

遗传算法在二维声子晶体带隙优化中的应用^{*}

钟会林¹⁾ 吴福根^{1)†} 姚立宁²⁾

1) (广东工业大学实验中心 广州 510090)

2) (广州航海高等专科学校 广州 510725)

(2005 年 2 月 28 日收到 2005 年 5 月 8 日收到修改稿)

运用自适应遗传算法对二维声子晶体的带隙宽度进行优化设计,并与平面波展开法相结合,研究了由正方形排列的铅-环氧树脂构成的声子晶体的带隙宽度优化问题,发现自适应遗传算法可以有效地搜索到具有较宽完全声子带隙的优化单胞形式.

关键词:声子晶体,声子带隙,遗传算法

PACC: 4320, 4335, 6320

1. 引言

近年来,光子晶体^[1-3]、声子晶体^[4-17]等复合介质领域的研究引起了人们极大兴趣.研究发现,各组元呈周期性排列的复合材料对经典波(包括光波、电磁波、超声波以及声波等)具有良好的带通和带阻特性.声波(弹性波)在弹性系数周期性排列的复合介质中传播时会形成能带结构.相应地,这种复合结构称之为声子晶体,能带之间出现的带隙称为声子带隙.声子晶体带结构的研究具有丰富的物理意义和内涵,对工程应用和材料科学发展有着重要意义,特别是有望设计出一些基于声子带隙原理的新型的隔声隔振材料、声滤波器、声波或弹性波波导等.因此,根据实际应用的需要,对声子晶体的拓扑结构进行人工设计,将是一个很有意义的研究方向.

目前,对声子晶体的性质、应用的研究已经从理论^[4-15]和实验两方面展开^[15-17],理论和实验是相互支持、相互促进的.数值计算一直是探索声子晶体的相关属性的重要方法之一.近年来逐步发展起来的声子晶体的计算方法主要有平面波展开法(PWE)^[4-7]、时域有限差分法(FDTD)^[8,9]、多重散射法(MST)^[10,11]、有限元法(FE)^[12]等.这些方法各有所长,在一定的条件和物理背景下均可以得到很好的计算结果,但是它们有一个共同的不足,那就是在计

算之前必须事先设定声子晶体的单胞结构.但对何种形式的单胞拓扑结构具有最优的声子带隙,则是一个难以预测的问题,这在很大程度上束缚了人们对声子晶体的研究.

近二、三十年来以模拟自然界的进化而发展起来的遗传算法(genetic algorithm, GA)^[18-20]逐渐成为信息科学、人工智能与计算机科学的一大热点研究领域.由于其鲜明的生物背景、新颖的设计原理、独特的分析方法和成功的应用实践^[21-24],成为最优化理论与方法的一个崭新分支.它通过模拟达尔文的“优胜劣汰、适者生存”的原理激励好的结构,通过模拟孟德尔的遗传变异理论在迭代过程中保持已有的结构,同时寻找更好的结构.因此,遗传算法的实质是一类新型、高效、并行的全局优化搜索技术,其通用性和鲁棒性强.遗传算法的这些特点对解决上面提出的声子晶体单元结构的设计困难具有极大的启发意义.事实上,近几年来,已经有学者应用遗传算法解决光子晶体^[22,23]以及电磁波导设计^[24]方面的一些问题,而这些问题大多是一些优化结构、参数的逆问题.文献[21]用遗传算法有效地解决了因蒙特卡罗方法模拟介质中光输运结果的离散性和统计性,较好地实现了对散射介质模型的单个光学特性参数的重构和多参数联合重构.文献[23]用遗传算法对二维砷化镓按正方形排列在空气中的光子晶体的带隙进行了优化,得到的较宽的带隙.本文借鉴

^{*} 国家自然科学基金(批准号 50478123)和广东省自然科学基金(批准号 032485 和 034794)资助的课题.

[†] E-mail: fugenwu@163.net

了文献 [21—24] 的研究方法,将遗传算法用于声子晶体带隙的优化研究中.考虑到声子带隙计算上较为耗时,因此非常有必要对文献 [23] 所采用的遗传算法加以改进,加快其收敛速度.本文采用自适应遗传算法(adaptive genetic algorithm,AGA)^[20]对二维声子晶体的带隙进行优化设计,得到一些有意义的结果,也是对声子晶体研究方法上的一个新的尝试.

