

О.В. Міца

Ужгородський національний університет, Ужгород

СИНТЕЗ ЧОТИРИШАРОВИХ СТРУКТУР ТА АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ БАГАТОВИМІРНОГО ПОШУКУ

Досліджено оптимальні параметри чотиришарових структур, промодельовано динаміку їх зміни та визначено найбільш ефективні конструкції методів багатовимірної пошуку для даної задачі.

Optimal parameters of four-layered structure have been investigated, the dynamics of their change has been modelled and the most effective constructions of multidimensional search methods for the given problem have been defined.

Вступ. Можливості пропускання чотиришарових структур не вивчені повністю для різних спектральних діапазонів. Є певні задані конструкції [1], для яких вивчені лише деякі спектральні діапазони. Відхід від конструкцій [1] дозволить ширше визначити можливості чотиришарових структур. Метою даної роботи було визначити оптимальні параметри чотиришарових структур, динаміку їх зміни із збільшенням спектрального інтервалу, а також визначити найбільш ефективні методи багатовимірної оптимізації або їх конструктивне поєднання для розв'язання даної задачі.

1. Математична модель. Розглянемо поширення плоскої монохроматичної хвилі в просторі через шарувате середовище. Якщо вибрати напрямком поширення вісь z , то діелектрична і магнітна проникності будуть функціями тільки від z : $\varepsilon = \varepsilon(z)$, $\mu = \mu(z)$.

Нехай розглядувана плоска монохроматична хвиля плоскополяризована. Якщо вектор напруженості електричного поля \vec{E} перпендикулярний площині поширення, то хвиля має s -поляризацію (TE -хвиля). Якщо ж вектор \vec{E} лежить у площині падіння, то хвиля має p -поляризацію (TM -хвиля). Довільну плоскополяризовану хвилю можна розкласти на дві хвилі, одна з яких має s -, а друга – p -поляризацію. Так як граничні умови на поверхні розділу для перпендикулярної і паралельної до неї компонент не залежать одна від одної, то s - і p -хвилі також взаємно незалежні. Більше того, якщо провідність середовища рівна нулю, одночасна заміна \vec{E} на \vec{H} і ε на $-\mu$ не змінює рівняння Максвелла. Відповідно, будь-який результат, який відноситься до TE -хвилі, може бути трансформований для TM -хвилі подібною заміною. Тому досить вивчити детально лише TE -хвилю.

Виберемо в якості площини падіння площину yz . Для TE -хвилі – $E_y = E_z = 0$, $H_x = 0$. Рівняння Максвелла для гармонічної хвилі з частотою ω будуть мати вигляд:

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} + i \frac{\varepsilon \omega}{c} E_x = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = 0;$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = 0;$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i \frac{\omega \mu H_y}{c} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} + i \frac{\omega \mu H_z}{c} = 0; \quad (3)$$

З цих формул бачимо, що H_y , H_z і E_x залежать тільки від y і z . Виключаючи H_y і H_z із (1)–(3), знайдемо

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + n^2 k_0^2 E_x = \frac{d(\ln \mu)}{dz} \frac{\partial E_x}{\partial z}; \quad (4)$$

$$\text{де } n^2 = \varepsilon \mu; \quad k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (5)$$

В (5) введені такі позначення: λ – довжина хвилі, n – показник заломлення середовища, c – швидкість світла.

Шукаємо розв'язок (4) у вигляді

$$E_x(y, z) = Y(y)U(z)e^{-i\omega t}.$$

Тоді рівняння (4) буде мати вигляд

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -\frac{1}{U} \frac{d^2 U}{dz^2} + \frac{1}{U} \frac{d(\ln \mu)}{dz} \frac{dU}{dz} - n^2 k_0^2.$$

Ліва частина залежить тільки від y , а права – тільки від z . Звідси слідує, що кожна з них рівна сталій:

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k^2; \quad (6)$$

$$\frac{d^2 U}{dz^2} - \frac{d(\ln \mu)}{dz} \frac{dU}{dz} + n^2 k_0^2 U = k^2 U.$$

Позначимо $k^2 = k_0^2 \alpha^2$.

