

СИНТЕЗ ЧОТИРИШАРОВИХ СТРУКТУР ТА АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ БАГАТОВИМІРНОГО ПОШУКУ

Досліджено оптимальні параметри чотиришарових структур, промодельовано динаміку їх зміни та визначено найбільш ефективні конструкції методів багатовимірного 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 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 : $\epsilon = \epsilon(z)$, $m = m(z)$. 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. Оскільки граничні умови на поверхні розділу для перпендикулярної і паралельної до неї компонент не за-

лежать одна від одної, то s - і p -хвилі також взаємно незалежні. Більше того, якщо провідність середовища дорівнює 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 за площину падіння площину yz . Для TE -хвилі - $E_y = E_z = 0$, $H_x = 0$. Рівняння Максвелла для гармонічної хвилі з частотою ω набудуть вигляду:

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

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = 0;$$

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

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

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

Із цих формул випливає, що H_y , H_z і E_x залежать тільки від y і z . Виключаючи H_y і H_z із (1)-(3), знайдемо

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

де

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

У (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

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

Ліва частина рівняння залежить тільки від y , а права - тільки від z . Звідси випливає, що кожна з них дорівнює 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) випливає, що вираз для компонентів магнітного поля матиме 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 :

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

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

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

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

Оскільки функції $U(z)$ і $V(z)$ задовольняють (12), (13) відповідно, то кожна з них можна зобразити як лінійну комбінацію двох частинних розв'язків $U_1(z), U_2(z)$ та $V_1(z), V_2(z)$. Із (11) можна вивести, що

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

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 визначник матриці M сталий. Фізичний зміст її такий: 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 зі сталим коефіцієнтом заломлення n . Для неї $\varepsilon = \text{const}$, $\mu = \text{const}$, $\alpha = n \cdot \sin(\theta)$, де θ - кут між напрямком поширення хвилі і віссю z . Підставляючи це в (12) і (13), отримаємо:

$$\frac{d^2 U}{dz^2} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)U = 0.$$

$$\frac{d^2 V}{dz^2} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)V = 0.$$

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

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

Тоді

$$V(z) = \frac{1}{ik_0\mu} \frac{dU}{dz} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot \cos(\theta) \cdot [B \cos(k_0 n z \cos(\theta)) - A \sin(k_0 n z \cos(\theta))]. \quad (16)$$

Виберемо такий частинний розв'язок, щоб $U_1(0) = V_2(0) = 0$ і $U_2(0) = V_1(0) = 1$, а також визначивши з (15), (16) що

$$U_0 = A, V_0 = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot \cos(\theta) \cdot B,$$

отримаємо

$$U_1(z) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \cdot \frac{1}{\cos(\theta)} \cdot \sin(k_0 n z \cos(\theta)),$$

$$U_2(z) = \cos(k_0 n z \cos(\theta)),$$

$$V_1(z) = \cos(k_0 n z \cos(\theta)),$$

$$V_2(z) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cdot \cos(\theta) \sin(k_0 n z \cos(\theta)).$$

В оптичному діапазоні частот $\mu = 1$ і $p = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \cdot \cos(\theta) = n \cdot \cos(\theta)$. Враховуючи (5), а також, що геометрична товщина шару дорівнює d (тобто z вибираємо таким, що дорівнює d), можемо записати характеристичну матрицю однорідної діелектричної плівки:

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

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

Розглянемо випадок, коли напрям поширення випромінювання збігається 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]:

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

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]:

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

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 зображається у вигляді [3]:

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

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 $1.35 \leq n_j \leq 2.6$, $50 \text{ нм} \leq d_j \leq 750 \text{ нм}$, $i = \overline{1, 4}$, $\Delta\lambda = 5 \text{ нм}$, $\lambda_1 = 200 \text{ нм}$.

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-Рібб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко-Мак-Кормика, Грінстадта).

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 функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$.

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 функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$.

Як бачимо, певної закономірності в розміщенні оптимальних параметрів немає. Із зміною λ_2/λ_1 вони можуть з'являтися у 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.

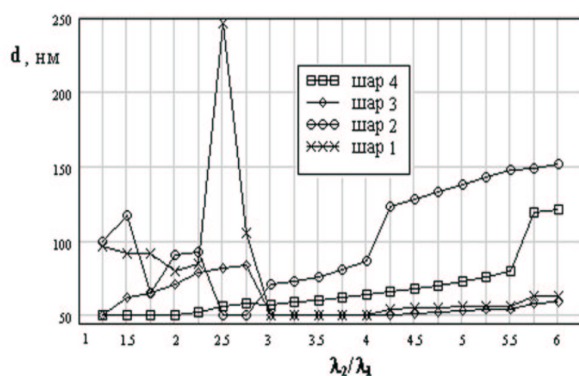


Рис.1. Динаміка зміни оптимальних значень геометричної товщини.

