritmo simple pero que presenta una complejidad de $O(n^2)$, además el individuo menos apto puede ser seleccionado múltiples veces. El algoritmo es el siguiente:

1. Calcular la suma de valores esperados de los n individuos T .
2. Generar un número aleatorio $r = rand[0,0, T]$.
3. Recorrer los individuos sumando los valores esperados hasta que la sumatoria sea igual o mayor a r .
4. El individuo que haga que la suma exceda o iguale r será el seleccionado.
5. Repetir desde 2.

La técnica puede presentar diferencias entre el valor esperado V_e de cada individuo y el verdadero número de copias obtenidas.

Selección por torneo

Técnica propuesta por Wetzel [20] que se basa en comparaciones directas en la adaptabilidad del individuo. Existen 2 versiones del método: la probabilística y la determinista.

El algoritmo de la versión determinista es el siguiente:

1. Seleccionar aleatoriamente 2 individuos de la población.
2. Comparar individuos en base a su aptitud.
3. El ganador del torneo es el individuo más apto y es seleccionado.
4. Se realiza el torneo de acuerdo al número de padres necesarios.

La versión probabilística cambia el algoritmo anterior en la selección del individuo ganador del torneo, en este caso se aplica $flip(p)$ donde p es una probabilidad escogida entre los rangos ($0,5 < p \leq 1$). La función aplicada para determinar al ganador reduce la presión de selección en el algoritmo permitiendo que los individuos menos aptos tengan oportunidad de ganar el torneo.

Selección por Estado Uniforme

Técnica propuesta por Whitley [21] usada en algoritmos genéticos no generacionales donde unos cuantos individuos son reemplazados en cada generación del algoritmo. Generalmente usados cuando los individuos de una población resuelven de manera cooperativa un problema.

El algoritmo es el siguiente:

- Seleccionar m individuos de la población inicial P donde $1 < m < P$.
- Efectuar operadores de cruce y mutación a los m individuos produciendo H hijos.
- Elegir a los u mejores hijos de H .
- Reemplazar a los u peores individuos de P por los u mejores individuos de H .

Cruza de Individuos

La cruce de individuos permite el intercambio de información entre soluciones de una manera similar a la que sucede en la reproducción sexual de organismos. Las técnicas de cruce básica suelen aplicarse a la representación binaria, sin embargo se pueden generalizar a alfabetos de cardinalidad mayor.

Cruza de un punto

Propuesta por Holland [18], y es uno de los métodos más simples de implementar. La técnica primero selecciona dos padres y un punto de cruce $p_i[0, n - 1]$. Dos descendientes son creados combinando a los padres en el punto de cruce.

Cruza en k -puntos

Generalización de la cruce en un punto donde primero se seleccionan dos padres, y después se generan aleatoriamente k puntos de cruce. Dos hijos son creados a partir de combinar los padres en los diferentes puntos de cruce [22].

Cruza Uniforme

Técnica propuesta originalmente por Ackley [23] que consiste de una cruce de n puntos, pero en la cuál los puntos de cruce no son fijados.

La cruce uniforme provee uniformidad al combinar ambos padres. Realiza esta operación intercambiando bits en los padres para ser incluidos en los hijos. Para saber de que padre escoger el bit, se escoge un número aleatorio r entre 0 y 1 que decide de donde tomarlo.

La cruce uniforme tiene un efecto disruptivo mayor al de la cruce en k -puntos y con el fin de evitarlo se escoge el valor de $r = 0,5$.

Random Respectful Crossover

Técnica que selecciona dos padres y dos hijos son generados basados en el vector de similitud $S_ab = (S_{1ab}, \dots, S_{nab})$ de tal manera que si dos genes en los padres ubicados en la misma posición son iguales, entonces el vector de similitud tendrá este mismo valor, en otro caso el vector tendrá un valor nulo para ese gen [24].

Después de haber creado el vector de similitud S_ab , dos hijos son creados a partir de los valores de similitud. Si S_ab contiene un gen con 0 o 1 entonces ambos hijos tendrán este valor, si en cambio se tiene un valor nulo, entonces un número aleatorio es creado, y si este número es $< 0,5$ entonces el valor de un hijo es activado en 1, en caso contrario es 0.

Mutación

La mutación es un operador genético que mantiene la diversidad en la población aplicando pequeños cambios en un individuo. La mutación ocurre durante el proceso evolutivo de acuerdo a una variable de probabilidad que regularmente es baja, ya que, si es asignada con un valor muy alto, el proceso de búsqueda se convertiría en algo completamente aleatorio.

Se considera como un operador secundario en algoritmos genéticos, siendo su uso menos frecuente que el de la cruce.

El proceso para mutar variables con representación en cadena binaria consiste en cambiar el valor de un gen en un individuo. La posición en el individuo es escogida de manera aleatoria.

2.1.3. Particle Swarm Optimization

Las ideas iniciales en la optimización por enjambre de partículas fueron propuestas por Kennedy y Eberhart [25]. En esta técnica un número de partículas o individuos son colocadas aleatoriamente en el espacio de búsqueda del problema, y cada uno de ellos evalúa la función objetivo respecto a su posición actual. Cada partícula determina su movimiento evaluando su historial de posiciones pasadas y la de otros miembros del enjambre. La siguiente iteración del algoritmo comienza cuando todas las partículas actualicen su posición. Eventualmente el enjambre evoluciona y converge en zonas prometedoras de soluciones al problema.

Cada individuo en el enjambre de partículas está compuesto por tres parámetros en D dimensiones, donde D es la dimensión del espacio de búsqueda. Éstos son la posición actual \vec{x}_i , la mejor posición previa \vec{p}_i y la velocidad \vec{v}_i .

La posición actual \vec{x}_i puede ser considerada como un conjunto de coordenadas que describen a un punto en el espacio. En cada iteración \vec{x}_i es evaluada como una solución al problema, y si es mejor que cualquier otra encontrada en el pasado de la partícula, entonces se actualiza \vec{p}_i . Las partículas se mueven añadiendo el vector \vec{v}_i a \vec{x}_i que puede ser visto como el tamaño de paso [26].

De acuerdo a Kennedy y Eberhart [25] dos tipos de información son importantes para calcular la nueva posición de cada partícula en una nueva iteración: la primera es el historial de posiciones pasadas, debido al conocimiento de el mejor estado que han evaluado, y la segunda tiene que ver con aspectos sociales, ya que cada partícula conoce la mejor evaluación de las partículas pertenecientes a su vecindario. Estos dos tipos de información corresponden a la transmisión cultural y de aprendizaje individual de Boyd y Richersons. Además, establecen que otro factor importante que afecta la decisión de una partícula corresponde a la posición actual del individuo.

En términos matemáticos Kennedy y Eberhart proponen un modelo mostrado en la ecuación (2.3) que calcula la tendencia del vector de velocidad \vec{v}_i de acuerdo a los aspectos anteriormente mencionados.

$$v_{id}(t) = w * v_{id}(t - 1) + \phi_p * (p_{id} - x_{id}(t - 1)) + \phi_g * (g_{id} - x_{id}(t - 1)) \quad (2.3)$$

y el cálculo de su nueva posición se describe en la ecuación (2.4).

$$x_{id}(t) = x_{id}(t - 1) + v_{id}(t) \quad (2.4)$$

donde:

- $v_{id}(t - 1)$ es la velocidad actual de la partícula.
- ϕ_p y ϕ_g son variables que ponderan la influencia personal y del vecindario respectivamente.
- $(p_{id} - x_{id}(t - 1))$ es el vector de la mejor posición personal.
- $(g_{id} - x_{id}(t - 1))$ es el vector de la mejor posición global.
- w es un coeficiente de inercia que define la atenuación en los cambios de velocidad.
- t representa la iteración actual del algoritmo.

2.1.4. Heteroestructuras semiconductoras y ópticas

En años recientes las nanoestructuras semiconductoras se han convertido en el sistema modelo de investigaciones sobre conducción eléctrica en escalas pequeñas [27]. El avance en técnicas de crecimiento cristalino ha hecho posible la creación de microestructuras semiconductoras, que son tan pequeñas que sus propiedades electrónicas y ópticas difieren sustancialmente de las presentadas en sus materiales en escalas mayores. En estas microestructuras los electrones son confinados en una o más direcciones siendo esencialmente libres en las restantes. Si en las direcciones que son confinados, su tamaño es mayor que la constante de red pero lo suficientemente pequeña, de manera que la función es cuantizada se forman estructuras que son llamadas mesoscópicas. Las estructuras más conocidas de este tipo son los llamados "pozos-cuánticos", donde los electrones son confinados a un potencial unidimensional.

En el problema que abordamos en esta tesis se requiere tener un conocimiento básico de los materiales que se van a emplear. Los materiales utilizados son semiconductores. Si bien existen varias propiedades que pueden servir para definir a un semiconductor, la principal que los caracteriza es la facilidad para el transporte de corriente cuando se aplica un campo eléctrico. Existen materiales en los que muy fácilmente se puede inducir una corriente eléctrica y se denominan metales, y están los opuestos, en los que muy difícilmente se puede generar una corriente y se denominan aislantes. Así, un semiconductor es un material que se encuentra entre estos dos extremos.

Si bien un semiconductor en estado puro es aislante, sus propiedades eléctricas pueden cambiar de manera dramática al agregar átomos ajenos al material que compone al semiconductor, proceso que se llama *dopaje*. El tipo de semiconductores que se emplean para la formación del 2DEG además de las propiedades eléctricas que mencionamos con anterioridad tienen la particularidad de formar una estructura cristalina. Dicha estructura cristalina le brinda propiedades que nos ayuda a entender como es que un electrón se mueve dentro del mismo.

En el régimen que se trabaja se tiene que la ecuación de Schrödinger es la formulación adecuada para describir el comportamiento de un electrón en un semiconductor. En esencia, para conocer todas las propiedades del electrón se requiere resolver la ecuación de Schrödinger. El problema radica en que para esto, es necesario conocer el potencial que actúa sobre el electrón y para determinarlo se tiene que conocer el efecto del potencial cristalino y el efecto de los demás electrones que están presentes en el material. Esto es en general un problema complejo que involucra muchos cuerpos.

Claramente se requiere hacer algunas simplificaciones.

La primera de ellas es ver como el potencial cristalino afecta el comportamiento del electrón en el semiconductor. Como mencionamos con anterioridad, la ecuación que gobierna el electrón es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, la cual puede escribirse como la ecuación (2.5).

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (2.5)$$

Si por un momento despreciamos los potenciales tendremos lo que se denomina un electrón libre, y su solución es simplemente una onda plana que se puede escribir como la ecuación (2.6).

$$\psi = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.6)$$

Aquí \vec{k} es el vector de propagación y A es una amplitud, de manera directa se tiene que la energía asociada es la energía de una partícula libre.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.7)$$

Esta expresión se reduce a la que normalmente conocemos como la ecuación (2.8)

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (2.8)$$

Lo que se puede aprender de lo anterior, es que la función de onda esta bien determinada si conocemos el valor de k y el valor de E , aunque en este caso es directo no siempre hay una relación simple entre la energía y el vector de propagación. De hecho, la relación entre la energía y el momento es lo que se llama relación de dispersión, la Figura 2.1 muestra la anterior relación.

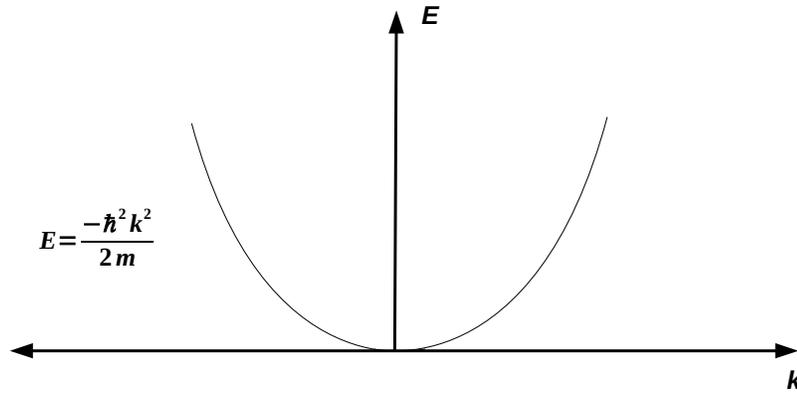


Figura 2.1: Relación entre el vector de propagación \vec{k} y su energía asociada E

Cuando se introduce el potencial cristalino, se tiene claro que esto va a afectar las soluciones que se tenían en el caso del electrón libre. Para el electrón libre, en principio, no hay ninguna restricción sobre los valores que puede tomar \vec{k} y por ende E , es decir: la única condición es que E y \vec{k} estén dados por la ecuación (2.7). Sin embargo, la presencia del cristal crea una restricción nueva y es que el sistema físico debe de ser invariante ante traslaciones propias del cristal. Esto hace que los valores de \vec{k} se encuentren restringidos de manera que al construir las soluciones con estas funciones tipo onda plana, se tenga que la función de onda es la misma al hacer la operación de traslación, salvo que puede tener una fase que a nivel de la función de onda no representa nada físicamente observable. Esta restricción sobre los posibles valores de \vec{k} es similar a lo que ocurre para una serie de Fourier.

Si tenemos que $f(t)$ es una función periódica de periodo T , Fourier nos dice que esta función se puede expandir como muestra la ecuación (2.9):

$$f(t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n * e^{i*\omega_n t} \quad (2.9)$$

Donde se tiene que:

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{T} \quad (2.10)$$

de esta manera no todas las frecuencia pueden entrar en la expansión sino solo aquellas que aseguran que la función sea periódica.

Con la anterior restricción aplicada a la ecuación de Schrödinger se tiene que la condición de periodicidad del cristal obliga a que no todos los valores de \vec{k} entren en la expansión, sino solo aquellos que sean compatibles con la periodicidad.