2. 计算模型

理想弹性介质中的弹性波的波动行为可以用弹性波波动方程

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \mathbf{u} + \rho\omega^2 \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

来描述,式中 \mathbf{u} 是位移矢量, λ, μ 是拉梅常数, ρ 是介质的质量密度.根据文献 [4—6],在笛卡儿坐标系下,假定弹性波在 xy 平面内传播,即 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y)$,此时方程(1)可以分解为一个 z 模(横模)和一个 xy 混合模(横模加纵模)的波动方程.本文所采用的基底材料是环氧树脂,填充材料是铅(环氧树脂的密度为 $1.20 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$,横波速度为 1160 m/s ,纵波速度为 2830 m/s ,铅的密度为 $11.35 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$,横波速度为 860 m/s ,纵波速度为 2158 m/s).因为这两种材料的密度差别较大,有利于带隙的产生.填充材料在基底材料中作正方形排列,而填充体的形状则是本文要研究的对象.设柱体平行于 z 轴(z 轴垂直于纸面),为了描述方便,按方柱体作 xy 平面内的模型示意图及其第一布里渊区,如图 1 所示.

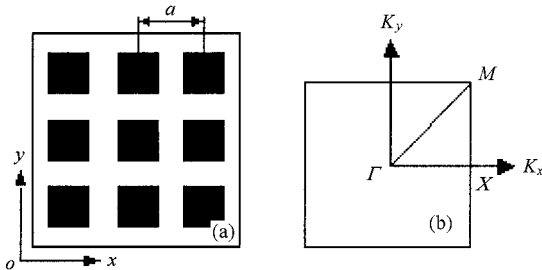


图 1 (a) 铅柱体按正方形排列在环氧树脂基底中的横截面示意图,其中黑色的部分是铅, a 是晶格常数;(b) 正方形排列的第一布里渊区示意图

遗传算法作为一种随机的群体搜索算法,模拟的是生物进化的过程.它杂交和变异等遗传操作,使种群不断向前进化,直到达到满足需要的满意度为止.遗传算法的有效性分析目前主要依赖 Holland 提

出的模式定理和隐并行性原理^[18,19]. 本论文要解决的问题可以归结一个优化模型:用遗传算法来搜索何种截面形状的填充柱体产生的弹性波带隙最宽.考虑到本文只有两种介质铅和环氧树脂,因此采用二进制的编码方式较为简洁,即用一串二进制数来表示“柱体的横截面形状”.为了方便二进制编码,我们这里对单胞进行离散化处理.单胞均匀地离散化为 $2M \times 2M$ (M 是一个正整数)个均匀的正方形小单元. M 取得越大,单元就缩得越小,柱体的边界就越光滑.我们这里仅考虑一种较为简单的情形,即柱体满足关于 xz, yz 平面镜像对称和对 z 轴 90 度旋转对称.

根据以上分析,利用遗传算法解决声子晶体的最大带隙优化问题的流程是:1)首先,产生初始种群.用一串二进制数对单胞进行编码,构成染色体(个体).随机产生的个体,可能不能形成完全带隙.为了加快搜索过程,我们在初始种群中引入特殊个体,它是经过验证,可以构成带隙的染色体.2)对新产生的种群进行解码操作,将二进制串还原为实际的铅、环氧树脂在单胞中的组合形式.3)对种群进行一系列的选择(selection)、交叉(crossover)、变异(mutation)遗传操作,使种群向前进化,不断更新种群.选择采用“赌盘选择”方式,交叉操作采用平均交叉方式,以增强算法的全局搜索能力.为了进一步优化算法,我们采用了 AGA 的思想^[20],即根据种群的进化情况动态地调整交叉概率和变异概率.4)运用平面波展开法(PWE)计算各个个体对应单胞所产生的带隙,并根据带隙的宽窄确定各个个体在种群中的适应度,为了克服算法的“早熟”现象,本文采用了“线性排名”策略确定各个个体的适应度.5)为了巩固已经形成的较好的模式,我们采用了“杰出者”选择策略,即用本代为止适应度最高的个体替换本代适应度最低的个体,体现“优胜劣汰”的原则.6)检验是否满足停止条件(例如固定的进化代数或种群是否稳定),如果满足则退出,否则转到 2).由于“优胜劣汰,适者生存”自然选择和遗传进化机理,最优秀个体的单胞拓扑结构就越来越逼近我们想要寻求的具有最宽完全带隙的单胞形式.