На проміжку (200-800 нм) для структури (5) Ω буде становити 0.9852883, для (6) - $\Omega=0.9830755$, для (7) - $\Omega=0.9836643$, а для описаної вище моделі $\Omega=0.9888550$. Як бачимо, відхід від конструкцій (5)-(7) дозволяє збільшити пропускання в різних спектральних діапазонах. Дані, наведені графічно на рисунках 2-3, можуть бути взяті за початкові значення при визначенні оптимальних параметрів для структур, для яких відомий перелік компонент, з яких вони можуть складатися.

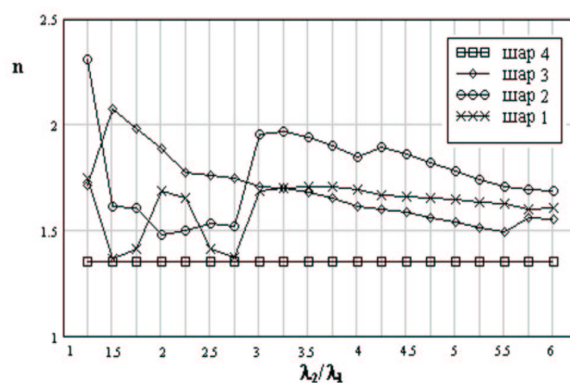


Рис.2. Динаміка зміни оптимальних значень показників заломлення.

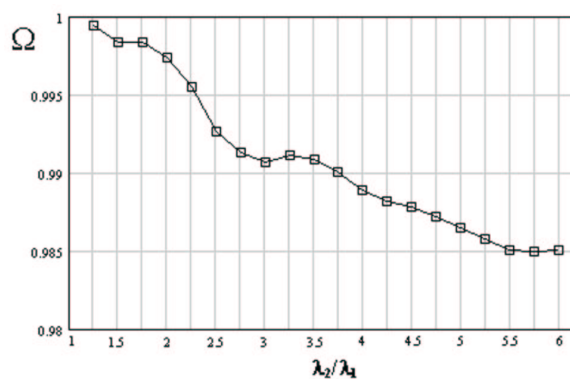


Рис.3. Графік функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$.

Аналізуючи дані, отримані в результаті експерименту, виявилось, що із збільшенням спектрального інтервалу (λ_2/λ_1) значення функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ в основному зменшується. Але на деяких проміжках функція $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ збільшується. Так, збільшивши спектральний інтервал з (200-300 нм) до (200-350 нм), значення функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ 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 функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ (рис. 6). Як бачимо, він нагадує параболу з вітками опущеними вниз і оптимальним значенням при $\lambda_2 = 330$.

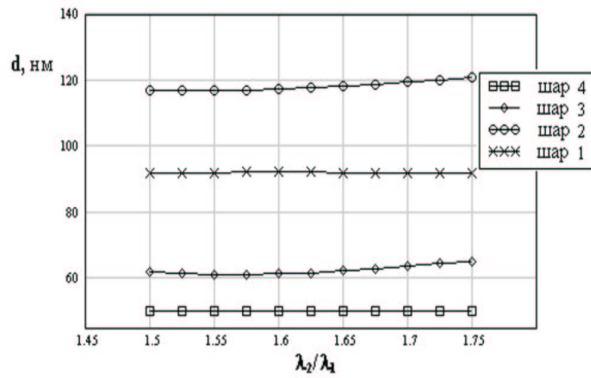


Рис.4. Динаміка зміна оптимальних значень геометричної товщини при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

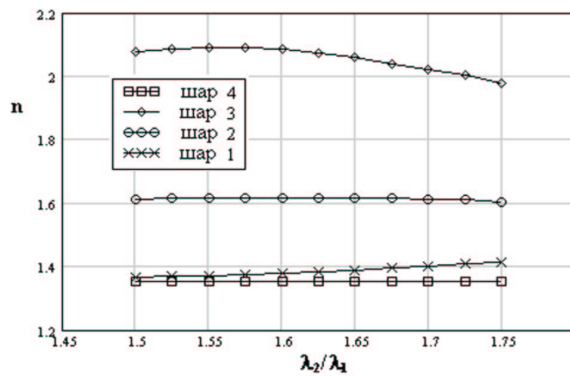


Рис.5. Динаміка зміни оптимальних значень показника заломлення при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