De esta manera tenemos que una función solución de la ecuación de Schrödinger se puede etiquetar con \vec{k} y E . Se puede probar incluso que las funciones soluciones del problema de un electrón en un cristal se pueden escribir en términos de las llamadas funciones de Bloch [28] [29]. En donde la función de onda del electrón se puede escribir como la ecuación (2.11).

$$\psi_{n\vec{k}} = u_{n\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.11)$$

Aquí $u_{n\vec{k}}$ es una función con la periodicidad del cristal. Por lo que tenemos que la solución es una onda plana, tipo partícula libre, modulada por una función con la periodicidad del cristal. Una consecuencia también del potencial periódico es que para ciertos valores de \vec{k} la relación de dispersión ya no es continua sino que aparecen saltos en la relación de dispersión, es decir hay valores de la energía para el cual no hay un valor de \vec{k} que corresponda a una solución del sistema.

2.1.5. Teoría de bandas

La forma que los físicos del estado solido describen los estados del sistema es mediante lo que llaman diagramas de bandas, que no es otra cosa que la relación de dispersión. Para un sistema de electrones libres se tiene que esta curva es una parábola, pero es mas común economizar espacio y se describe esto en lo que se llama zona reducida en donde cada rama se llama banda como es mostrado en la figura 2.2.

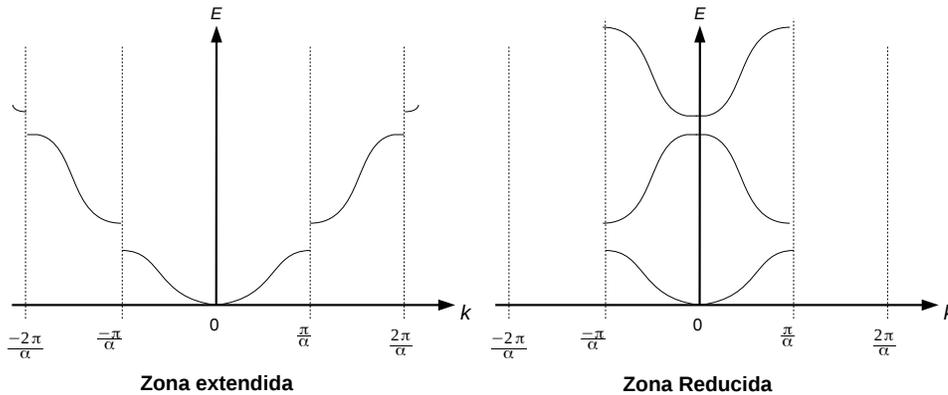


Figura 2.2: Diagrama de la relación de dispersión tanto en la zona extendida como en la zona reducida

Esta relación es la que se encuentra para un electrón en un potencial periódico unidimensional. Se puede observar que para $k = \pm\pi/\alpha$ se tiene la formación de regiones prohibidas en energía, es decir aparecen los *band gaps*. Al reescribir la relación de dispersión en la zona reducida da origen a lo que llamamos bandas.

Tal como ocurre con el análisis de Fourier no todos los valores de \vec{k} son apropiados, solo aquellos que son compatibles con las condiciones de periodicidad del cristal. De esta manera cada par de valores de \vec{k} y E permitidos dan un modo del sistema, es decir un estado físico posible, este número se duplica si se considera el espín del electrón.

Se tiene que para un cristal dado, existe una densidad de electrones que es característico de este cristal, y dado que el principio de exclusión de Pauli no me permite tener dos electrones con la misma función de onda, el estado de todos los electrones en el cristal debe de ser tal que cada electrón ocupe un solo estado, de esta manera es claro que si quiero formar el estado base, que es el estado con la menor energía posible, este estará constituido si se ocupan primero los niveles de menor energía. Así, en algún punto dado se tiene que ya todos los electrones están acomodados y la forma en la que los electrones mas energéticos se acomodan me dictan si el material es un aislante, un metal o un semi-metal.

Si el numero de electrones me establece que tengo una banda semi-llena entonces se

dice que se tienen materiales con las propiedades de un metal, si por otro lado hay un material en que se llena por completo una banda, entonces el material se comporta como un aislante.

Como ya mencionamos con anterioridad un semiconductor puro es un aislante por lo que se tiene que en principio que el material tiene acomodados a los electrones de manera que llenan una banda. A esta banda es la que llamamos como banda de valencia, la banda inmediata superior en la cual no hay estados ocupados se llama banda de conducción.

La banda inferior o banda de valencia se encuentra casi completamente llena de electrones y puede conducir a través del movimiento de los estados vacíos. Esta banda se origina de la banda de valencia de los estados de electrones que constituye las uniones covalentes manteniendo a los átomos unidos en un cristal. Los estados vacíos se comportan como burbujas en un fluido, por esta razón se le llaman *huecos* [30].

La banda superior o banda de conducción, en un semiconductor se encuentra con muy pocos electrones. Ésta representa los estados excitados que son ocupados por electrones promovidos de los enlaces covalentes en estados extendidos en el cuerpo del cristal. Dichos electrones son susceptibles a moverse mediante la aplicación de un campo eléctrico y contribuyen al flujo de corriente.

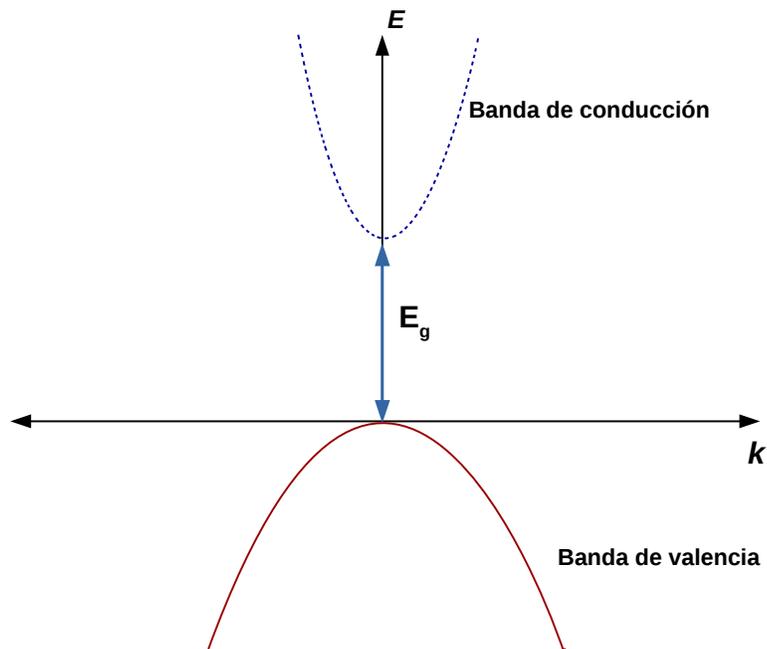


Figura 2.3: Bandas de conducción y valencia en un semiconductor

La diferencia entre ambas bandas es conocida como *brecha de bandas*, y se usa la notación E_{gap} para identificarla. La Figura 2.3 muestra la estructura de ambas bandas.

Gas de Electrones en 2 Dimensiones

El tipo de materiales que se emplean para hacer la interfaz en la cual se forma el 2DEG son los llamados semiconductores. En particular, la interfaz que empleamos en este trabajo es la formada por AlGaAs/GaAs en donde el AlGaAs tiene una región dopada tipo n y forma la barrera, en esta barrera usualmente se tiene una región sin dopar entre la región dopada y la región del GaAs que forma el canal y que tiende a tener un dopaje residual no intencional tipo p como la mostrada en la Figura 2.4.

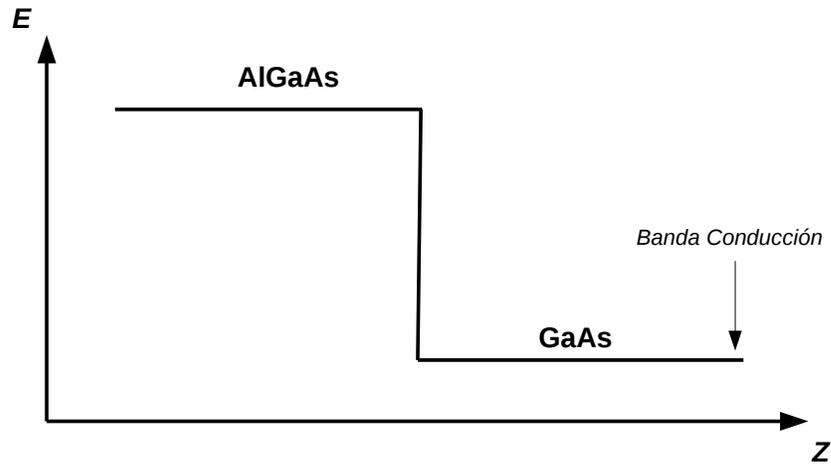


Figura 2.4: Heteroestructura AlGaAs/GaAs

Al formar esta estructura se tiene que el exceso de electrones de la parte dopada tipo n se mueve hacia la región dopada tipo p lo que hace que al dejar atrás los núcleos de donde provenían los electrones estos dejen cargada positivamente la barrera. Por otro lado, la región tipo p aceptará electrones y quedará cargada de manera negativa.

La transferencia de carga de la barrera al canal hace que surja un campo eléctrico que termina por equilibrar el flujo de electrones al canal. De este modo, el potencial en el canal sería la suma de la discontinuidad de las bandas de conducción y el potencial eléctrico; producto de la polarización. Precisamente, ambos potenciales son los que forman una barrera tipo pozo triangular, en el cual los electrones están confinados en una dimensión y libres en las otras dos lo que forma el llamado gas de electrones libres en dos dimensiones (2DEG por sus siglas en inglés) como se muestra en la Figura 2.5.

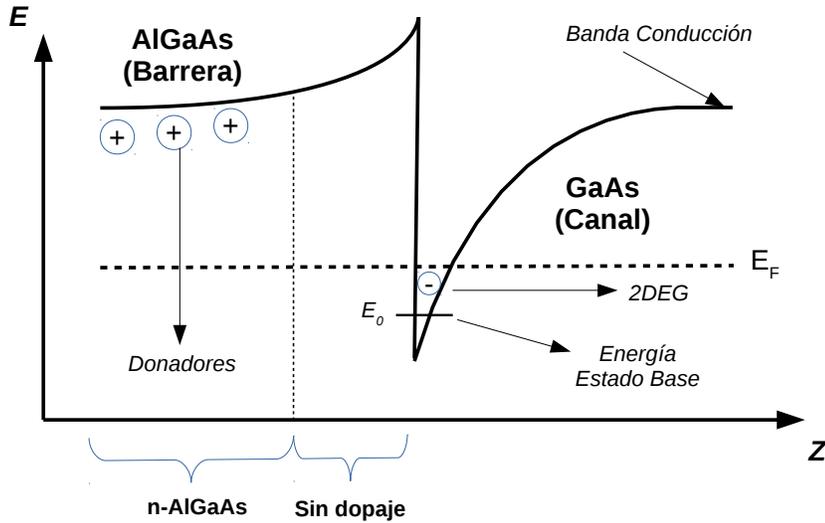


Figura 2.5: Interfaz formada por AlGaAs/GaAs

Aquí también denotamos la energía de Fermi (E_F) que coincide con el potencial químico en $T = 0$. Únicamente mencionaremos que la energía de Fermi separa los estados ocupados de los no ocupados y asumiremos que las condiciones de nuestro problema serán tales que únicamente el estado base estará por debajo de la energía de Fermi, y por lo tanto el único estado ocupado. Esta condición de que solo el estado base está ocupado es lo que se llama límite cuántico eléctrico.

Estos efectos de espacio-carga son representados como un potencial adicional en el Hamiltoniano de energía [30]. Éste potencial adicional se denota como V_ρ , que surge utilizando cualquier distribución de carga ρ , y se puede expresar utilizando la ecuación de Poisson (2.12).

$$\nabla^2 V_\rho = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (2.12)$$

En el contexto de una heterounión se puede reescribir la ecuación (2.12) convirtiéndose en la ecuación (2.13):

$$\frac{\delta^2 V_\rho}{\delta z^2} = \frac{4\pi e}{k(z)} \left[\sum_i n_i \psi_i^2(z) - N_D^+ + N_A^- \right] \quad (2.13)$$

donde n_i es la concentración de electrones en la sub-banda i , N_D^+ y N_A^- es la concentración de donadores y aceptadores ionizados respectivamente. Además $k(z)$ representa la constante dieléctrica en unidades cgs.

La adición de este potencial de energía resulta en la ecuación (2.14) modificando la ecuación de Schrödinger.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2 \psi}{\delta z^2} + [V(z) - V_\rho(z)]\psi = E\psi(z) \quad (2.14)$$

De esta manera, el problema consiste en resolver de manera auto-consistente las ecuaciones (2.13) y (2.14).

Cristales Fotónicos

El cristal fotónico es el análogo de un cristal, solo que aquí, el ente físico que se propaga es la luz. En un cristal fotónico los átomos o moléculas son reemplazados por medios macroscópicos con diferentes constantes dieléctricas, lo que crea en efecto una interacción con la luz que se propaga a manera de potencial eléctrico periódico que existe en un cristal. Si las constantes dieléctricas de los materiales en el cristal son suficientemente diferentes y la absorción de luz es mínima, entonces las refracciones y reflexiones de todas las interfaces pueden producir muchos fenómenos para los *fotones* que el potencial atómico produce para los electrones.

Probablemente el efecto más importante es que en algunos casos se puede formar lo que se llama *Gap Óptico*, es decir, una región en energía o equivalentemente en frecuencias para la cual un haz de luz no puede propagarse. También, al igual que en un cristal normal, un defecto en el mismo es capaz de localizar un modo, así, en un

crystal fotónico un defecto es capaz de sostener un modo, en este caso, sería capaz de confinar luz en la región donde se localiza el defecto.