Тоді розв'язком (6) буде

$$Y(y) = \text{const} \cdot e^{ik_0 \alpha y}$$

і E_x має вигляд

$$E_x = U(z) \cdot e^{i(k_0 \alpha y - \omega t)}. \quad (7)$$

Із (3), (4) слідує, що вираз для компонент магнітного поля буде мати вигляд:

$$H_y = V(z) \cdot e^{i(k_0 \alpha y - \omega t)}; \quad (8)$$

$$H_z = W(z) \cdot e^{i(k_0 \alpha y - \omega t)}. \quad (9)$$

Підставляючи (7)–(9) у рівняння Максвелла (1)–(3), знаходимо зв'язок між функціями U , V та W :

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial z} &= ik_0(\alpha W + \varepsilon U); \\ \frac{\partial U}{\partial z} &= ik_0 \mu V; \\ \alpha U + \mu W &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Виключаючи W за допомогою (10), отримаємо систему рівнянь для U і V :

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial z} = ik_0 \mu V; \\ \frac{\partial V}{\partial z} = ik_0 \left(\varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) U. \end{cases} \quad (11)$$

Із (11) отримаємо лінійні диференціальні рівняння другого порядку для функцій U і V :

$$\frac{d^2 U}{dz^2} - \frac{d(\ln \mu)}{dz} \frac{dU}{dz} + k_0^2 (n^2 - \alpha^2) \cdot U = 0, \quad (12)$$

$$\frac{d^2 V}{dz^2} - \frac{d \left[\ln \left(\varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) \right]}{dz} \frac{dV}{dz} + k_0^2 (n^2 - \alpha^2) \cdot V = 0. \quad (13)$$

Оскільки функції $U(z)$ і $V(z)$ задовольняють (12), (13) відповідно, то кожна з них може бути представлена у вигляді лінійної комбінації двох частинних розв'язків $U_1(z)$, $U_2(z)$ та $V_1(z)$, $V_2(z)$.

Із (11) можна вивести, що

$$V_1 \frac{dU_2}{dz} - \frac{dU_1}{dz} V_2 = 0, \quad U_1 \frac{dV_2}{dz} - \frac{dV_1}{dz} U_2 = 0.$$

Звідси знаходимо, що

$$\frac{d}{dz}(U_1 V_2 - U_2 V_1) = 0. \quad (14)$$

Розглянемо матрицю

$$M = \begin{vmatrix} U_1(z) & -V_1(z) \\ -U_2(z) & V_2(z) \end{vmatrix}.$$

З (14) випливає, що детермінант матриці M сталий. Фізичний зміст її наступний: вона зв'язує компоненти \vec{E} і \vec{H} на площині $z = 0$ з такими ж компонентами на довільній площині $z = \text{const}$ [2]. Матриця M повністю характеризує поширення плоскої монохроматичної хвилі через шарувате середовище. Вона називається характеристичною матрицею [2].

Знайдемо характеристичну матрицю однорідної діелектричної плівки з постійним коефіцієнтом заломлення n . Для неї $\varepsilon = \text{const}$, $\mu = \text{const}$, $\alpha = n \sin(\theta)$, де θ – кут між напрямком поширення хвилі і віссю z . Підставляючи це в (12) і (13), отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 U}{dz^2} + U k_0^2 (n^2 - \alpha^2) &= 0, \\ \frac{d^2 V}{dz^2} + V k_0^2 (n^2 - \alpha^2) &= 0. \end{aligned}$$

Загальний розв'язок для $U(z)$ буде мати вигляд:

$$U(z) = A \cos(k_0 n z \cos \theta) + B \sin(k_0 n z \cos \theta). \quad (15)$$

Тоді

$$V(z) = \frac{1}{i k_0 \mu} \frac{\partial U}{\partial z} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot \cos(\theta) \cdot [B \cos(k_0 n z \cos \theta) - A \sin(k_0 n z \cos \theta)]. \quad (16)$$