3. 遗传算法的计算结果

在本文中,遗传算法的相关参数取值分别是:单胞划分的单元数是 40×40 (即 $M = 20$) 种群的规模

是20,最大的进化代数 为 1000—2500 代不等,取到种群稳定为止.我们也列出了一些中间代的优化结果,以归纳单胞的形式随进化代数的变化趋势.运用前面描述的研究方法,我们得到了铅、环氧树脂的正方形排列的 z 模、 xy 模以及两者混合的带隙优化结果.

3.1. z 模的带隙优化

由于随机产生的初始群体中的个体,其带隙极窄,甚至没有带隙.为了加快优化过程,本文在初始群体中引入了一个“特殊种子”,面积填充率为 0.16 的方柱体,用 PWE 方法计算可得其相对带宽(带隙宽度/带隙中间频率 $\Delta\omega/\omega_g$)为 0.546.这个“特殊种子”对下代优秀个体的产生具有启发作用,即其携带的好的模式可以被下代继承,其他初始群体中的个体均随机产生.进化 1500 代的结果如图 2 所示.

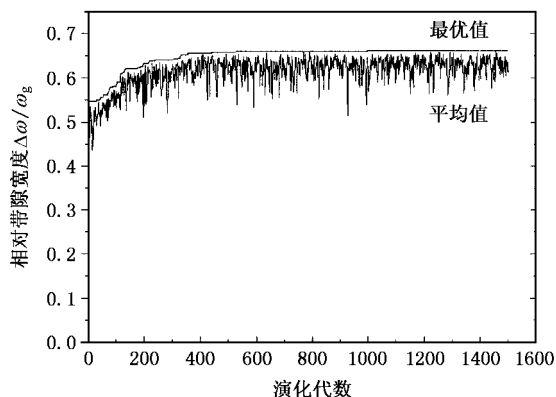


图 2 遗传算法得到的 z 模的约化带隙优化结果(图中上面的实线是最优个体的相对带宽,下面的实线是每代中各个个体相对带宽的平均值)

在进化 1500 代后,最宽的相对带宽是 0.663,与“特殊种子”相比,提高了 21.5%,图 2 显示,在约 400 代以后,相对带宽变化较小,表明种群已经趋于稳定.我们截取了单胞构形的部分进化的中间结果,如图 3 所示.

图 3 显示了一个极有趣的进化过程:单胞中填充体的形状从初始的方形逐渐变为近乎圆.圆的边界不光滑是由于单胞的离散化造成的.对 1500 代的最优个体的填充体作平均,可得圆的半径与晶格常数的比值是 0.303,相当于填充率是 0.288,如图 4 所示.

我们又用平面波展开的方法计算了填充体是圆柱和方柱两种情况下, z 模相对带宽随填充率(F)

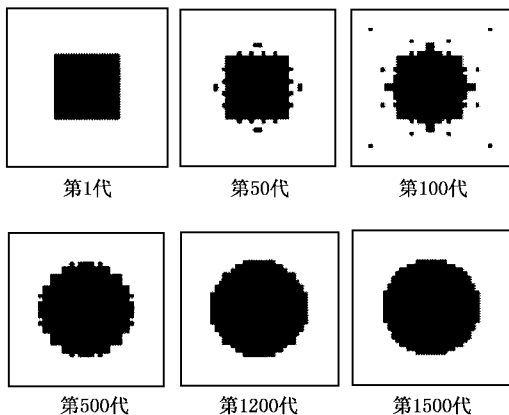


图 3 z 模在第 1,50,100,500,1200,1500 代的最优个体对应的单胞形式(图中单胞中心的黑色部分是铅,其余部分是环氧树脂)

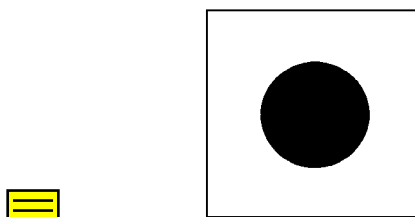


图 4 z 模的最优个体对应的单胞.单胞面积填充率是 0.288

变化关系,由图 5 给出.我们发现,在这两种情况下, z 模最大相对带宽是 0.65,出现在填充体是圆柱,填充率是 0.29 的时候,这一结果与遗传算法所得到的结果是极为接近的.