Es posible diseñar cristales fotónicos con brechas de banda que limiten la propagación de luz en ciertas direcciones con ciertas frecuencias. Una vez teniendo este medio donde la luz no se puede propagar, se pueden manipular los fotones de una manera interesante. Por ejemplo; un defecto extendido, la remoción de una línea de agujeros en un cristal fotónico, formará una guía de onda, dentro de la cuál la luz no puede desviarse, y si por otro lado se tiene un defecto localizado se forma una cavidad o caja donde puede ser atrapada la luz. Lo anterior tiene muchas aplicaciones potenciales en computación y en el campo de comunicación óptica [31].

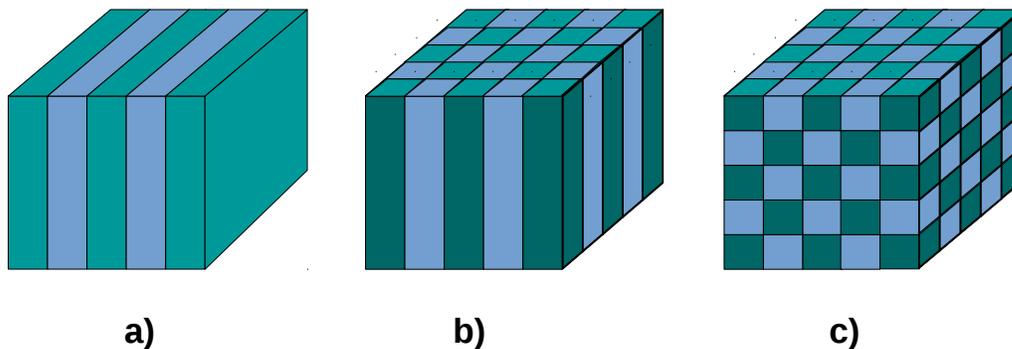


Figura 2.6: Tipos de cristales fotónicos según la periodicidad del material dieléctrico a través de uno o más ejes. Los diferentes colores representan diferentes materiales con diferente constante dieléctrica. a) 1 dimensión, b) 2 dimensiones, c) 3 dimensiones

Los cristales fotónicos como los mostrados en la Figura 2.6 son clasificados principalmente en tres categorías, éstas son unidimensionales (1D), bidimensionales (2D),

y tridimensionales (3D) de acuerdo a la dimensión de la pila. Los cristales fotónicos que trabajan en las regiones infrarrojas y microondas son relativamente fáciles de fabricar. Aquellos que trabajan en las regiones visibles, especialmente los 3D son difíciles de fabricar debido a que sus constantes de red, a la que se diseñan, son una fracción de la longitud de onda [32] [33].

Las pérdidas de radiación son un problema general en dispositivos ópticos. Una brecha de bandas fotónica completa prohíbe estas pérdidas, pero la dificultad en su fabricación ha despertado un interés en estructuras simples dieléctricas en dos dimensiones con una altura finita: placas de cristal fotónico. Éstas son estructuras dieléctricas que tienen solo periodicidad bidimensional y se confina la luz en una tercera dimensión. El mecanismo de confinamiento se llama *índice guía*, que es el principio en el que se fundamenta la fibra óptica que se usa actualmente. Se aprovecha la tendencia de la luz a quedarse dentro del material que tiene el mayor índice de refracción.

La ecuación (2.15) se refiere a las ecuaciones de Maxwell, y son un conjunto de 4 ecuaciones que describen completamente los fenómenos electromagnéticos incluida la propagación de la luz en un cristal fotónico [34].

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\
 \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\
 \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta t} &= 0 \\
 \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\delta \mathbf{D}}{\delta t} &= \mathbf{J}
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

donde \mathbf{E} y \mathbf{H} son los campos eléctricos y magnéticos macroscópicos, \mathbf{D} y \mathbf{B} son los desplazamientos y campos magnéticos de inducción, y ρ y \mathbf{J} son la densidad de carga y la carga libre.

La idea es usar diferencias finitas que permiten cambiar las derivadas que existen en estas ecuaciones por sumas y restas lo cual es mas fácil de trabajar. En esencia, este método consiste en emplear una configuración de campos en un tiempo dado y dejarlos evolucionar usando las ecuaciones (2.15). En el caso que estamos estudiando (una cavidad o defecto en un cristal fotónico), la estrategia es comenzar con un pulso gaussiano dentro de la cavidad y dejar que evolucione, después de que este

pulso cesa se monitorea la energía electromagnética como función del tiempo y se ajusta a una exponencial que decae, de allí se obtiene el factor de calidad de la misma. Se emplea para esto el software libre llamado MIT Electromagnetic Equation Propagation (MEEP) [35].

2.2. Trabajos Relacionados

Los Algoritmos Evolutivos son técnicas metaheurísticas globales de optimización que han sido ampliamente aplicados a numerosos problemas de complejidad elevada, particularmente en los campos de ingeniería y ciencia aplicada [36] [37].

Dentro del campo de la física de semiconductores se han utilizado algoritmos metaheurísticos bio-inspirados como Algoritmos Genéticos(AG) y Particle Swarm Optimization(PSO) en la construcción y análisis de dispositivos electrónicos.

Las técnicas de cálculo de estructuras electrónicas han hecho un progreso significativo en las últimas dos décadas, llegando al punto de utilizar paqueterías computacionales de química cuántica en el cálculo de moléculas de tamaño mediano que conforman dichas estructuras. Técnicas como Orbitales Moleculares en el método de Campo Autocoherente (SCF-MO por sus siglas en ingles) o de Excitación Doble Multi Referencia CI (MRD-CI por sus siglas en inglés) se han perfeccionado a través del tiempo, sin embargo, se limitan a usar conjuntos base de parámetros que el hardware disponible puede soportar. Se han hecho investigaciones sobre el diseño de conjuntos base óptimos, pero la tarea de encontrarlos para cada átomo en cada configuración química convierte la tarea en algo complicado.

Los datos obtenidos a partir de encontrar los estados fundamentales que la ecuación de Schrödinger (ES) predice para átomos y moléculas simples brinda información útil en el problema de diseñar conjuntos base para el cálculo de estructuras electrónicas.

Resolver la ES mediante métodos numéricos [38] [39] [40] es una tarea difícil, debido al uso de integración numérica o resolución de ecuaciones diferenciales complejas. Tratar la resolución de la ES como un problema de optimización y optar por el uso de metaheurísticas como estrategia, es una alternativa que se ha estado explorando en las últimas dos décadas.

Saha [41] propone una versión generalizada de un Algoritmo Genético simple que resuelve la ES para sistemas simples no triviales:

- Función de onda radial de átomo de hidrógeno en estados fundamentales y de excitación.
- Estados fundamentales y de excitación en un doble pozo de potencial simétrico.

- Estados fundamentales y de excitación de dos osciladores harmónicos acoplados.

Al obtener buenos resultados describe posibilidad de aplicación del algoritmo en sistemas más complejos.

Grigorenko [42] propone un nuevo método basado en un Algoritmo Genético que permite determinar eficientemente el estado fundamental de la ES independiente del tiempo para potenciales externos arbitrarios. Para lograrlo, se modificaron los operadores genéticos de cruce y mutación con el fin de tratar este tipo de problemas. El operador de cruce (llamado “uncertain crossover”) utiliza una función sigmoide $St(x)$ y su complemento $(1 - St(x))$ evitando el cálculo de derivadas grandes en las nuevas funciones de onda generadas como hijos mientras que el nuevo operador de mutación toma en cuenta las relaciones de incertidumbre sumando a la función de onda una función Gaussiana produciendo el nuevo individuo.

Posteriormente Grigorenko [43] aplica un algoritmo genético cuántico (QGA) para calcular funciones de onda de estado fundamental en sistemas de dos partículas en una y dos dimensiones. Se prueba el QGA determinando el estado fundamental exacto para sistemas de dos partículas que no interactúan en dos dimensiones aplicando diferentes potenciales externos además de encontrar el estado fundamental Hartree-Fock.

La aportación principal de los trabajos de Grigorenko son las modificaciones realizadas en el AG en la aplicación de sistemas mecánico-cuánticos debido a que los individuos de la población son funciones de onda y el principio de incertidumbre debe de ser tomado en cuenta al realizar los operadores genéticos.

Nakanishi [44] propone un nuevo modelo en la resolución de la ES basado en un algoritmo microgenético. Mientras que el operador genético de cruce se mantiene como en un AG convencional el operador de mutación es intrínsecamente eliminado y ha sido sustituido por una búsqueda aleatoria que opera reiniciando la población actual manteniendo al mejor individuo en cada generación cuando la diferencia en bits entre la cadena binaria del mejor individuo y las otras cadenas no sobrepasa un valor de umbral definido. El algoritmo microgenético requiere un menor tamaño de población (comúnmente 1/10 de la población para un AG genérico), lo cuál resulta en una convergencia más rápida.

Además Nakanishi utiliza un *método de evaluación en puntos aleatorios* (RPEM por

sus siglas en inglés) para definir la función de aptitud de cada individuo. Lo anterior establece que debido al uso de un conjunto de puntos aleatorios diferente para cada generación la función de aptitud de los individuos varía conforme avanza el algoritmo. En términos de evolución biológica se puede ver como una *fluctuación ambiental*. EL individuo que sobreviva a través de todas estas fluctuaciones será el que satisfaga la ES.

Por su parte Sahin en 2002 [45] estudia la aplicabilidad de un QGA basado en la minimización de energía a problemas en la construcción de nanoestructuras tratando de resolver auto-consistentemente la ES y Poisson en la formación de heteroestructuras.

Utiliza la versión modificada de funciones de onda de prueba Fang-Howard que permiten penetración en la región de barrera y obedece ciertas restricciones en la heteroestructura $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ para crear los individuos de la población y utilizan al igual que Grigorenko [42] [43] operadores de cruce y mutación que respetan la incertidumbre de las funciones de onda.

Años más tarde Sahin [46] realiza un estudio en el cual se calculan los niveles de energía de un pozo cuántico de N-electrones usando dos técnicas: Diagonalización de matrices y un QGA para obtener soluciones simultáneas a la ecuación de Schrödinger y Poisson en la aproximación Hartree. Se comparan los resultados demostrando la aplicabilidad del QGA a sistemas cuánticos de muchos electrones evaluando su efectividad. El proceso comienza con la inicialización la población de funciones de onda como individuos utilizando funciones gaussianas y se evalúa mediante una función inspirada en el factor de Boltzman donde se asigna menores valores de fitness a mayores valores de energía. Un aspecto importante es el operador de mutación cuya intensidad está en función de las iteraciones del algoritmo, donde en primeras etapas del algoritmo la mutación es más grande que en etapas finales. Se demuestra que las diferencias existentes entre ambos métodos de minimización de energía existen debido a las fluctuaciones estocásticas del AG pero que en aplicaciones prácticas son diferencias despreciables.

Para 2010 Deb [47] utiliza dos algoritmos evolutivos (PSO y AG) en la optimización de parámetros de una nanoestructura de tipo pozo cuántico ($Al_xGa_{1-x}As/GaAs$) que es utilizada durante la fabricación de nanodispositivos. Al comparar los resultados obtenidos de ambos algoritmos en términos de tiempo de procesamiento y calidad de resultados se concluye que el PSO obtiene resultados en un menor tiempo y de una calidad comparable a la obtenida en los resultados del AG.

La optimización de componentes fotónicos en la que las escalas que los caracterizan son de orden nanométrico es un verdadero reto computacional debido a que se necesita la resolución de las ecuaciones de Maxwell de manera rigurosa con herramientas numéricas computacionalmente intensivas como Finite-Difference-Time-Domain (FDTD) [48] y métodos de elemento finito [49].

Ejemplos de las estructuras anteriormente mencionadas son los cristales fotónicos y estructuras de guía de onda (waveguides) que son normalmente diseñados de acuerdo al comportamiento que se requiera y en función de los parámetros del dispositivo.

Se han realizado trabajos que utilizan las bondades de las metaheurísticas en la optimización de parámetros de las estructuras ópticas mencionadas anteriormente.

Jiang [50] utiliza un algoritmo microgenético con una población reducida de individuos como método global de optimización y el método FDTD bidimensional para un análisis riguroso del rendimiento de cristales fotónicos y estructuras de guía de onda. Además, en su investigación paraleliza el algoritmo mediante una interfaz popular de linux: Message-Passing Interface (MPI).

La estrategia del uso de un microgenético, al igual que Nakanishi [44] es tener una población pequeña de individuos que consecutivamente sea reemplazada (a excepción del mejor individuo) cuando no existan cambios significativos entre generaciones.

Shen [51] desarrolla un algoritmo genético para el diseño de un cristal fotónico de dos dimensiones (2D) en una superficie cuadrada con un máximo potencial de banda posible. Consideran que el cristal está formado por dos diferentes materiales con constantes dieléctricas y discretizan el espacio en muchos rectángulos cuadrados llamados píxeles, cada píxel puede ser rellenado con uno de los dos diferentes materiales (representados por valores binarios de 1 y 0). Las estructuras totales posibles incrementan exponencialmente dependiendo del número de píxeles y una búsqueda exhaustiva no es viable en estas situaciones, por lo tanto el uso de un algoritmo genético debido a su naturaleza exploratoria efectiva es atractivo de usar.

Kerrinckx [52] utiliza un AG en el diseño de fibras de cristal fotónico (PCF) con propiedades de dispersión definidas. El AG es combinado con un método de elemento finito para determinar el índice de propagación efectivo de los modos y la dispersión cromática de las estructuras. Cada individuo de la población está formado por dos cromosomas α, r que constituyen las variables del problema, donde α es el paso y r el radio del pozo. La función de evaluación utiliza las anteriores variables para

determinar la dispersión cromática en la estructura.

