УДК 519.87; 535:345.67

П.И. СТЕЦЮК, А.В. МИЦА

О ВЫЧИСЛЕНИИ ГРАДИЕНТА В ЗАДАЧЕ СИНТЕЗА ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ*

Рассмотрены способы вычисления градиента сложной многоэкстремальной функции, связанной с задачей синтеза многослойных оптических покрытий. Анализируются недостатки и преимущества конечно-разностного и аналитического способов нахождения градиента.

Проблема синтеза (конструирования) – одна из наиболее труднорешаемых в области теории интерференционных покрытий [1,2]. Конструирование интерференционных покрытий с практической точки зрения представляет большой интерес, так как позволяет определить оптимальные показатели преломления и толщины слоев интерференционных покрытий, обеспечивающих наилучшее приближение к заданным оптическим свойствам, например, требуемому в необходимой области спектра распределению коэффициентов пропускания (отражения) оптического элемента.

Для практики значительный интерес представляют компьютерные (численные) способы синтеза тонкослойных покрытий [1–3], основанные на варьировании толщин слоев покрытия для обеспечения минимума некоторой функции качества оптического покрытия. Если одновременно с толщинами оптимизируются показатели преломления слоев, то их значения подчиняют дополнительному условию, ограниченному областью реально существующих показателей преломления. Основное преимущество компьютерных методов – универсальность. Они не требуют решения сложных нелинейных уравнений, с которыми неизбежно сопряжена аналитическая теория синтеза [1]. Компьютерные методы синтеза позволяют решать задачу при-

* Работа выполнена в рамках гранта Президента Украины для одаренной молодежи №19 (распоряжение Президента Украины от 12.01.2004 г. №6/2004-рп).

менительно к широкому диапазону оптических характеристик покрытий, например, для коэффициента отражения R или коэффициента пропускания T, угловых зависимостей R и T, при наличии поглощения и дисперсии оптических констант слоев.

Основной недостаток компьютерных методов синтеза интерференционных покрытий – как правило, они ориентированы на решение многоэкстремальных оптимизационных задач. В силу этого компьютерные методы часто требуют больших затрат машинного времени, чтобы гарантировать нахождение удовлетворительного решения задачи синтеза интерференционного покрытия. Кроме того, еще большие затраты требуются для вывода об отсутствии решения в рассматриваемом классе покрытий. В силу этого при решении конкретной задачи синтеза актуальной есть проблема выбора наиболее эффективного метода и оценочной функции [2,3].

Пусть некоторая задача синтеза интерференционного покрытия связана с оптимизацией непрерывной многоэкстремальной функции $F(\vec{n},\vec{d})$, где $\vec{n}$ и $\vec{d}$ – соответственно векторы неизвестных коэффициентов преломления и геометрических толщин однородных слоев. Для нахождения локальных экстремумов $F(\vec{n},\vec{d})$ можно применять методы нулевого порядка (используют только значение оптимизируемой функции в точке), либо методы первого порядка (используют значение функции и значение ее градиента, когда оптимизируемая функция гладкая, или значение обобщенного градиента, когда оптимизируемая функция негладкая). Применение этих методов подразумевает наличие некоторой процедуры (оракула), которая обеспечивает достаточно эффективное вычисление значения функции $F(\vec{n},\vec{d})$ в некоторой заданной точке (при использовании методов нулевого порядка), либо значения функции $F(\vec{n},\vec{d})$ и ее (обобщенного) градиента в заданной точке (при использовании методов первого порядка).

При решении проблемы выбора наиболее эффективного метода решения задачи синтеза оптического покрытия всегда актуальным есть вопрос построения "оптимального" оракула как для методов нулевого порядка, так и для методов первого порядка. Цель работы – рассмотрение способов вычисления значения функции и ее градиента для конкретного вида функции $F(\vec{n},\vec{d})$, которая связана с нахождением оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий [2,3].

Пусть многослойное оптическое покрытие (МОП) состоит из N плоских однородных слоев и характеризуется показателем преломления внешней среды n_0 и показателем преломления подкладки n_s. Каждый k-й слой ($i = 1,2,...,N$) характеризуется своим значением коэффициента преломления n_k и геометрической толщины d_k. Следовательно, векторы коэффициентов преломления и геометрических толщин будут следующими: $\vec{n} = (n_1,...,n_N)^T$, $\vec{d} = (d_1,...,d_N)^T$.