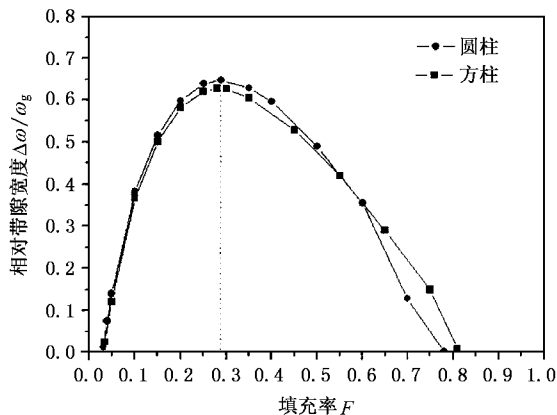


图 5 填充体是圆柱和方柱两种情况下 z 模相对带宽随填充率 F 变化关系曲线(图中虚线处的填充率是 0.29)

3.2. xy 模的带隙优化结果

计算时,“特殊种子”的选取同 z 模,它具有的约化带隙是 0.286.进化 1000 代的结果如图 6 所示.

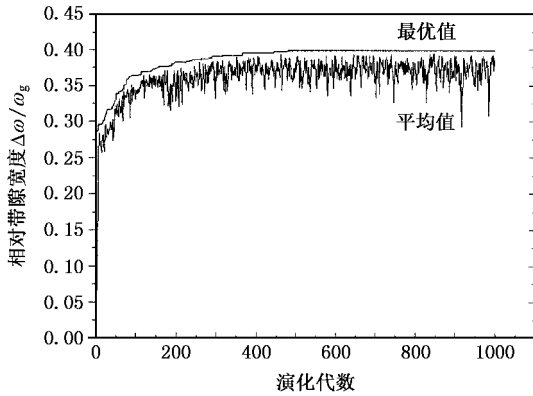


图6 遗传算法得到的 xy 模的相对带宽优化结果(图中上面的实线是最优个体的相对带宽,下面的实线是每代中各个个体相对带宽的平均值)

在进化 1000 代后, xy 模相对带宽的最大值是 0.398, 与“特殊种子”相比, 提高了 39.2%. 与 z 模的进化过程类似, 在约 500 代以后, 相对带宽的变化也较小, 表明种群已经趋于稳定. 我们也截取了单胞形状的部分进化中间结果, 如图 7 所示.

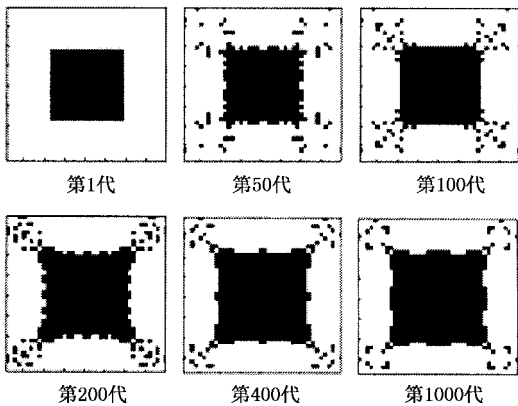


图7 xy 模在第 1, 50, 100, 200, 400, 1000 代的最优个体对应的单胞形式

图 7 显示了 xy 模的进化过程: 单胞中填充体的形状从初始的较小方形逐渐增大其面积, 变成面积较大的方形. 忽略 1000 代的单胞中的一些“毛刺”(经过计算验证, 这样做对带隙的影响不大), 可得柱体的边长相对晶格常数的比值是 0.60, 即相当于填充率是 0.36 的方形, 如图 8 所示.

我们又用平面波展开的方法计算了填充体是圆柱和方柱两种情况下, xy 模约化带隙的宽度随填充率变化的规律, 由图 9 给出. 我们发现, 在这两种情况下, xy 模最宽的带隙出现在填充体是方形柱体, 填充率是 0.36, 最宽约化带隙值是 0.409, 这与遗传

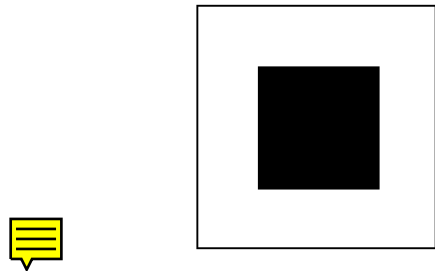


图8 xy 模的最优个体对应的单胞, 填充率是 0.36

算法所得到的结果也是相符的, 也说明了用遗传算法进行声子晶体拓扑结构优化是有效的.