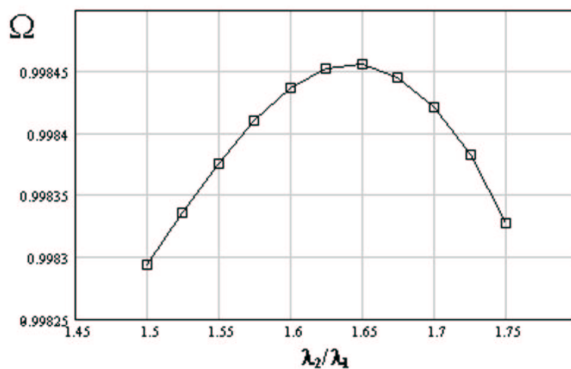


Рис.6. Графік функції $\Omega(\lambda_2/\lambda_1)$ при зміні λ_2 від 300 нм до 350 нм.

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

3.2. Аналіз і порівняння ефективностей методів багатовимірного пошуку.

За початкові значення вибиралось 256 точок із різних підобластей. Для кожного із методів багатовимірного пошуку визначались кількість точок, які досягнули максимуму, та середня витрата машинного часу на пошук. Таблиця 1.

Методи	К-сть точок ($10^{-6} - 10^{-4}$)	Середн. час (с.)
Конфігурацій	2	1.92
Розенброка	76	1.79
Найскор. спуску	143	6.39
Флетчера-Рівса	0	-
Поллака-Рібб'єра	0	-
Девід.-Флетч.-Пауелла	124	22.37
Гольдфарба	1	3.02
Фіакко-Мак-Кормика	43	9.11
Грінстадта	1	4.22

Оскільки багато разів деякі методи досягають максимуму лише з точністю $10^{-6} - 10^{-4}$, тобто локалізують максимум, то наведено результати для точності $10^{-6} - 10^{-4}$ (табл.1) і окремо для точності 10^{-7} (табл.2).

Розглядаючи методи прямого пошуку, можемо відзначити наступне: якщо при дослідженні неоднорідних плівок (3 шукані параметри) був ефективнішим метод конфігурацій (Хука-Дживса) [3, 4], то при дослідженні чотиришарових структур (8 шуканих параметрів) ефективнішим виявився метод Розенброка. Він і швидше збігається, і область можливих початкових значень є більшою.

Серед методів змінної метрики знову, як і у випадку з неоднорідними плівками, найефективнішим виявився метод Девідона-Флетчера-Пауелла. За областю збіжності серед усіх методів він є третім, поступаючись лише методам найкорішого спуску та Поллака-Рібб'єра, але середня витрата машинного часу на пошук є найбільшою.

Порівнюючи методи спряжених градієнтів, слід відзначити, що метод Поллака-Рібб'єра має область збіжності на

14 ÷ більшу, ніж метод Флетчера-Рівса, але час збіжності його є на 21 ÷ гіршим. Методи Поллака-Рібб'єра та Флетчера-Рівса знаходять глобальний максимум з потрібною точністю.

Таблиця 2.

Методи	К-сть точок (10^{-7})	Середн. час (с.)
Конфігурацій	18	2.03
Розенброка	10	1.67
Найскор. спуску	0	-
Флетчера-Рівса	125	9.25
Поллака-Рібб'єра	142	11.18
Девід.-Флетч.- Пауелла	2	14.78
Гольдфарба	0	-
Фіакко-	0	-
Мак-Кормика		
Грінстадта	0	-

Найбільшу область збіжності мають методи найшвидшого спуску та Поллака-Рібб'єра. Метод найшвидшого спуску лише локалізує глобальний максимум (табл.1). Тому його потрібно використовувати разом із 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 ітерації методу найшвидшого спуску, то можна досягнути максимуму в 148 точках, причому середній час буде становити 3.70 с.

Взагалі кажучи, використання методу конфігурацій як другого до іншого методу багатовимірного пошуку дозволяє збільшити ефективність даного методу. Так, поєднання методів Розенброка і конфігурацій забезпечує збіжність у 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. У 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 ефективним для розв'язання задачі (1)-(4) виявилось поєднання одного із методів найшвидшого 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.— С.95—99.
4. Мица А.В., Первак Ю.А., Фекешгази И.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.— С.62—65.
5. Ляшенко И.Н., Карагодова Е.А., Черникова Н.В., Шор Н.З. Линейное и нелинейное программирование.— К.: Вища школа, 1975.— 372 с.

Стаття надійшла до редколегії 18.07.2002