Por otra parte Mikki [53] utiliza un Algoritmo de Enjambre de partículas con propiedades cuánticas (QPSO) en la síntesis de arreglos de antenas lineales y para encontrar un modelo de circuito equivalente para una antena resonadora circular dieléctrica DRA que puede ser usado para predecir el factor de calidad Q .

El algoritmo QPSO permite a las partículas moverse bajo reglas de la mecánica cuántica, en vez de las reglas de movimiento Newtonianas. El algoritmo propuesto comienza proponiendo un pozo de potencial que se adecue al problema y se resuelve la ES para obtener la función de onda y la probabilidad de posición de la partícula, después se colapsa la función midiéndola para obtener la posición real de la partícula. Un aspecto notable, es la omisión de los aspectos personales y sociales de la actualización de las posiciones de partículas haciendo que solo se tenga que modificar un parámetro en el algoritmo que está relacionado directamente con la longitud del pozo cuántico.

Saghirzadeh [54] optimiza varios parámetros de un anillo resonador de cristal fotónico (PCRR) basado en un canal de filtro de caída (CDF) utilizando un PSO en conjunto con FDTD en una superficie cuadrada dieléctrica. Los individuos son inicializados aleatoriamente siendo el único parámetro de optimización la posición del centro de las barras de dispersión. Se hace una simulación de la propagación de la onda de luz usando FDTD mediante la técnica Yee-Cell para discretizar los campos en espacio y tiempo con cada individuo.

Otras aplicaciones en las que se han utilizado técnicas metaheurísticas en la optimización de estructuras ópticas han sido la mejora de desempeño en Buffers Ópticos [55] y el diseño y caracterización de amplificadores de fibra de vidrio fotónicos basado en silicio [56], entre otros.

Capítulo 3

Metodología

En este capítulo se describe la metodología utilizada, se establecen los modelos matemáticos que definen la función de aptitud para cada problema, la representación de los individuos y los mecanismos utilizados para el Algoritmo Genético y el Particle Swarm Optimization.

3.1. Modelado Sistema 2DEG

El proceso seguido en la resolución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger (2.14) y Poisson (2.13) se ilustra en la Figura 3.1.

El proceso se repite hasta que los valores de energía se estabilicen, en este punto la función de onda es simultáneamente solución a ambas ecuaciones.

Se utiliza la función de onda de prueba modificada Fang-Howard [4] [57] que permite penetrar en la región de barrera. Esta función se describe en la ecuación (3.1).

$$\psi_k(z) = \begin{cases} A * \exp(\frac{\alpha(z)}{2}) & z \leq 0 \\ B(z + z_0) * \exp(\frac{-\beta(z)}{2}) & z \geq 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Con valores aleatorios para $0 < \alpha < 1$ y $0 < \beta < 1$. Los parámetros de A y B son

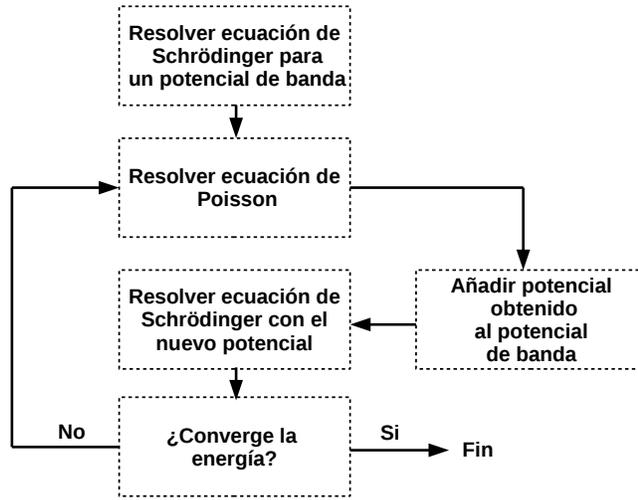


Figura 3.1: Diagrama de bloques ilustrando el proceso de solución autoconsistente

constantes de normalización que son obtenidas numéricamente a partir de la ecuación (3.2). Con lo anterior creamos funciones de onda normalizadas como individuos que satisfacen la resolución autoconsistente de las ecuaciones.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(z)\psi(z)dz = 1 \quad (3.2)$$

El problema consiste en minimizar la energía E de la ecuación (2.14) y que resuelva autoconsistentemente la ecuación de Schrödinger y Poisson, mediante la modificación de α y β utilizando las metaheurísticas: Algoritmo Genético y Particle Swarm Optimization.

3.2. Modelado Cristal Fotónico

El factor de calidad de una cavidad en un cristal fotónico está relacionado con el número de ciclos que oscila un pulso de luz antes de escapar de la cavidad. La relación se muestra en la ecuación (3.3).

$$U(t) = U(0)exp\left(-\frac{\omega_0 * t}{Q}\right) \quad (3.3)$$

Aquí, U representa la energía almacenada y ω es la frecuencia de la cavidad. Para incrementar el valor de Q se realizan desplazamientos en la posición de 3 pozos que rodean a la cavidad en la estructura y el factor Q se obtiene mediante el uso de la técnica FDTD.

La técnica *Finite Difference Time Domain* o FDTD es un análisis numérico que permite computar el campo electromagnético en un espacio discretizado donde las ecuaciones de Maxwell (2.15) son resueltas por diferencias finitas centrales, utilizando una *cuadrícula de Yee* [58] como la mostrada en la Figura 3.2.

El cálculo del factor Q se realiza generando un pulso dentro de la cavidad y un campo es generado a través del tiempo. Después de que el pulso se ha desvanecido los campos son monitorizados y la energía es calculada. De la atenuación de la energía en el tiempo el factor Q es calculado mediante el ajuste de una exponencial que decae respecto al tiempo.

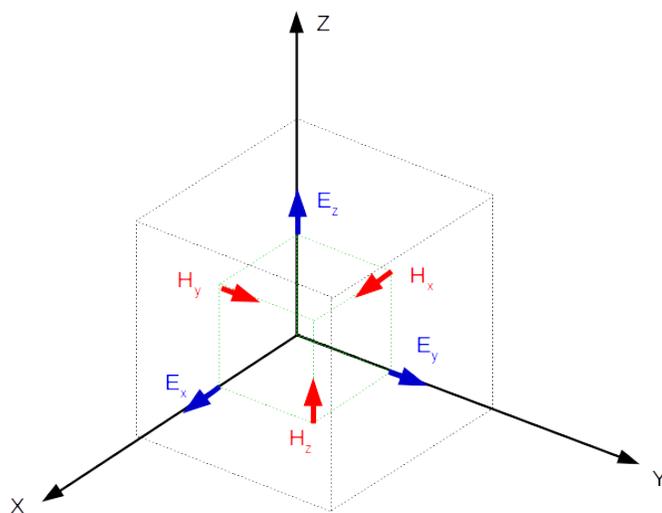


Figura 3.2: Cuadrícula de Yee utilizada en el método FDTD

El diseño de la cavidad que se estudia en esta tesis es la comúnmente utilizada *Cavidad L3* conformada por 3 agujeros faltantes que rodean la cavidad en la dirección $\Gamma - J$ como se muestra en la Figura 3.3.

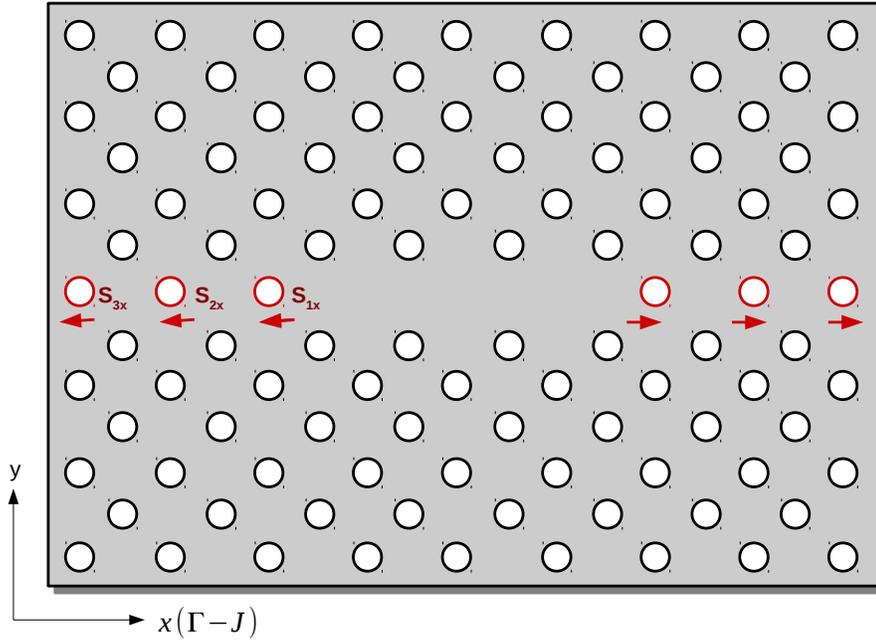


Figura 3.3: Diseño de una cavidad L3. En la maximización del factor Q se cambia la posición de 3 pozos que rodean a la cavidad en el eje $\Gamma - J$, se ha etiquetado a los desplazamientos como S_{1x} , S_{2x} , S_{3x} .

Se utilizó una configuración computacional de la red con las siguientes dimensiones: $[S_x, S_y, S_z] = [40, 30, 4]$ que representan las longitudes de los respectivos ejes de la red con un radio de los agujeros que rodean la cavidad de 0,25 y se ha trabajado en 3 dimensiones durante el cómputo de los campos magnéticos y eléctricos.

Se ha computado un mapa completo de factor de calidad Q en una zona relevante del espacio de soluciones que crean los movimientos de S_{1x} , S_{2x} , S_{3x} y se muestra en la Figura 3.4. El mapa se encuentra dividido en 6 paneles que grafican el valor de Q como función de S_{2x} y S_{3x} , mientras que el valor de S_{1x} incrementa en saltos de 0,05 desde $-0,1$ hasta 0,3. Técnicamente estas gráficas proveen una optimización global de la cavidad L3, pero considerando una metodología de búsqueda por fuerza bruta. Dado que el cálculo del factor Q mediante el uso de FDTD utilizando MEEP como plataforma es de aproximadamente 1 hora con 15 minutos, el evaluar todo el espacio de soluciones con esta técnica lleva al cabo de 1 mes en terminar. Evidentemente es necesario el uso de estrategias metaheurísticas como optimizadoras globales para

este tipo de problemas.

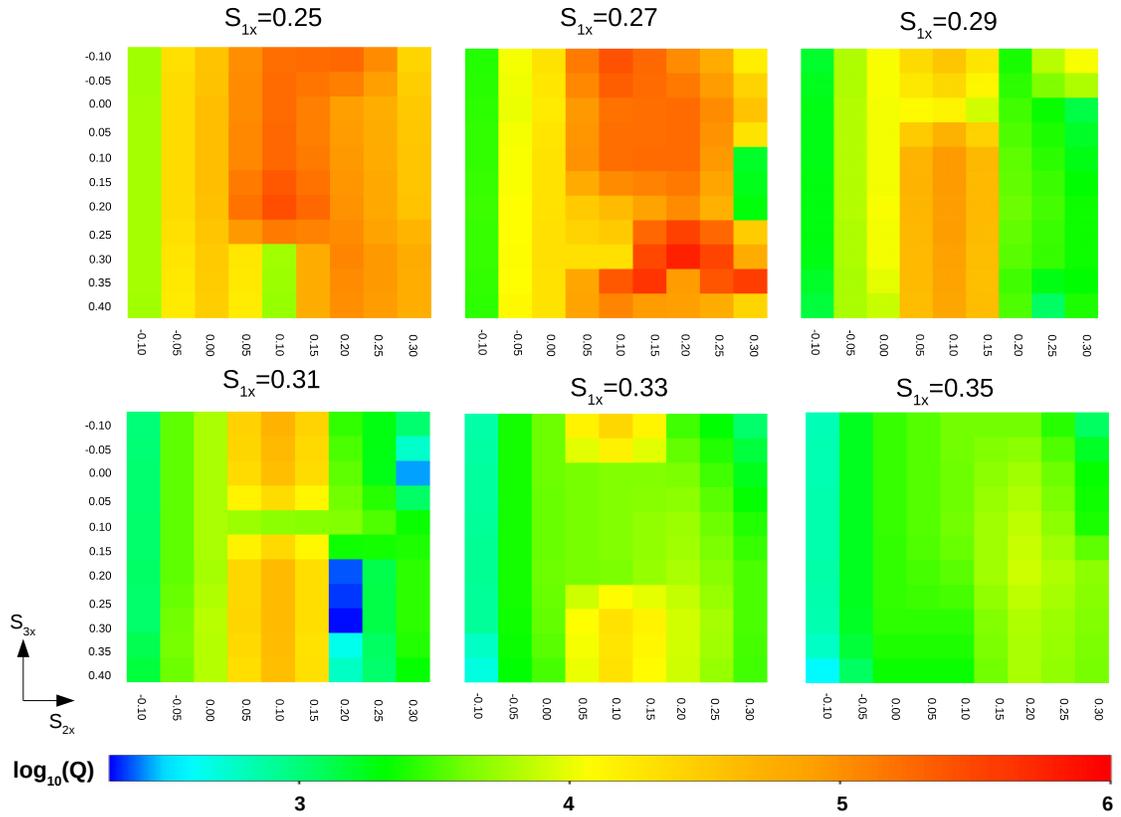


Figura 3.4: Gráfica de los valores de Q para diferentes S_{1x} , S_{2x} , y S_{3x} computados mediante el uso de FDTD.