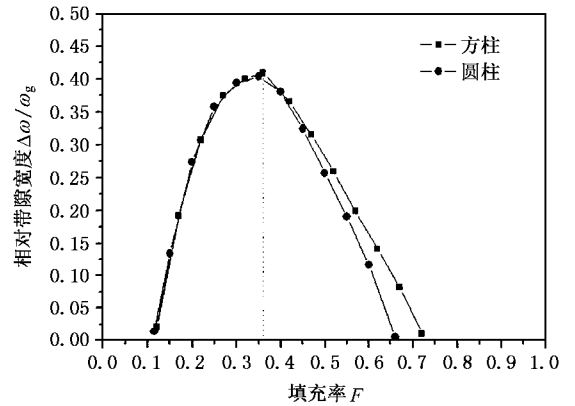


图9 填充体是圆柱和方柱两种情况下 xy 模最大相对带宽随填充率 F 的变化关系(图中虚线处的填充率是 0.36)

3.3. xy 和 z 混合模的带隙优化结果

我们注意到, z 模和 xy 模的单胞形状的优化结果并不一样. 前者的填充体是圆柱而后者的填充体是方柱. 我们接着用同前面类似的方法对 z 和 xy 混

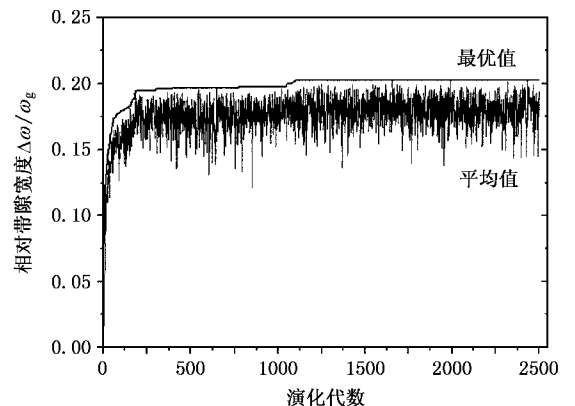


图10 遗传算法得到的 z 和 xy 混合模的相对带宽的优化结果(图中上面的实线是最优个体的相对带宽, 下面的实线是每代中各个个体相对带宽的平均值)

合模所具有的带隙的进行进化,得到的进化历程如图 10 所示.

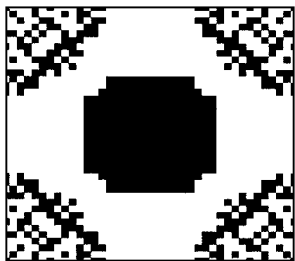


图 11 遗传算法得到的 z 和 xy 混合模的第 2500 代的单胞形式

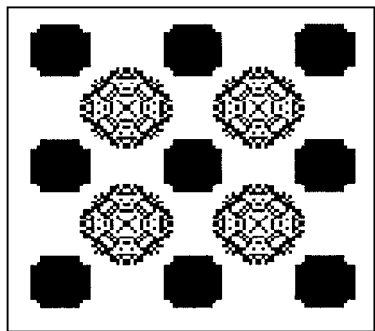


图 12 遗传算法得到的 z 和 xy 混合模的第 2500 代的单胞在实空间中的排列形式

从图 10 可以看到, z 和 xy 混合模的相对带宽从初始的 0.079 逐渐递增至 2500 代时的 0.203,提高了 157.0%,可见 GA 算法对本问题的优化能力是可观的.在 1200 代以后,种群趋于稳定.图 11 给出了

2500 代时的单胞构形,单胞在实空间的排列形式如图 12 所示,它是一套复式格子,一部分是连续的,而另一部分则是离散的.

4. 结 论

本文运用自适应遗传算法对二维铅柱体在环氧树脂中按正方形排列时的完全带隙进行了优化设计,得到了 z 模、 xy 模以及 z 和 xy 混合模所对应的最优单胞形式.数值计算发现, z 模最大相对带宽是 0.663,对应的最优的单胞形式是面积填充率为 0.288 的圆形铅柱体放在环氧树脂中; xy 模最大相对带宽是 0.409,对应的最优的单胞形式是面积填充率为 0.36 的方形铅柱放在环氧树脂中; z 和 xy 混合模最大相对带宽是 0.203,对应的最优的单胞形式是一套复式格子,单胞中的填充体一部分是连续的,而另外一部分是离散的.