Виберемо частинний розв'язок такий, щоб

$$U_1(0) = V_2(0) = 0 \quad \text{і} \quad U_2(0) = V_1(0) = 1,$$

а також визначивши з (15), (16) що

$$U(0) = A, \quad V(0) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cos \theta \cdot B,$$

отримаємо

$$\begin{aligned} U_1(z) &= i \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \frac{1}{\cos \theta} \sin(k_0 n z \cos \theta), \\ U_2(z) &= \cos(k_0 n z \cos \theta), \\ V_1(z) &= \cos(k_0 n z \cos \theta), \\ V_2(z) &= i \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cos \theta \sin(k_0 n z \cos \theta). \end{aligned}$$

В оптичному діапазоні частот $\mu = 1$ і $p = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \cos \theta = n \cos \theta$.

Враховуючи (5), а також, що геометрична товщина шару рівна d (тобто z вибираємо рівним d), можемо записати характеристичну матрицю однорідної діелектричної плівки:

$$M(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta(n, d, \lambda) & -\frac{i}{p} \sin \delta(n, d, \lambda) \\ -ip \sin \delta(n, d, \lambda) & \cos \delta(n, d, \lambda) \end{vmatrix}, \quad (17)$$

$$\text{де } \delta(n, d, \lambda) = \frac{2\pi n d \cos \theta}{\lambda}.$$

Розглянемо випадок, коли напрям поширення випромінювання співпадає з нормаллю до поверхні розділу. Тому $\theta=0$ і, відповідно, $p = n$.

Знаючи характеристичну матрицю одного шару (17), можемо записати характеристичну матрицю чотиришарової структури [1]:

$$M(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) = M_4(n_4, d_4, \lambda) \cdot M_3(n_3, d_3, \lambda) \cdot M_2(n_2, d_2, \lambda) \cdot M_1(n_1, d_1, \lambda), \quad (18)$$

де M_j – характеристична матриця j -ого шару;

$\bar{n} = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ – вектор значень показників заломлення;

$\bar{d} = (d_1, d_2, d_3, d_4)$ – вектор значень геометричної товщини;

Звідси легко знайти коефіцієнт пропускання чотиришарової структури при заданих значеннях \bar{n} , \bar{d} та λ [1-4]:

$$T(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) = 1 - \left[\frac{n_0(M_{11}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) + n_s \cdot M_{12}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda)) - (n_s \cdot M_{22}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) + M_{21}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda))}{n_0(M_{11}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) + n_s \cdot M_{12}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda)) + (n_s \cdot M_{22}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) + M_{21}(\bar{n}, \bar{d}, \lambda))} \right]^2, \quad (19)$$

де n_0 , n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладки відповідно, M_{11} , M_{12} , M_{21} , M_{22} – елементи характеристичної матриці M .

Цільова функція представляється у вигляді:

$$\Omega(\lambda_2 / \lambda_1) = \max_{\bar{n}, \bar{d}} \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2(\bar{n}, \bar{d}, \lambda_{(i)}) \right)^{1/2}, \quad (20)$$

де L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 . При рівномірному його поділі з кроком $\Delta\lambda$

$$L = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\Delta\lambda} + 1.$$

При дослідженні вибирались значення $1.35 \leq n_j \leq 2.6$, $50 \text{ нм} \leq d_j \leq 750 \text{ нм}$ ($j = \overline{1, 4}$),

$\Delta\lambda = 5 \text{ нм}$, $\lambda_1 = 200 \text{ нм}$.

2. Обчислювальний експеримент. Для знаходження оптимальних параметрів чотиришарової структури було випробувано різні методи багатовимірного пошуку екстремумів нелінійних функцій без обмежень [2, 5]. Серед них методи конфігурацій (Хука-Дживса), Розенброка, найшвидшого спуску, спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Ріб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко-Мак-Кормика, Грінстада).