Пусть электромагнитная волна длиной λ падает под углом θ к нормали поверхности МОП и ее энергия не теряется при прохождении через МОП. Пусть задан дискретный спектр длин волн λ_j, $j = 1,...,L$, и соответствующие им коэффициенты пропускания излучения T_j^θ, $j = 1,...,L$, которые требуется обеспечить на выходе из МОП.

Задача нахождения оптимальных параметров $\vec{n}^*$ и $\vec{d}^*$, которые для заданного спектра длин волн позволяют обеспечить наилучшие (по критерию среднеквадратичного отклонения) коэффициенты пропускания оптического элемента, связана с нахождением глобального минимума функции

$$F(\vec{n},\vec{d}) = \sum_{j=1}^{L}\left(T_j^\theta - T(\vec{n},\vec{d},\lambda_j,\theta)\right)^2 = \sum_{i=1}^{L}\left(T_j^\theta - T_j\right)^2 . \qquad (1)$$

Здесь коэффициент пропускания $T_j = T(\vec{n},\vec{d},\lambda_j,\theta)$ рассчитывается по следующей формуле:

$$T_j = \frac{4}{2 + \dfrac{n_0}{n_s}m_{11}^2 + \dfrac{n_s}{n_0}m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \dfrac{1}{n_0 n_s}m_{21}^2}, \qquad (2)$$

где n_0 и n_s – показатели преломления внешней среды и подкладки соответственно; m_{11}, m_{12}, m_{21}, m_{22} – коэффициенты характеристической (2×2)-матрицы $M_j = M(\vec{n},\vec{d},\lambda_j,\theta)$, которая вычисляется по следующему правилу:

$$\begin{Vmatrix} m_{11} & \mathbf{i}m_{12} \\ \mathbf{i}m_{21} & m_{22} \end{Vmatrix} = \prod_{k=1}^{N} \begin{Vmatrix} \cos\left(\dfrac{2\pi n_k d_k \cos\theta}{\lambda_j}\right) & -\dfrac{\mathbf{i}}{n_k}\sin\left(\dfrac{2\pi n_k d_k \cos\theta}{\lambda_j}\right) \\ -\mathbf{i}n_k \sin\left(\dfrac{2\pi n_k d_k \cos\theta}{\lambda_j}\right) & \cos\left(\dfrac{2\pi n_k d_k \cos\theta}{\lambda_j}\right) \end{Vmatrix}, \qquad (3)$$

где $\mathbf{i}$ – "мнимая" (комплексная) единица.

Для удобства дальнейших изложений будем использовать обозначение $\Lambda_j = \dfrac{\lambda_j}{2\pi\cos\theta}$. Тогда характеристическая матрица для МОП может быть переписана в виде

$$M_j = M(\vec{n},\vec{d},\Lambda_j) = \prod_{k=1}^{N} M(n_k, d_k, \Lambda_j) = \prod_{k=1}^{N} M_j^k , \qquad (4)$$

где $M_j^k = M\left(n_k, d_k, \Lambda_j\right)$ – характеристическая $\left(2\times 2\right)$-матрица k-го слоя ($k = 1,\dots, N$) и имеет следующий вид:

$$M_j^k = M(n_k, d_k, \Lambda_j) = \begin{Vmatrix} \cos\dfrac{n_k d_k}{\Lambda_j} & -\dfrac{\mathbf{i}}{n_k}\sin\dfrac{n_k d_k}{\Lambda_j} \\ -\mathbf{i}n_k \sin\dfrac{n_k d_k}{\Lambda_j} & \cos\dfrac{n_k d_k}{\Lambda_j} \end{Vmatrix}. \quad (4)$$