3.3. Algoritmo Genético

3.3.1. Representación de individuos en problema de formación de un 2DEG

Mediante la función de onda de prueba modificada Fang-Howard (3.1) se crea una población inicial (P) de n individuos con valores de α y β generados aleatoriamente. Dicha población es normalizada utilizando la ecuación (3.2). Cada individuo se re-

presenta como una cadena binaria y la longitud de la cadena para cada variable (L_c) depende de la precisión (p) requerida en las variables de los individuos y su rango o dominio $[l_i, l_s]$, donde l_i es el límite inferior del valor que puede asignarse y l_s es el límite superior. La ecuación (3.4) obtiene los bits necesarios para representar los posibles valores de cada variable de optimización (α y β).

$$L_c = \log_2((l_s - l_i) * 10^p) \quad (3.4)$$

Las cadenas binarias se concatenan para formar un individuo de la población.

3.3.2. Representación de individuos en problema de formación de un Cristal Fotónico

Los desplazamientos de los agujeros (S_{1x}, S_{2x}, S_{3x}) que rodean a la PCC representan los individuos de la población en el AG, y cada desplazamiento es una variable de optimización. Se determina la longitud necesaria de cada variable para ser representada por una cadena binaria mediante la ecuación (3.4). La concatenación de las cadenas individuales de las variables forma la cadena representativa del individuo. Los valores iniciales de cada variable son generados aleatoriamente en un rango de $[-0,50, 0,5]$ con un espacio discretizado con saltos de 0,05 entre cada valor posible.

3.3.3. Operador de Selección

En el problema de formación de un 2DEG se evalúa la función de aptitud representada por la ecuación (2.14) que representa la energía del sistema E . El objetivo en este problema es de minimización: a menores valores de energía el individuo es mejor solución.

La evaluación en el problema de formación de un cristal fotónico utiliza la ecuación (3.3) para determinar el valor del factor de calidad Q . Se utiliza un script llamado MIT Electromagnetic Equation Propagation (MEEP) que resuelve las ecuaciones de Maxwell (2.15) utilizando el método FDTD. El objetivo es el de maximizar Q , por

lo tanto a mayores valores de la función el individuo representa una mejor solución al problema.

El AG utilizado presenta la propiedad de *elitismo*, por lo que la información del mejor individuo evaluado es almacenada en una variable denotada por b , que después es introducida a la nueva población creada. Se emplea el método de *selección por torneo* el cuál funciona seleccionando aleatoriamente m individuos pertenecientes al conjunto P , y el individuo que tenga el mejor valor de aptitud F es seleccionado para reproducirse y se agrega al conjunto G que representa a los padres seleccionados. Este torneo se realiza el número de veces necesarias hasta obtener S (cardinalidad de individuos iniciales en P) padres. El proceso de selección se muestra en la Figura 3.5.

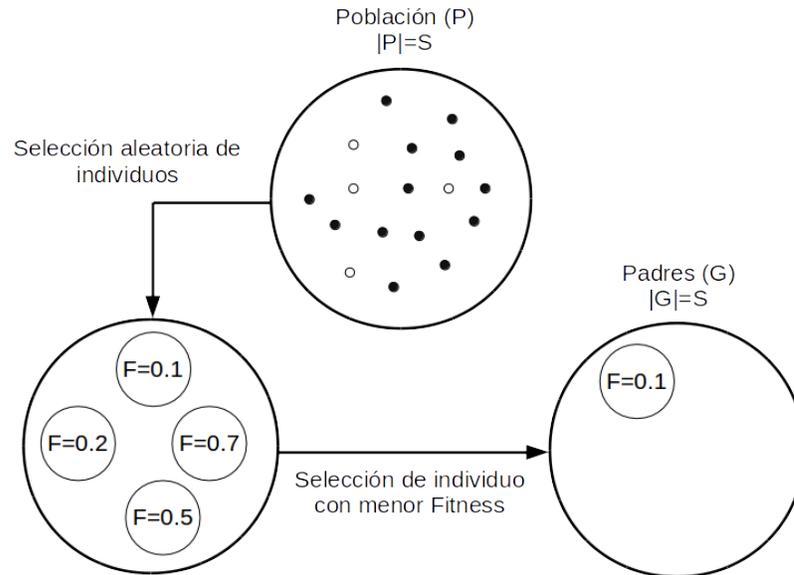


Figura 3.5: Selección por torneo en el AG

3.3.4. Operador de Cruza

Dos padres (p_1, p_2) son seleccionados a partir del conjunto G y son eliminados de este. El operador de *cruza* es aplicado en ambos padres si el valor de r_c es menor a P_c , donde $[0 < r_c < 1]$ es un número real aleatorio y $[0 < P_c < 1]$ es el *factor de cruza* y representa una probabilidad (normalmente alta) de reproducción. Con lo anterior se crean dos hijos (h_1, h_2) a partir de los padres seleccionados. En caso de que r_c sea mayor a P_c la cruza no se aplica y los hijos generados son copias exactas de los padres ($[h_1 = p_1, h_2 = p_2]$).

Se utiliza la cruza en un punto, donde x_c representa un punto en la cadena binaria seleccionado aleatoriamente, y se producen dos hijos como se muestra en la Figura 3.6.

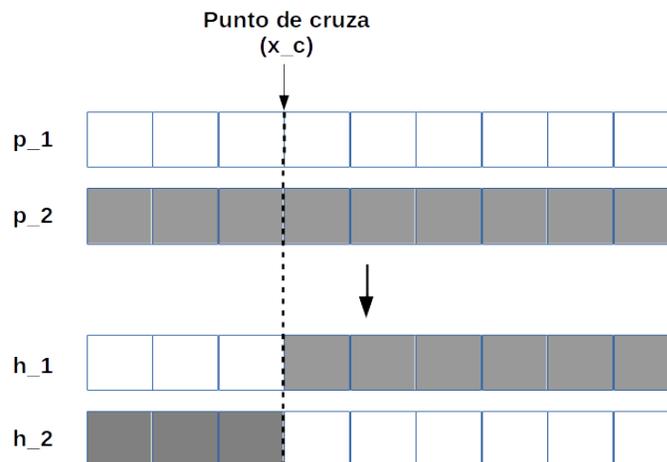


Figura 3.6: Cruza en un punto en el AG

3.3.5. Operador de Mutación

Con el fin de tener una mejor capacidad de exploración en el espacio de soluciones, los algoritmos genéticos utilizan el operador de *mutación* que modifica aleatoriamente los genes (bits) de los individuos. Se tiene una probabilidad de mutación (P_m) generalmente baja que, en caso de ocurrir cambia el valor de un gen de un individuo como se muestra en la Figura 3.7.

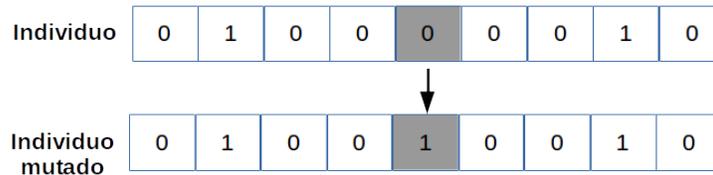


Figura 3.7: Mutación de una cadena binaria en el Algoritmo Genético

Una nueva población $P^{(i+1)}$ se genera después de aplicar los operadores genéticos anteriores y sustituye completamente la generación anterior P . La información almacenada en b se introduce en esta nueva población reemplazando al individuo con menor aptitud conservando de esta manera el elitismo de la población. El mejor individuo evaluado en esta nueva población es usado para calcular el potencial V_H de la ecuación de Poisson, y la energía E obtenida es incluida a la ecuación de Schrödinger en la siguiente generación del algoritmo. La Tabla 3.1 presenta al AG y a las

operaciones descritas anteriormente.

Algoritmo 1 Genetic Algorithm

```
1: procedure GA( $n$ )
2:   Generar aleatoriamente  $P = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ 
3:   while  $i \leq I$  do
4:      $F = \text{Evaluar}(P)$ 
5:      $b = \text{Best}(F)$ 
6:      $G = \text{Torneo}(F)$ 
7:      $P^{(i+1)} = \text{CruzaUniforme}(G)$ 
8:      $P^{(i+1)} = \text{MutaUniforme}(P^{(i+1)})$ 
9:     Añadir  $b$  a  $P^{(i+1)}$ 
10:    Reemplazar  $P = P^{(i+1)}$ 
11:   end while
12: end procedure
```

Tabla 3.1: Algoritmo Genético utilizado en la tesis

3.4. Algoritmo Particle Swarm Optimization (PSO)

3.4.1. Representación de individuos

Una población inicial (P) de partículas (x_i) es generada aleatoriamente dentro del espacio de soluciones factibles del problema. Velocidades iniciales (v_i) aleatorias son generadas para cada partícula. La posición de cada partícula representa una solución al problema (α y β de la función Fang-Howard para el 2DEG y los desplazamientos $[\delta_1, \delta_2, \delta_3]$ en el cristal fotónico).

Se evalúa cada partícula mediante la ecuación (3.3) para la maximización de Q o la ecuación (2.14) en la minimización de E y se actualiza la mejor posición personal p_i (la mejor solución de la partícula hasta ese momento) de cada individuo.

Los vecindarios $[V_1, V_2, \dots, V_j]$ de cada partícula se consideran en esta tesis como la población total de individuos, por lo que sólo existe un vecindario compartido para las partículas (V_T). Se busca el mejor individuo del vecindario V_T y se actualiza la variable que representa al mejor individuo del vecindario g_i con la información de evaluación de función y valores de variables del individuo encontrado.

Con lo anterior se crea una población inicial de n individuos con su respectivo valor de función, velocidad y mejores posiciones personales y globales como se muestra en la Tabla 3.2.

Var_1	Var_2	Evaluación	bp	bg
0.3456	0.124	2500	2500	1200
0.6426	0.614	1200	1200	1200
0.1456	0.524	1500	1500	1200
0.2456	0.324	1600	1600	1200

Tabla 3.2: Ejemplo de población inicial en el algoritmo PSO

Cada partícula x_i puede representarse en el espacio de soluciones como se muestra en la figura 3.8.

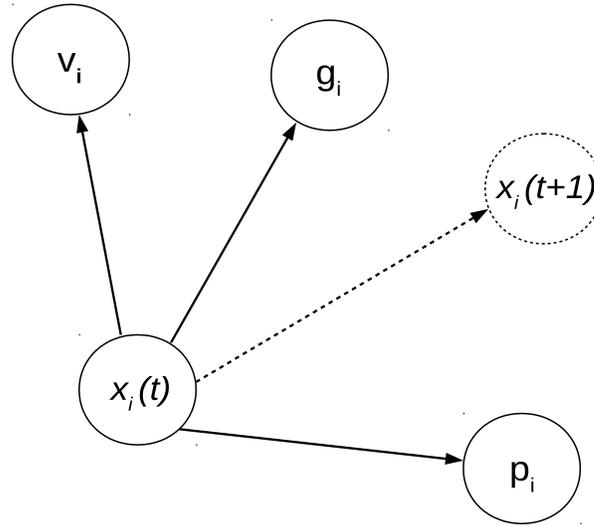


Figura 3.8: Representación de una partícula en el espacio y su desplazamiento en función de su velocidad (v_i), mejor posición personal (p_i) y mejor posición global (g_i)

3.4.2. Actualización de Partículas

La siguiente operación consiste en actualizar la velocidad de cada variable que compone cada partícula utilizando la ecuación (3.5).

$$v_{id}(t) = w * v_{id}(t - 1) + \phi_p * (p_{id} - x_{id}(t - 1)) + \phi_g * (g_{id} - x_{id}(t - 1)) \quad (3.5)$$

Donde $v_{id}(t)$ es la velocidad de la partícula i en su variable d en la generación t , $x_{id}(t)$ es la posición o valor de la variable d de la partícula i en la generación t . Las variables p_{id} y g_{id} son las mejores posiciones personales y globales de las variables en cada partícula respectivamente y tanto ϕ_p como ϕ_g son variables que ponderan la importancia de cada factor (personal o global) en la ecuación.

El coeficiente de inercia w se utiliza para atenuar los cambios de velocidad en las partículas dependiendo de la etapa del algoritmo. En etapas tempranas el operador permite modificaciones grandes, mientras que en etapas finales solo permite cambios

tenues en el movimiento de las partículas. Lo anterior permite una naturaleza exploratoria al inicio del algoritmo y al final, cuando se encuentre en una zona prometedora de buenas soluciones, permite realizar una búsqueda más detallada en el espacio. La ecuación (3.6) define como se calcula el coeficiente de inercia w en función de las generaciones del algoritmo.

$$w = (w_{max} - w_{min}) * \left(\frac{k_{max} - k}{k_{max}}\right) + w_{min} \quad (3.6)$$

Las variables w_{max} y w_{min} son valores arbitrarios que representan los límites máximo y mínimo que puede tomar el coeficiente de inercia y las variables k_{max} y k son las generaciones máximas y generación actual del PSO.

La nueva posición de la partícula se calcula mediante la ecuación (3.7):

$$x_{id}(t) = x_{id}(t - 1) + v_{id}(t) \quad (3.7)$$

Con lo anterior la posición de las partículas iniciales evoluciona a través de las generaciones influenciadas por su mejor posición en su historial y la mejor partícula en el vecindario, creando una convergencia en regiones que brindan buenas soluciones al finalizar el algoritmo, como se muestra en la Figura 3.9.