Програмне забезпечення написано мовою програмування Pascal. Розрахунки проводились на комп'ютері з процесором AMD Athlon 1.2 ГГц 128 МБайт ОЗП.

3. Результати.

3.1. Дослідження функціоналу $\Omega(\lambda_2 / \lambda_1)$. Після проведення експерименту ми отримали результати наведені на рисунках 1-3. На рисунках 1-2 наведено динаміку зміни оптимальних параметрів \bar{n} , \bar{d} при збільшенні спектрального інтервалу, а на рисунку 3 – динаміку зміни функціоналу $\Omega(\lambda_2 / \lambda_1)$.

Як бачимо, певної закономірності в розміщені оптимальних параметрів немає. Із зміною λ_2 / λ_1 вони можуть появлятися в різних областях. Рисунок 3 дозволяє оцінити можливість просвітлення чотиришаровою структурою і порівняти її з відомими конструкціями.

Розглянемо такі конструкції [3]:

$$0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0, \quad (21)$$

$$0.25\lambda_0 - 0.5\lambda_0 - 0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0, \quad (22)$$

$$0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0 - 0.25\lambda_0 - 0.5\lambda_0, \quad (23)$$

де λ_0 – робоча довжина хвилі.

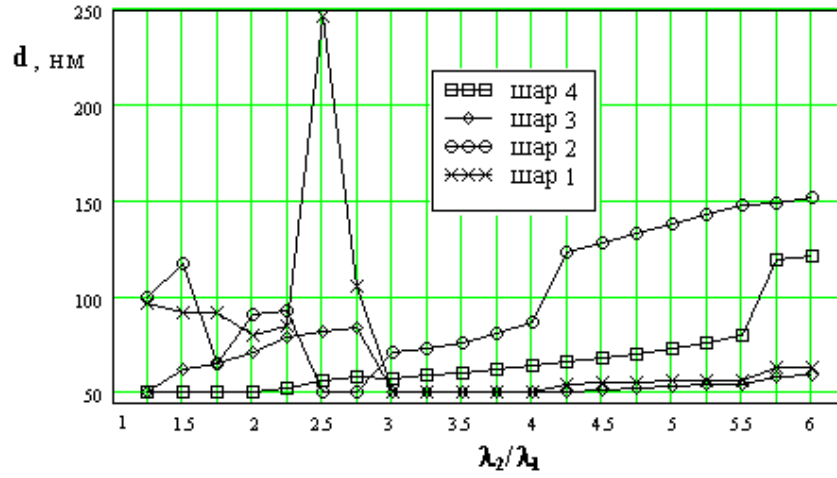


Рис.1. Динаміка зміни оптимальних значень геометричної товщини.

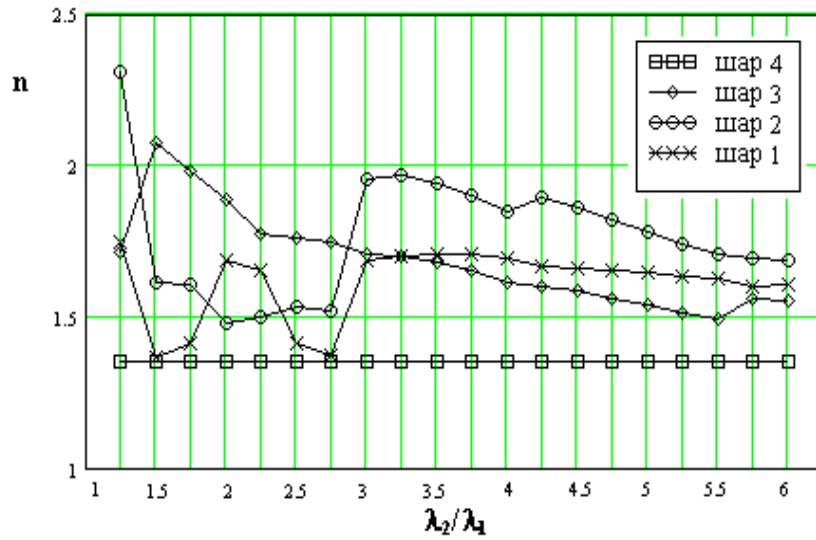


Рис.2. Динаміка зміни оптимальних значень показників заломлення.