Функция $F(\vec{n},\vec{d})$ имеет достаточно сложный вид, и при построении "оптимальных" оракулов требуется обеспечить экономное по числу операций вычисление в заданной точке как значения самой функции $F(\vec{n},\vec{d})$, так и ее градиента $\nabla F(\vec{n},\vec{d})$. Очевидно, что непосредственное вычисление значения функции $F(\vec{n},\vec{d})$ в заданной точке по формулам (1) – (4) будет "оптимальным" оракулом для методов нулевого порядка. На основе этого оракула можно построить оракул и для методов первого порядка, основываясь на конечно-разностном способе вычисления градиента $\nabla F(\vec{n},\vec{d})$. Такой подход используется при решении задач синтеза МОП с помощью различного рода методов первого порядка в [3,4] (в основном методов квазиньютоновского типа). Однако такой конечно-разностный способ имеет ряд недостатков. Во-первых, разномасштабность параметров $\vec{n}$ и $\vec{d}$ требует достаточно аккуратного обращения с малыми величинами конечных приращений Δn и Δd при построении правил остановки итерационных процессов первого порядка. В реальных задачах коэффициенты преломления составляют несколько единиц, а геометрические толщины – порядка нескольких сотен нанометров (10^{-9} м.). Во-вторых, точность нахождения локального экстремума существенно зависит от используемых значений Δn и Δd. Это не даст возможности найти оптимальные параметры $\vec{n}^*$ и $\vec{d}^*$ с точностью, близкой к точности вычисления градиентов в точках. Попытка осуществить такой расчет будет характеризоваться расходимостью градиентного процесса в окрестности локального экстремума. Это связано с выбором неправильных направлений движения для градиентного процесса из-за достаточно "грубого" вычисления градиента $\nabla F(\vec{n},\vec{d})$.

В-третьих, что самое главное, конечно-разностный способ не будет гарантировать "оптимального" оракула для методов первого порядка. Поэтому для методов первого порядка оракул естественно строить таким образом, чтобы параллельно с вычислением значения функции $F(\vec{n},\vec{d})$ в заданной точке вычислялся и ее градиент $\nabla F(\vec{n},\vec{d})$. Для этой цели подходящим будет аналитический способ вычисления градиента $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$. На его основе можно построить "оптимальный" по количеству операций оракул для методов первого порядка.

Аналитический способ вычисления градиента $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$ состоит в следующем. Непосредственное дифференцирование функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ дает такие формулы для вычисления компонент градиента $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$:

$$\frac{\partial F}{\partial n_i} = 2\sum_{j=1}^{L}\left(T_j^{\theta} - T_j\right)\frac{\partial T_j}{\partial n_i},\ i = 1,\dots,N, \tag{5}$$

$$\frac{\partial F}{\partial d_i} = 2\sum_{j=1}^{L}\left(T_j^{\theta} - T_j\right)\frac{\partial T_j}{\partial d_i},\ i = 1,\dots,N. \tag{6}$$

Следовательно, для аналитического вычисления $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$ достаточно для всех $i = 1,\dots,N$ уметь находить аналитические выражения для производных $\frac{\partial T_j}{\partial n_i}$ и $\frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ при фиксированном значении Λ_j. Используя формулу (2) эти производные легко найти для каждого i ($i = 1,\dots,N$) по следующему правилу:

$$\frac{\partial T_j}{\partial n_i} = \frac{8\left(\frac{n_0}{n_s}m_{11}\frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} + \frac{n_s}{n_0}m_{22}\frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} + n_0 n_s m_{12}\frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} + \frac{1}{n_0 n_s}m_{21}\frac{\partial m_{21}}{\partial n_i}\right)}{\left(2 + \frac{n_0}{n_s}m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0}m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s}m_{21}^2\right)^2}, \tag{7}$$

$$\frac{\partial T_j}{\partial d_i} = \frac{8\left(\frac{n_0}{n_s}m_{11}\frac{\partial m_{11}}{\partial d_i} + \frac{n_s}{n_0}m_{22}\frac{\partial m_{22}}{\partial d_i} + n_0 n_s m_{12}\frac{\partial m_{12}}{\partial d_i} + \frac{1}{n_0 n_s}m_{21}\frac{\partial m_{21}}{\partial d_i}\right)}{\left(2 + \frac{n_0}{n_s}m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0}m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s}m_{21}^2\right)^2}, \tag{8}$$

где $\frac{\partial m_{11}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{12}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{21}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{22}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{11}}{\partial d_i}$, $\frac{\partial m_{12}}{\partial d_i}$, $\frac{\partial m_{21}}{\partial d_i}$, $\frac{\partial m_{22}}{\partial d_i}$ – коэффициенты следующих (2×2)-матриц:

$$\frac{\partial M_j}{\partial n_i} = \begin{Vmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} & \mathbf{i}\frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} \\ \mathbf{i}\frac{\partial m_{21}}{\partial n_i} & \frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} \end{Vmatrix},\quad \frac{\partial M_j}{\partial d_i} = \begin{Vmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial d_i} & \mathbf{i}\frac{\partial m_{12}}{\partial d_i} \\ \mathbf{i}\frac{\partial m_{21}}{\partial d_i} & \frac{\partial m_{22}}{\partial d_i} \end{Vmatrix}.$$