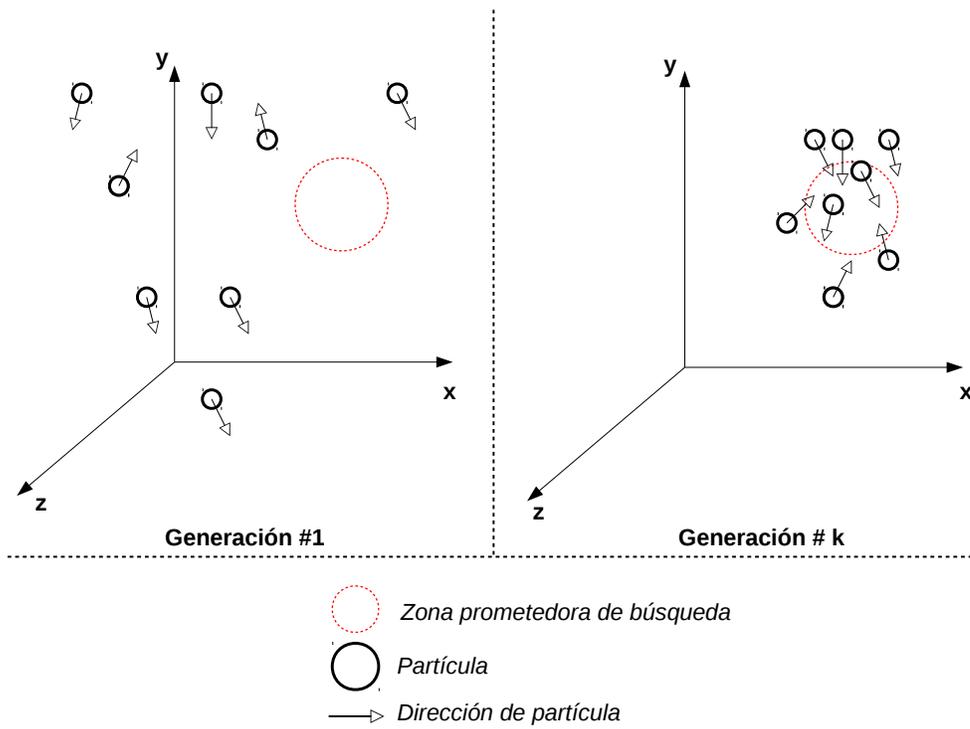


Figura 3.9: Evolución de población a través de las generaciones en PSO

La Tabla 3.3 describe el funcionamiento del PSO según lo descrito en esta sección.

Algoritmo 2 Algoritmo Particle Swarm Optimization

```

1: procedure PSO( $n$ )
2:   Inicializar  $\phi_1, \phi_2$ 
3:   while  $k \leq k_{max}$  do
4:     for  $i = 1$  To  $n$  do
5:       if  $F(\vec{x}_i) \leq F(\vec{p}_i)$  then                                ▷ Actualiza mejor personal
6:          $\vec{p}_i = \vec{x}_i$ 
7:       end if
8:     end for
9:     for  $j = 1$  To índices de vecindarios do                                ▷ Sólo un vecindario
10:      for  $i = 1$  To  $n$  do
11:        if  $F(\vec{x}_i) \leq F(\vec{g}_j)$  then
12:           $\vec{g}_j = \vec{x}_i$                                             ▷ Actualiza mejor global
13:        end if
14:      end for
15:    end for
16:    for  $d = 1$  To variables de individuo do                                ▷ Actualiza velocidad y posición
17:       $v_{id}(t) = w * v_{id}(t - 1) + \phi_1 * (p_{id} - x_{id}(t - 1)) + \phi_2 * (g_{id} - x_{id}(t - 1))$ 
18:       $x_{id}(t) = x_{id}(t - 1) + v_{id}(t)$ 
19:    end for
20:  end while
21: end procedure

```

Tabla 3.3: Algoritmo Particle Swarm Optimization utilizado en la tesis

Capítulo 4

Resultados

4.1. Sistema 2DEG

Los parámetros que se emplean en la simulación corresponden a la heterounión Al-GaAs/GaAs donde la concentración de aluminio es 30%, el resto de los valores requeridos se pueden consultar en la literatura [59].

Los algoritmos han sido implementados en un sistema operativo Linux en la plataforma Octave con licencia GNU en una máquina con un procesador intel CORE i7 con 4 GB de RAM.

4.1.1. Algoritmo Genético

Se utilizó un AG simple con mecanismo de *selección* por torneo, *cruza* en 1 punto y *mutación* uniforme. Además se utiliza *elitismo* para que el individuo con mejor valor de adaptación pase a la siguiente generación. La configuración del AG utilizada en las simulaciones realizadas se muestran en la Tabla 4.1.

Parámetro	Valor
Simulaciones	100
Generaciones	100
Población	100
Probabilidad de cruza	0.7
Probabilidad de mutación	0.01

Tabla 4.1: Parámetros del AG en sistema 2DEG

Los resultados estadísticos obtenidos de aplicar el AG en la minimización de energía de un sistema 2DEG para un total de 100 simulaciones se ven resumidos en la Tabla 4.2.

Parámetro	Valor
Energía media μ	0,03933476 eV
Desviación estándar de energía σ	0,00060395 eV
Energía mínima	0,0391973 eV
$[\alpha, \beta]$	[0,131347, 0,03768]
Energía máxima	0,04097105 eV
Convergencia promedio	24.4 iteraciones

Tabla 4.2: Resultados estadísticos obtenidos de la aplicación de un AG en la minimización de energía E en un sistema 2DEG

En la Figura 4.1 se presenta la gráfica de distribución de energía obtenida en las 100 simulaciones.

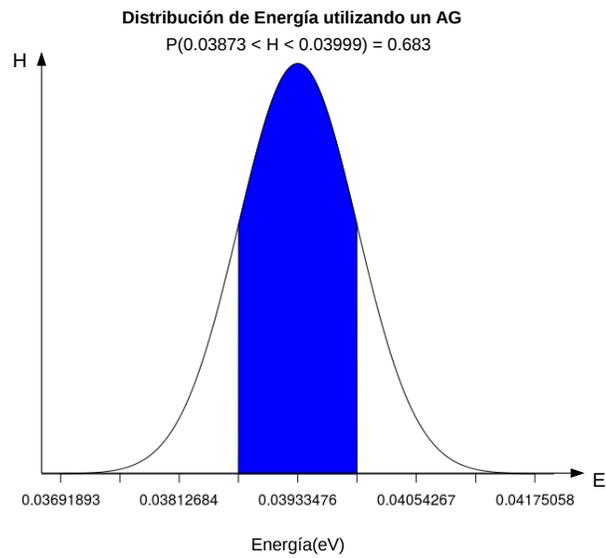


Figura 4.1: Distribución de energía en las simulaciones del AG

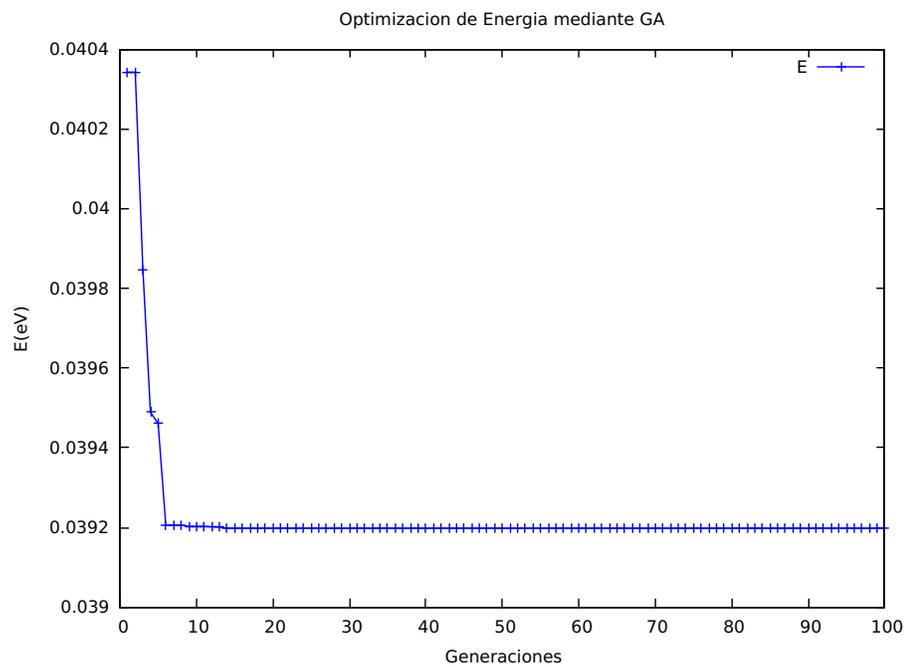


Figura 4.2: Convergencia del valor de energía en el AG

La Figura 4.2 muestra la simulación que obtuvo mejores resultados de minimización de energía. A través de las generaciones del AG se minimiza la energía alcanzando un valor de $0,0391973 \text{ eV}$ con los valores de $0,131347$ y $0,03768$ para las variables de α y β respectivamente, en un proceso que en promedio requiere 24.4 iteraciones.

4.1.2. Particle Swarm Optimization

Se utiliza un algoritmo PSO con coeficientes de ponderación iguales para los vectores de mejor posición personal (ϕ_1) y mejor posición en el vecindario (ϕ_2). El vecindario es tomado como el total de la población y se utiliza un coeficiente de vector de inercia que varía dependiendo de la etapa del algoritmo. Los parámetros utilizados se muestran en la Tabla 4.3.

Parámetro	Valor
Simulaciones	100
Generaciones	100
Población	100
ϕ_1	1,5
ϕ_2	1,5
ω_{max}	0,9
ω_{min}	0,3

Tabla 4.3: Parámetros del PSO en el sistema 2DEG

Los resultados estadísticos obtenidos de aplicar el PSO en la minimización de energía de un sistema 2DEG en 100 simulaciones se ven resumidos en la Tabla 4.4

Parámetro	Valor
Energía media μ	$0,03927eV$
Desviación estándar σ	$0,00075eV$
Energía mínima	$0,03919eV$
$[\alpha, \beta]$	$[0,131328, 0,03769]$
Energía máxima	$0,0467eV$
Convergencia promedio	17,6 iteraciones

Tabla 4.4: Parámetros PSO en sistema 2DEG

En la Figura 4.3 se presenta la gráfica de distribución de la energía obtenida en las 100 simulaciones.

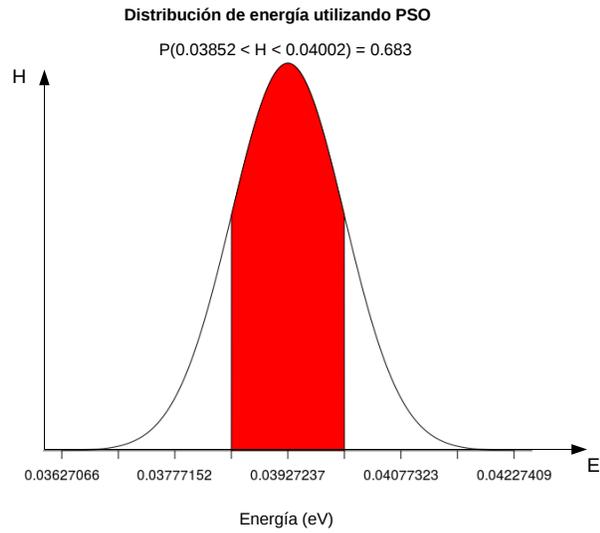


Figura 4.3: Distribución de energía en las simulaciones del PSO

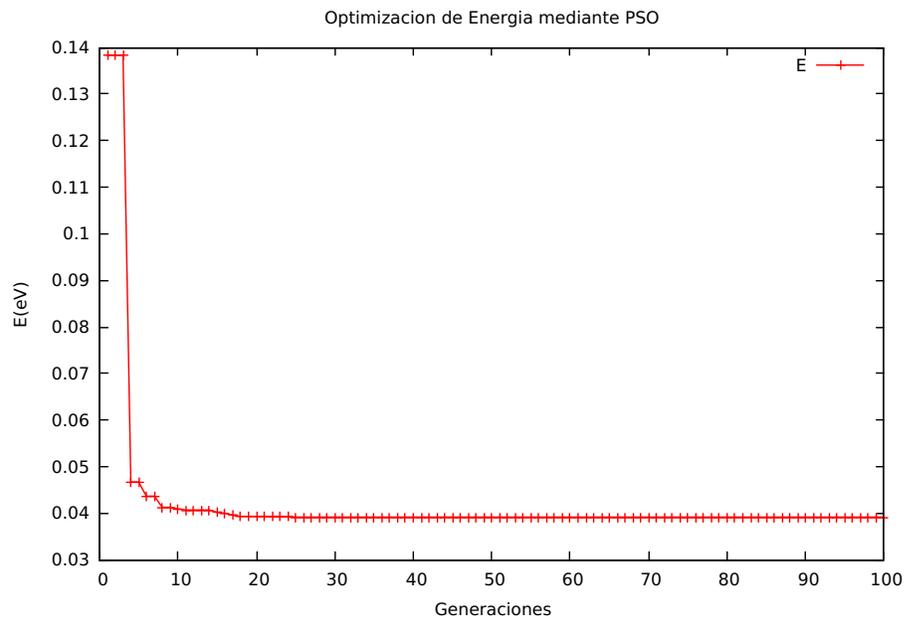


Figura 4.4: Convergencia del valor de energía en el PSO

En la Figura 4.4 se muestra la simulación que obtuvo mejores resultados. Se observa la minimización de energía a través de las generaciones del algoritmo PSO logrando un valor de energía de $0,03919 \text{ mV}$ con los valores de $0,131328$ y $0,03769$ para las variables de α y β respectivamente de la función de prueba utilizada en el sistema, con un promedio de 17.6 iteraciones.

4.1.3. Análisis de resultados

En la Tabla 4.5 se muestra una comparativa del rendimiento de ambos algoritmos:

Parámetro	PSO	AG
Energía media μ	0.03927	0.03933
Desviación estándar σ	0,00075	0,00060
Energía mínima	0,03919	0,03919
Energía máxima	0,0467	0,0409
Convergencia promedio	17.6 iteraciones	24.4 iteraciones

Tabla 4.5: Contraste de Resultados AG y PSO en el problema de formación de 2DEG

Se aprecia en que el PSO tiene una convergencia promedio mejor que la obtenida por las simulaciones realizadas con el AG, mientras que la desviación estándar (σ) resultante de las simulaciones es mejor en el AG, no obstante, ambos algoritmos han obtenido una energía mínima similar, diferencias que son despreciables en la construcción. Un aspecto a resaltar es que a pesar de ser ambos algoritmos de naturaleza estocástica debido a los operadores utilizados y a una población inicial completamente aleatoria en cada simulación, las poblaciones convergen a configuraciones que minimizan de manera efectiva la energía del sistema teniendo una desviación estándar relativamente pequeña en el conjunto de simulaciones.