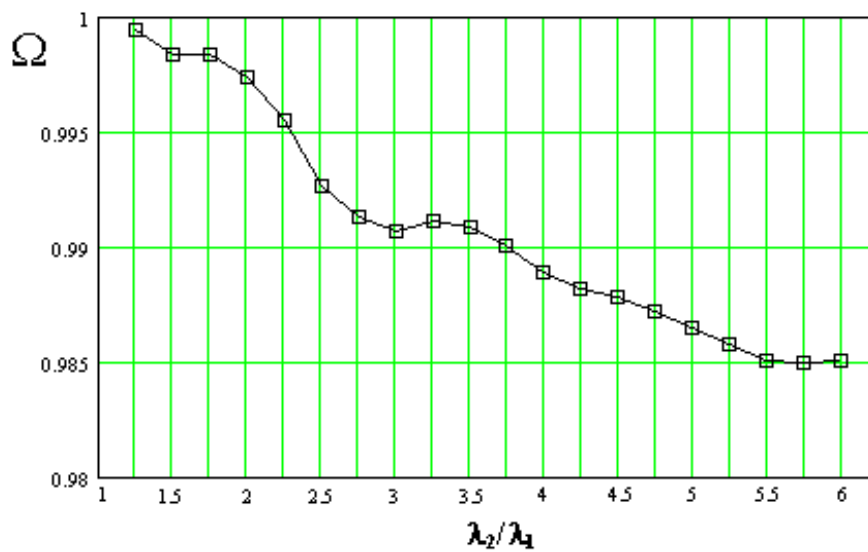


Рис.3. Динаміка зміни функціоналу $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$.

На проміжку (200–800 нм) для структури (21) Ω буде становити 0.9852883, для (22) – $\Omega=0.9830755$, для (23) – $\Omega=0.9836643$, а для описаної вище моделі $\Omega=0.9888550$. Як бачимо, відхід від конструкцій (21)–(23) дозволяє збільшити пропускання в різних спектральних діапазонах.

Дані, наведені графічно на малюнках 2–3, можуть бути взяті за початкові значення при визначенні оптимальних параметрів для структур, для яких відомий перелік компонент з яких вони можуть складатися.

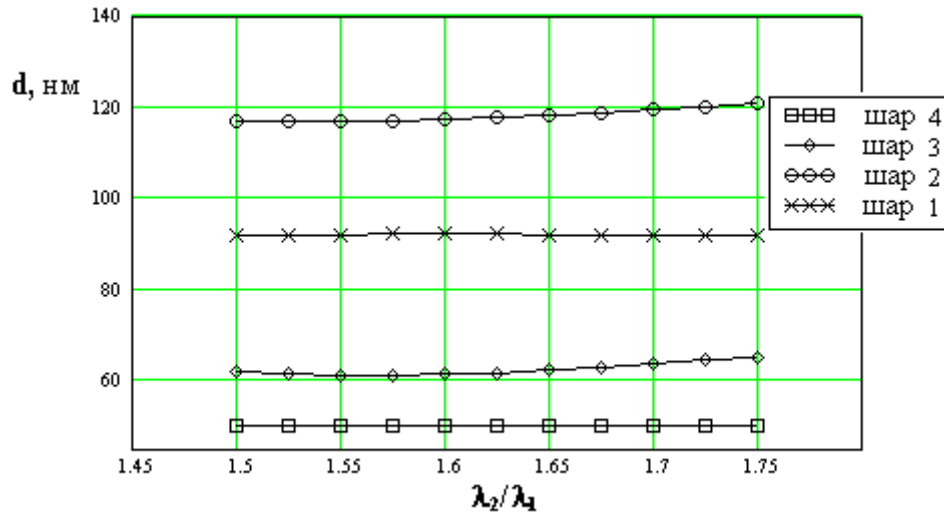


Рис.4. Динаміка зміни оптимальних значень геометричної товщини при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