从上面得到的优化过程与结果看,遗传算法对声子晶体带隙的优化是有效的,其全局搜索能力在这里得到了充分体现.但在进化的后期,优化的效率较低.这是因为 GA 的局部搜索能力不是很强.如果将遗传算法与模拟退火等其他优化方法结合起来,其局部搜索能力,搜索效率及搜索准确度等方面会得到进一步改善.总之,遗传算法不仅仅是一种优化算法,更是一种全新的一般方法论,是解决复杂问题的有力工具.随着声子晶体数值计算方法和遗传算法本身的不断进步以及计算机性能的不提高,它在声子晶体的研究中会得到更广泛的应用.

- [1] Anderson C M , Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [2] Wang R Z , Wang X H 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 4307
- [3] Zhuang F , Wu L , He S L 2002 *Chin. Phys.* **11** 834
- [4] Sigalas M M 1997 *J. Acoust. Soc. Am.* **101** 1256
- [5] Chballeo D , Sanchez-Dehesa J , Rubio C *et al* 1999 *Phys. Rev. E* **60** 6316
- [6] Wu F G , Liu Z Y , Liu Y Y 2002 *Phys. Rev. E.* **66** 046628
- [7] Hou Z L , Wu F G , Liu Y Y 2004 *Solid State Communications* **130** 745
- [8] Sigalas M M 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 3122
- [9] Wang G , Wen J H , Han X Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1943 (in Chinese) [王 刚、温激鸿、韩小云等 2003 物理学报 **52** 1943]
- [10] Liu Z Y , Chan C T , Sheng P 2002 *Phys. Rev. B.* **65** 165161

- [11] Psarobas I E , Stefanou N 2000 *Phys. Rev. B.* **62** 278
- [12] Hua J , Zhang S , Cheng J C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1261 (in Chinese) [华 佳、张 舒、程建春 2005 物理学报 **54** 1261]
- [13] Wen J H , Wang G , Liu Y Z *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3384 (in Chinese) [温激鸿、王 刚、刘耀宗等 2004 物理学报 **53** 3384]
- [14] Wang G , Wen J H , Liu Y Z *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1247 (in Chinese) [王 刚、温激鸿、刘耀宗等 2005 物理学报 **54** 1247]
- [15] Liu Z Y , Zhang X X , Mao Y W *et al* 2000 *Science* **289** 1734
- [16] Vasseur J O , Deymier P A , Chenni B *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3012
- [17] Cervera F , Sanchis L , Saez-Perez V J *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 023902

- [18] Holland J H 1975 *Adaptation in Nature and Artificial System* (Michigan : The University of Michigan Press)
- [19] Goldberg D E 1989 *Genetic Algorithms in Search , Optimization , and Machine Learning* (New York : Addison-Wesley)
- [20] Srinivas M , Patnaik L M 1994 *IEEE Transaction on Systems , Man and Cybernetics* **24** 656
- [21] Zhang H , He S L , Chen X H *et al* 2000 *Acta Optica . Sin.* **20** 1026 (in Chinese) [张 航、何赛灵、陈小虎等 2000 光学学报 **20** 1026]
- [22] Shen L F , He S L , Xiao S S 2002 *Phys . Rev . B* **66** 165315
- [23] Shen L F , Ye Z , He S L 2003 *Phys . Rev . B* **68** 035109
- [24] Kim Seunghyun *et al* 2004 *Opt . Eng .* **43** 2143

Application of genetic algorithm in optimization of band gap of two-dimensional phononic crystals^{*}

Zhong Hui-Lin¹⁾ Wu Fu-Gen^{1)†} Yao Li-Ning²⁾

1) (*Experiment Center , Guangdong University of Technology , Guangzhou 510090 , China*)

2) (*Guangzhou Maritime College , Guangzhou , 510725 , China*)

(Received 28 February 2005 ; revised manuscript received 8 May 2005)

Abstract

A genetic algorithm (GA) with adaptive crossover and mutation probability is developed to design a two-dimensional phononic crystal of a square lattice with maximal absolute band gap. The composites of Pb cylinders in epoxy matrix are studied with GA method connection with plane-wave expansion approach. We find that GA method is effective to find out excellent topology of unit cell with a widest absolute band gap.

Keywords : phononic crystal , phononic band-gap , genetic algorithm

PACC : 4320 , 4335 , 6320

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50478123) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province , China (Grant Nos. 032485 and 034794).

[†] E-mail : fugenwu@163.net