4.2. Cristal Fotónico

Los algoritmos han sido implementados en un sistema operativo Linux con un lenguaje de programación C, en una máquina con un procesador intel CORE i7 con 4 GB de RAM.

4.2.1. Algoritmo Genético

Los parámetros utilizados en el AG se aprecian en la Tabla 4.6.

Los resultados obtenidos de 25 simulaciones realizadas del AG se observan en la Tabla 4.7. El campo llamado *Desplazamiento* representa los movimientos realizados por los

Parámetro	Valor
Población	20
Generaciones	20
Probabilidad Cruza P_c	0,7
Probabilidad Mutación P_m	0,1

Tabla 4.6: Parámetros iniciales del AG en la optimización del factor Q

agujeros que rodean a la cavidad del cristal fotónico en el eje $\Gamma - J$ que obtuvieron el mejor valor de Q en la evaluación de la función.

Parámetro	Valor
Q media	556,179
Desviación Estándar	115,060
Q máxima	597,262
Desplazamientos	[0.27 , 0.20 , 0.30]
Amplitud	0.28143
Frecuencia	0.26335
Convergencia promedio	8 gen

Tabla 4.7: Resultados obtenidos por el AG en la optimización del factor Q con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones

En la Figura 4.5 se aprecia el proceso de maximización del factor Q a través de las generaciones del AG con las diferentes configuraciones en las simulaciones.

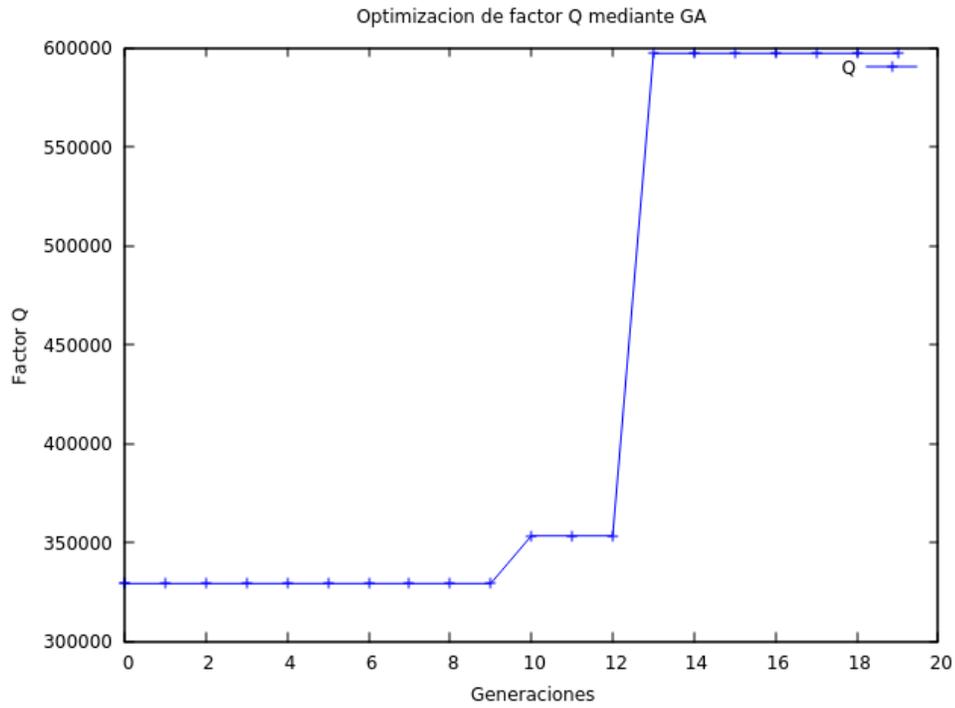


Figura 4.5: Maximización del factor Q utilizando un AG con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones

4.2.2. Particle Swarm Optimization

Los parámetros utilizados en el PSO se presentan en la Tabla 4.8.

Parámetro	Valor
Población	20
Generaciones	20
Coefficiente de inercia mínimo w_{min}	0,1
Coefficiente de inercia máximo w_{max}	4,0
Coefficiente de ponderación personal ϕ_p	0.1
Coefficiente de ponderación global ϕ_g	0.9

Tabla 4.8: Parámetros iniciales del PSO en la optimización del factor Q

Los resultados obtenidos en las simulaciones del PSO se observan en la Tabla 4.9

respectivamente. El campo llamado *Desplazamientos* representa los desplazamientos realizados por los pozos que rodean a la cavidad del cristal fotónico que obtuvieron el mejor valor de Q en su evaluación de función (Q máxima).

Parámetro	Valor
Q media	423,756
Desviación Estándar	158,805
Q máxima	597,262
Desplazamientos	[0.27 , 0.20 , 0.30]
Amplitud	0.28143
Frecuencia	0.26335
Convergencia promedio	6 gen

Tabla 4.9: Resultados obtenidos por el PSO en la optimización del factor Q con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones

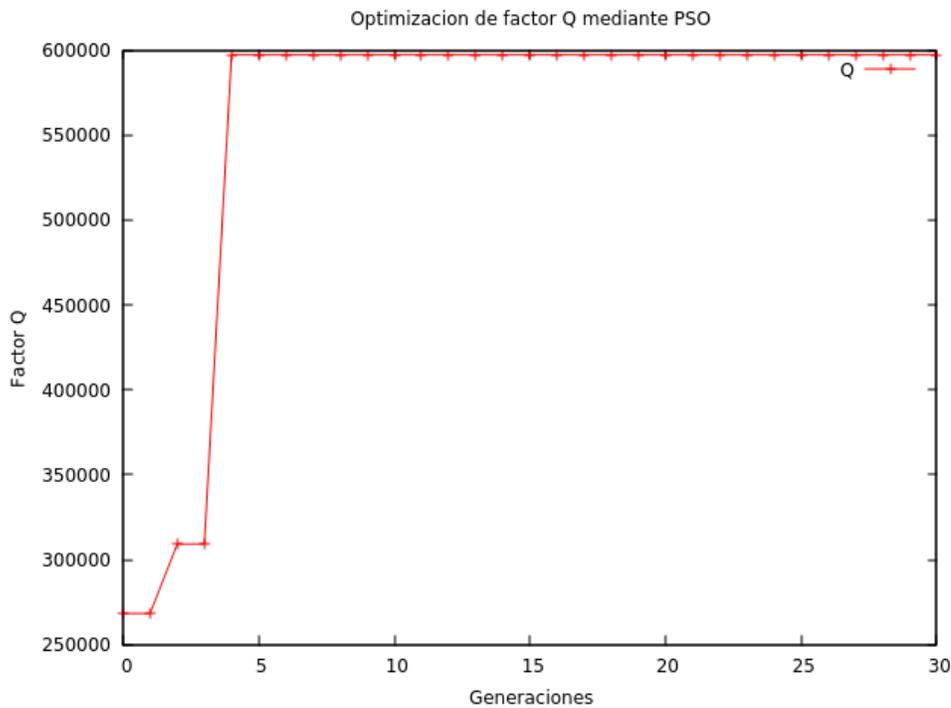


Figura 4.6: Maximización del factor Q utilizando un PSO con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones

La maximización del factor Q mediante el uso del PSO se puede apreciar en la Figura 4.6 donde se observa la mejora del factor a través de las iteraciones del algoritmo.

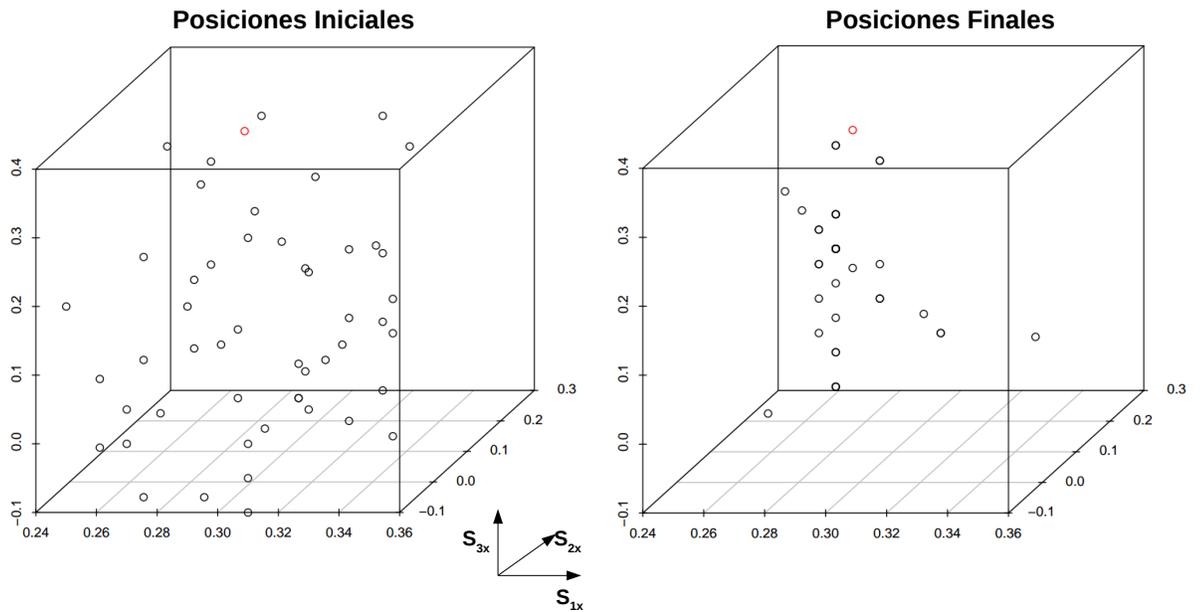


Figura 4.7: Convergencia de partículas en el PSO con una resolución de malla de 20 y aplicado en 3 dimensiones

La Figura 4.7 muestra como las partículas generadas inicialmente en una posición aleatoria al comenzar el algoritmo, al finalizar convergen a zonas donde las variables de optimización encuentran mejores soluciones al problema de maximización.

4.2.3. Análisis de resultados

En la Tabla 4.10 se muestra una comparativa del rendimiento de ambos algoritmos con la configuración utilizada en los experimentos:

La Figura 4.8 contrasta la evolución del factor de calidad Q a través de las generaciones en las metaheurísticas utilizadas.

Parámetro	PSO	AG
Q media μ	423,756	556,179
Desviación estándar σ	158,805	115,060
Q máxima	597,262	597,262
Desplazamientos de mejor Q	[0.27 , 0.20 , 0.30]	[0.27 , 0.20 , 0.30]
Convergencia Promedio	6 gen	8 gen

Tabla 4.10: Contraste de Resultados de algoritmos AG y PSO en la maximización del factor Q

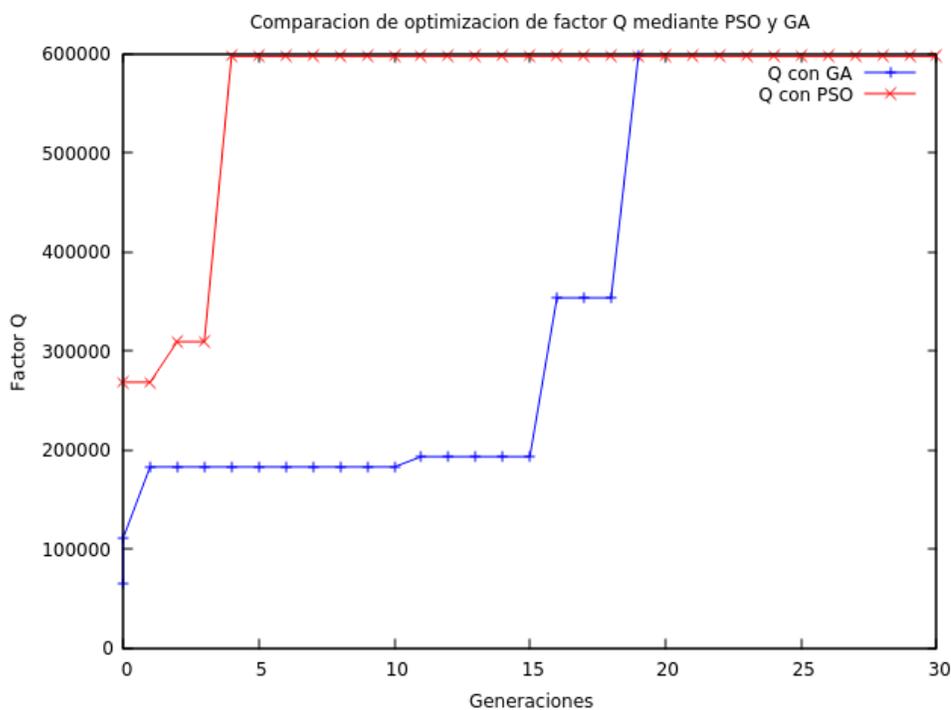


Figura 4.8: Comparativa del factor Q a través de la evolución de los algoritmos

Ambos algoritmos son optimizadores estocásticos globales y exploran el espacio de soluciones de una manera eficiente debido a los mecanismos propios de cada algoritmo.

Al momento de aplicar ambos algoritmos de manera libre en la optimización del factor de calidad Q, y con poblaciones iniciales aleatorias se observa que ambos son

capaces de encontrar la mejor configuración posible dentro del rango de valores que proponemos como se muestra en la Figura 3.4. Los desplazamientos de los agujeros encontrados son $[S_{1x} = 0,27 - S_{2x} = 0,20 - S_3 = 0,30]$ y el valor de Q obtenido para ambos algoritmos es de 597,262.