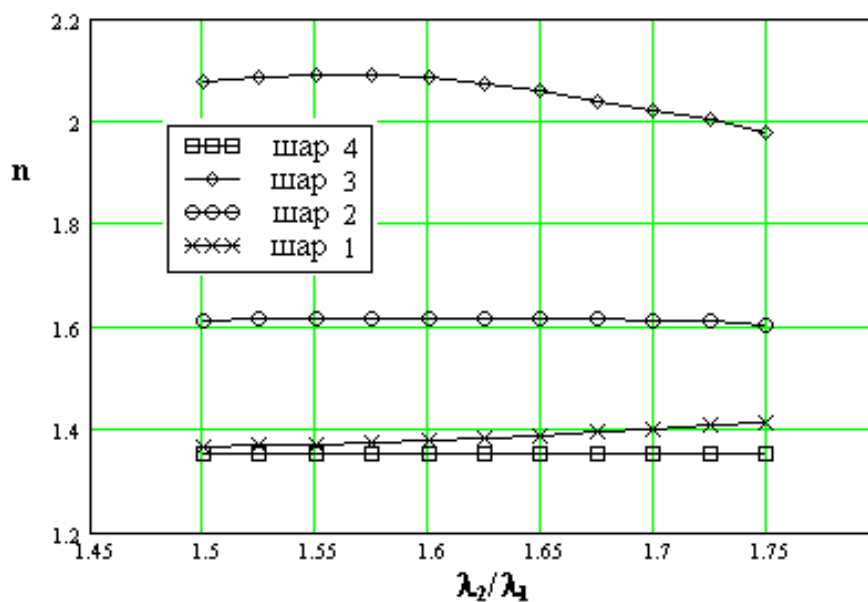


Рис.5. Динаміка зміни оптимальних значень показника заломлення при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

Аналізуючи дані, отримані в результаті експерименту, виявилось, що із збільшенням спектрального інтервалу (λ_1, λ_2) значення функціоналу $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ в основному зменшується. Але на деяких проміжках функціонал $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ збільшується. Так, збільшивши спектральний інтервал з (200–300 нм) до (200–350 нм), значення функціоналу $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ збільшується з 0.9982929 до 0.9983270. Прослідкуємо, як змінюватимуться оптимальні параметри $\bar{n}_{opt}, \bar{d}_{opt}$ і $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ із поступовим збільшенням даного інтервалу, коли λ_2 змінюється від 300 до 350 нм з кроком 0.5 нм (рис. 4–6).

З рисунків 4-5 видно, що оптимальні параметри $\bar{n}_{opt}, \bar{d}_{opt}$ впродовж всього діапазону змінюються незначно. Цікаво виглядає графік значень функціоналу $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ (рис. 6). Як бачимо, він нагадує параболу з вітками опущеними вниз і оптимальним значенням при $\lambda_2=330$ нм.

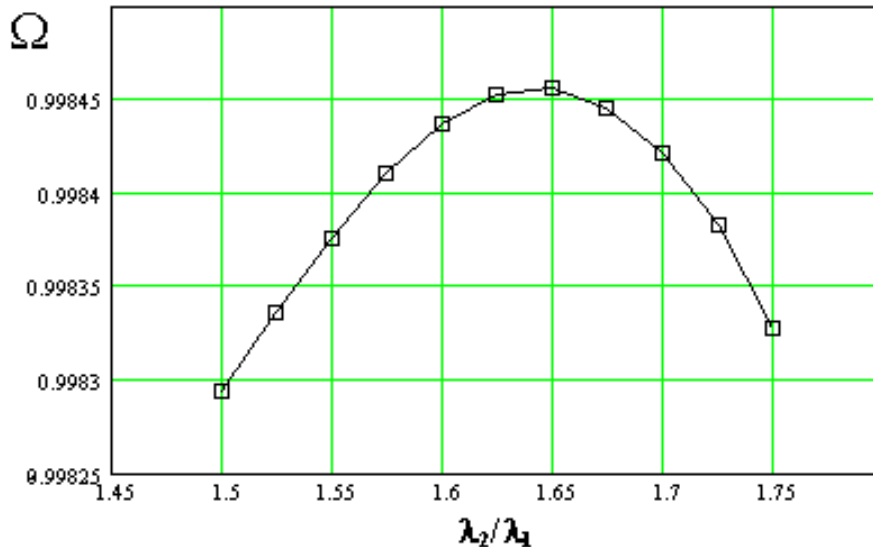


Рис.6. Динаміка зміни функціоналу $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

Проведене дослідження дає можливість висловити наступне твердження для задачі (18)–(20), яке є справедливим для широких діапазонів (рис.3).

Твердження. Функціонал $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ не є строго спадним, але має схильність до спадання.

3.2. Аналіз і порівняння ефективностей методів багатовимірного пошуку.

Найбільшу область збіжності мають методи найскорішого спуску та Поллака-Рібб'єра. Метод найскорішого спуску лише локалізує глобальний максимум (табл.1). Тому його потрібно використовувати разом з іншими методами, які дозволяють в даному околі швидко визначити глобальний максимум. Найкраще в якості такого методу використовувати метод конфігурацій (Хука-Дживса). Якщо ж почати використовувати метод конфігурацій після 15 ітерацій методу найскорішого спуску, то можна досягнути максимум в 148 точках, причому середній час буде становити 3.70 с.

Взагалі кажучи, використання метода конфігурацій в якості другого до іншого методу багатовимірного пошуку дозволяє збільшити ефективність даного методу. Так, поєднання методів Розенброка і конфігурацій забезпечує збіжність в 128 точках за середній час 3.60 с. Навіть використання методу конфігурацій два рази підряд збільшує кількість можливих початкових значень, які дозволяють досягнути максимуму або потрапити в його окіл, з 2 та 18 до 52 та 8 відповідно. Використання методу конфігурацій три рази підряд збільшує їх до 60 та 12 відповідно. Використання методу конфігурацій більшу кількість разів уже не дає потрібного ефекту.

Для деяких методів ефективно використовувати метод конфігурацій не після їх кінцевої збіжності, а після 10-20 ітерацій. В такому поєднанні методи Девідона-Флетчера-Пауелла (10 ітерацій) та конфігурацій дозволяють досягнути максимуму в 138 точках за середній час 4.81 с, а поєднання методів Фіакко-Мак-Кормика (15 ітерацій) та конфігурацій – в 142 точках за середній час 5.16 с.

Інші поєднання методів є менш ефективними.

Висновки. Виходячи з критерію витрати машинного часу та області збіжності, найбільш ефективними для рішення задачі (18)–(20) виявилось поєднання одного із методів

найскорішого спуску, Девідона-Флетчера-Пауелла чи Фіакко–Мак-Кормика з методом конфігурацій (Хука-Дживса).

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Яковлев П.П., Мешков Б.Б.* Проектирование интерференционных покрытий. – М.: Машиностроение, 1987. – 192 с.
2. *Abeles F.* Ann.de Physique. – 1950. V.5. P. 596-640.
3. *Мица О.В.* Оптимізація характеристик оптичних покриттів на основі неоднорідних плівок з різним типом розподілу показника заломлення // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інф. – 2001. – Вип. 6. – ст. 95-99.
4. *Мица А.В., Первак Ю.А., Фекешигази І.В.* Расчет и оптимизация оптических свойств неоднородных пленок на подложках Ge с квадратическим распределением показателя преломления // Харьковская научная ассамблея (14-й международный симпозиум “Тонкие пленки в оптике и электронике”). – Харьков: Контраст, – 2002. – ст. 62-65.
5. *Ляшенко И.Н., Карагодова Е.А., Черникова Н.В., Шор Н.З.* Линейное и нелинейное программирование. – К.: Выща шк., 1975. – 372 с.