El AG muestra que 20 individuos y 20 generaciones son suficientes para encontrar la configuración de desplazamientos anterior en la mayoría de las 25 simulaciones realizadas. El AG tiene $\mu = 556,179$ y con $\sigma = 115,060$, mientras que el PSO obtuvo como valor promedio $\mu = 423,756$ y su desviación estándar es $\sigma = 158,805$, se aprecia que la media global del AG es mayor, representando una mejor calidad de resultados promedio de las 25 simulaciones y también una dispersión menor considerando la desviación estándar.

El PSO presenta una mejor convergencia promedio en las simulaciones necesitando al menos de 20 individuos y 20 generaciones para obtener buenos resultados. Debido al factor de inercia que le impide en generaciones de etapas finales del algoritmo y debido a la selección de un solo vecindario el PSO es propenso a quedarse estancado en óptimos locales. Tener más vecindarios significa segmentar la población y realizar búsquedas de diferentes zonas prometedoras en el espacio de soluciones.

Un aspecto a considerar en los resultados es la discretización del espacio de búsqueda. Los valores que pueden tomar las variables de desplazamiento se han limitado a saltos de 0,05 en S_{2x} y S_{3x} , debido a esto se han omitido zonas de búsqueda en el espacio continuo existente entre los saltos. Por lo anterior, es posible la integración de una búsqueda local dentro del algoritmo que considere en su búsqueda estos puntos intermedios cuando se llegue a una zona prometedora.

Capítulo 5

Conclusiones

Como resultado de la investigación realizada establecemos que las técnicas metaheurísticas son excelentes opciones a utilizar en problemas de optimización que cuentan con un espacio de soluciones muy extensos y no existe una solución exacta que resuelva dichos problemas. En esta tesis se abordan problemas relacionados con el diseño de heteroestructuras semiconductoras y estructuras fotónicas que caen dentro del conjunto de problemas para los cuales las metaheurísticas son una opción viable.

Las metaheurísticas utilizadas son Algoritmo Genético (AG) y Particle Swarm Optimization (PSO) las cuales, como se ha demostrado son viables en la construcción de algoritmos que puedan optimizar el diseño de heteroestructuras ópticas y semiconductoras como lo son: la construcción de un Gas de Electrones en Dos Dimensiones (2DEG) y una Photonic Crystal Cavity (PCC).

Dentro del problema de la formación de un 2DEG se encuentra la función de onda del estado base del sistema que se forma en la heterounión AlGaAs/GaAs mediante la minimización de la energía total usando funciones de prueba. Una vez que se calcula la función del estado base es posible calcular otros parámetros de diseño importantes. Con los resultados obtenidos de aplicar ambas metaheurísticas podemos decir que ambas son excelentes optimizadores encontrando valores similares de energía, aproximadamente de $0,039eV$ con diferencias mínimas, que en la construcción son despreciables. Sin embargo se puede apreciar una convergencia más rápida en los experimentos realizados para el PSO.

En el problema relacionado con la cavidad de un cristal fotónico se busca maximizar el factor de calidad Q que está relacionado con el tiempo de vida de un pulso de luz dentro de la cavidad del cristal. La discretización del espacio de búsqueda dentro de este problema ha sido clave debido a que la función de evaluación del factor Q por medio de FDTD es costosa computacionalmente, no obstante las metaheurísticas utilizadas han conseguido encontrar buenas configuraciones en los desplazamientos de los agujeros que rodean la cavidad en la dirección $\Gamma - J$ que maximicen el valor de Q . Ambos algoritmos han encontrado la misma configuración de desplazamientos obteniendo un factor Q de 597,262, sin embargo como en el anterior problema el PSO tiene una convergencia promedio más rápida en las simulaciones realizadas, en cambio, en los resultados se puede observar que al momento de encontrar un óptimo local es difícil salir de ese lugar con la configuración de 1 sólo vecindario que se ha utilizado en esta tesis.

A pesar de tener un comportamiento estocástico con poblaciones inicializadas aleatoriamente ambas metaheurísticas logran guiar las búsquedas utilizando información del problema a obtener buenas configuraciones de individuos que resuelven el problema, con lo anterior podemos afirmar que los problemas que se abordan se pueden modelar mediante dichas metaheurísticas de forma eficiente.

Se concluye que ambas metaheurísticas son excelentes opciones en la maximización del factor de calidad Q de una PCC y en la minimización de energía en la formación de un 2DEG.

Como trabajo futuro se pretende explorar un espacio de búsqueda más amplio y con saltos entre los desplazamientos más pequeños en el problema de maximización del factor Q y utilizar en el PSO vecindarios múltiples que permitan explorar diferentes secciones del espacio de búsqueda simultáneamente.

También se busca trabajar una estrategia híbrida entre metaheurísticas donde se requiera encontrar una zona prometedora de búsqueda en etapas tempranas del algoritmo y después afinar dicha búsqueda con saltos más pequeños y con un comportamiento menos estocástico en etapas finales.

Bibliografía

- [1] E. K. Delice Y., “A modified particle swarm optimization algorithm to mixed-model two-sided assembly line balancing,” *Journal of Intelligent Manufacturing*, vol. 28, no. 1, pp. 23–36, 2017.
- [2] R. Syahputra, “Distribution network optimization based on genetic algorithm,” *Journal of Electrical Technology UMY*, vol. 1, no. 1, pp. 1–9, 2017.
- [3] G. Lee, N. Tolia, and P. Ranganathan, “Computing cluster performance simulation using a genetic algorithm solution,” Oct. 2017. US Patent 9,785,472.
- [4] H. Fang, “Negative field-effect mobility on (100) si surfaces,” *Physical review letters*, vol. 16, no. 18, 1966.
- [5] J. Evans, *Optimization algorithms for networks and graphs*. Routledge, 2017.
- [6] A. Kaveh, *Applications of metaheuristic optimization algorithms in civil engineering*. Springer, 2017.
- [7] R. K. Ahuja, *Network flows: theory, algorithms, and applications*. Pearson Education, 2017.
- [8] D. K. Molzahn, F. Dorfler, H. Sandberg, S. H. Low, S. Chakrabarti, R. Baldick, and J. Lavaei, “A survey of distributed optimization and control algorithms for electric power systems,” *IEEE Transactions on Smart Grid*, vol. 8, no. 6, pp. 2941–2962, 2017.
- [9] S. J. Russell and P. Norvig, *Artificial intelligence: a modern approach*. Malaysia; Pearson Education Limited, 2016.
- [10] D. E. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989.

-
- [11] J. H. Goldberg, David E ; Holland, “Genetic algorithms and machine learning,” *Machine learning*, vol. 3, no. 2, pp. 95–99, 1988.
- [12] T. D. Steiner, *Semiconductor nanostructures for optoelectronic applications*. Artech House, 2004.
- [13] L. Boyd, Stephen ; Vandenberghe, *Convex Optimization*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2004.
- [14] D. Bertsimas and J. N. Tsitsiklis, *Introduction to linear optimization*, vol. 6. Athena Scientific Belmont, MA, 1997.
- [15] C. Darwin, *On the Origin of Species*. John Murray, 1859.
- [16] M. Bateson, *Mendel’s Principles of Heredity: A Defence, with a Translation of Mendel’s Original Papers on Hybridisation*. Cambridge University Press, 2009.
- [17] C. Araujo, *Algoritmos Evolutivos: Un enfoque práctico*. Alfaomega Grupo Editor, 2009.
- [18] J. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. MI:Univ. of Michigan Press, 1975.
- [19] D. J. A. K., *An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems*. PhD thesis, University of Michigan, 1975.
- [20] A. Wetzel, *Evaluation of the effectiveness of genetic algorithms in combinatorial optimization*. PhD thesis, University of Pittsburgh, 1983.
- [21] D. Whitley, “The genitor algorithm and selection pressure: Why rank-based allocation of reproductive trials is best.,” in *ICGA*, vol. 89, pp. 116–123, 1989.
- [22] P. Umbarkar, AJ ;Sheth, “Crossover operators in genetic algorithms: A review.,” *ICTACT journal on soft computing*, vol. 6, no. 1, 2015.
- [23] D. Ackley, *A connectionist machine for genetic hillclimbing*, vol. 28. Springer Science & Business Media, 2012.
- [24] D. G. Tomasz, *Genetic Algorithms Reference*. Tomasz Gwiazda, 2006.
- [25] R. C. Kennedy, James ;Eberhart, *Swarm Intelligence*. San Francisco, CA, USA: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2001.

- [26] J. B. T. Poli, Riccardo ; Kennedy, “Particle swarm optimization,” *Swarm intelligence*, vol. 1, no. 1, pp. 33–57, 2007.
- [27] H. Ehrenreich and D. Turnbull, *Solid State Physics: Semiconductor Heterostructures and Nanostructures*. Academic Press Inc., 1991.
- [28] K. Charles, *Introduction to solid state physics*. Wiley John and Sons; 8va Edición, 2017.
- [29] M. Neil, W. Ascroft ; David, *Solid State Physics*. W.B. Saunders Company, 1976.
- [30] A. Harrison, Paul ; Valavanis, *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley and Sons, 2016.
- [31] S. G. Johnson and J. D. Joannopoulos, *Photonic crystals: the road from theory to practice*. Springer Science & Business Media, 2001.
- [32] E. Yablonovitch, T. Gmitter, R. Meade, A. Rappe, K. Brommer, and J. Joannopoulos, “Donor and acceptor modes in photonic band structure,” *Physical Review Letters*, vol. 67, no. 24, p. 3380, 1991.
- [33] H. Sözüer and J. P. Dowling, “Photonic band calculations for woodpile structures,” *Journal of Modern Optics*, vol. 41, no. 2, pp. 231–239, 1994.
- [34] J. C. Maxwell, “Viii. a dynamical theory of the electromagnetic field,” *Philosophical transactions of the Royal Society of London*, vol. 155, pp. 459–512, 1865.
- [35] Simpetus, “Mit electromagnetic equation propagation,” 1999.
- [36] T. M. Agrawal S., Panigrahi B.K., “Multiobjective particle swarm algorithm with fuzzy clustering for electrical power dispatch,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol. 12, 2008.
- [37] U. Kesgin, “Genetic algorithm and artificial neural network for engine optimisation of efficiency and nox emission,” *Fuel*, vol. 83, 2004.
- [38] M. J. Hagmann, “Stable and efficient numerical method for solving the schrödinger equation to determine the response of tunneling electrons to a laser pulse,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 70, 1998.

-
- [39] Z.-Y. Z. P.-Z. D. S.-F. P. Xue-Shen Liu, Xiao-Yan Liu, “Numerical solution of one-dimensional time-independent schrödinger equation by using symplectic schemes,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 79, 2000.
- [40] C. A. W. Burke Ritchie, “Numerical solution of the time-dependent schrödinger equation for continuum states,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 80, 2000.
- [41] S. B. Rajendra Saha, Pinaki Chaudhury, “Direct solution of schrödinger equation by genetic algorithm: test cases,” *Physics Letters A*, vol. 291, 2001.
- [42] M. G. I Grigorenko, “An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 284, 2000.
- [43] M. E. G. Ilia Grigorenko, “Ground-state wave functions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 291, 2001.
- [44] M. S. H. Nakanishi, “Numerical solution of the schrödinger equation by a microgenetic algorithm,” *Chemical Physics Letters*, vol. 327, 2000.
- [45] T. M. ŞAHİN MEHMET, “Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 16, 10 2002.
- [46] T. M. ŞAHİN MEHMET, ATAV ÜLFET, “Quantum genetic algorithm method in self-consistent electronic structure calculations of a quantum dot with many electrons,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 16, 09 2005.
- [47] S. Deb, C. Singh, N. B. Singh, A. De, and S. K. Sarkar, “Parameter optimization of quantum well nanostructure: a pso and ga based comparative study,” *International Journal of Latest Trends in Computing*, vol. 35, no. 1, pp. 35–40, 2010.
- [48] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech house, 2005.
- [49] K. Okamoto, *Fundamentals of optical waveguides*. Academic press, 2006.
- [50] J. N. G. P. L. L. Jiang, Jianhua; Cai, “Parallel microgenetic algorithm design for photonic crystal and waveguide structures,” *Optics Letters*, vol. 28, 2003.

- [51] Z. H. S. Shen, Linfang; Ye, “Design of two-dimensional photonic crystals with large absolute band gaps using a genetic algorithm,” *Physical Review B*, vol. 68, 7 2003.
- [52] L. D. M. Q. Y. Kerrinckx Emmanuel, Bigot, “Photonic crystal fiber design by means of a genetic algorithm,” *Optics Express*, vol. 12, 2004.
- [53] S. M. Mikki and A. A. Kishk, “Quantum particle swarm optimization for electromagnetics,” *IEEE transactions on antennas and propagation*, vol. 54, no. 10, pp. 2764–2775, 2006.
- [54] B. S. D. N. Granpayeh, “Improving the performance of a photonic crystal ring-resonator-based channel drop filter using particle swarm optimization method,” *Optics Communications*, vol. 283, 2010.
- [55] M. S. Mirjalili Seyed Mohammad, Abedi Kambiz, “Optical buffer performance enhancement using particle swarm optimization in ring-shape-hole photonic crystal waveguide,” *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, vol. 124, 12 2013.
- [56] G. F. G. A. M. D. S. F. P. L. Mescia, A. Giaquinto, “Particle swarm optimization for the design and characterization of silica-based photonic crystal fiber amplifiers,” *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 357, 2011.
- [57] G. Bastard, “Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures,” 1990.
- [58] K. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problem involving maxwell’s equations in isotropic media,” vol. AP-14, pp. 302–307, 06 1966.
- [59] A. Harrison, Paul;Valavanis, *Quantum Wells, Wires and Dots Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures and Nanostructures*. Wiley 4ta Ed., 1976.