Матрицы $\dfrac{\partial M_j}{\partial n_i}$ и $\dfrac{\partial M_j}{\partial d_i}$ легко рассчитать используя соотношения (3) и (4). Так, например, матрицы $\dfrac{\partial M_j}{\partial d_i}$ рассчитываются с помощью следующих соотношений:

$$\frac{\partial M_j}{\partial d_1} = \frac{\partial M_j^1}{\partial d_1}\left(\prod_{k=2}^{N} M_j^k\right),\ \frac{\partial M_j}{\partial d_N} = \left(\prod_{k=1}^{N-1} M_j^k\right)\frac{\partial M_j^N}{\partial d_N},$$

$$\frac{\partial M_j}{\partial d_i} = \left(\prod_{k=1}^{i-1} M_j^k\right)\frac{\partial M_j^i}{\partial d_i}\left(\prod_{k=i+1}^{N} M_j^k\right),\ i = 2,\ldots,N-1,$$

где (2×2)-матрицы $\dfrac{\partial M_j^i}{\partial d_i}$ для каждого $i = 1,\ldots,N$ имеют следующий вид:

$$\frac{\partial M_j^i}{\partial d_i} = \begin{Vmatrix} -\dfrac{n_i}{\Lambda_j}\sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} & -\mathbf{i}\dfrac{1}{\Lambda_j}\cos\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} \\ -\mathbf{i}\dfrac{n_i^2}{\Lambda_j}\sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} & -\dfrac{n_i}{\Lambda_j}\sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} \end{Vmatrix}.$$

Аналогично рассчитываются и матрицы $\dfrac{\partial M_j}{\partial n_i}$, где

$$\frac{\partial M_j^i}{\partial n_i} = \begin{Vmatrix} -\dfrac{d_i}{\Lambda_j}\sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} & -\mathbf{i}\left(\dfrac{d_i}{n_i\Lambda_j}\cos\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} - \dfrac{1}{n_i^2}\cos\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j}\right) \\ -\mathbf{i}\left(\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j}\cos\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} + \sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j}\right) & -\dfrac{d_i}{\Lambda_j}\sin\dfrac{n_i d_i}{\Lambda_j} \end{Vmatrix}.$$

Аналитический способ вычисления градиента функции $F(\vec{n},\vec{d})$ по формулам (5) – (8) свободен от недостатков, свойственных конечно-разностному способу. Он позволяет вычислять точное (в пределах компьютерной арифметики) значение градиента $\nabla F(\vec{n},\vec{d})$ в точке $(\vec{n}_k,\vec{d}_k)$. Аналитический способ целесообразней использовать, чем конечно-разностный, когда требуется высокая точность по нахождению оптимальных параметров $(\vec{n}^*,\vec{d}^*)$. Кроме того, на его основе можно построить "оптимальный" по количеству арифметических операций оракул для использования методов первого порядка при решении задачи синтеза многослойного оптического покрытия.

Соотношения (5) – (8) могут быть использованы при расчете обобщенного градиента для негладких функций следующего вида:

$$F_1(\vec{n},\vec{d}) = \sum_{j=1}^{L} \left| T_j^{\theta} - T(\vec{n},\vec{d},\lambda_j,\theta) \right|,$$

или же

$$F_2(\vec{n},\vec{d}) = \max_{j=1,..,L} \left| T_j^{\theta} - T(\vec{n},\vec{d},\lambda_j,\theta) \right|.$$

Здесь $|\bullet|$ – модуль (абсолютная величина) числа. Для нахождения локальных экстремумов функций $F_1(\vec{n},\vec{d})$ и $F_2(\vec{n},\vec{d})$ целесообразно использовать эффективные варианты методов недифференцируемой оптимизации [5].

П.І. Стецюк, О.В. Міца

ПРО ОБЧИСЛЕННЯ ГРАДІЄНТА У ЗАДАЧІ СИНТЕЗУ ОПТИЧНИХ ПОКРИТТІВ

Розглянуті способи обчислення градієнта складної багатоекстремальної функції, яка пов'язана з задачею синтезу багатошаруватих оптичних покриттів. Аналізуються недоліки і переваги кінцево-різницевого та аналітичного способів знаходження градієнта.

P.I. Stetsyuk, O.V. Mitsa

CALCULATION OF A GRADIENT IN AN OPTICAL COATING SYNTHESIS PROBLEM

The paper considers the methods for calculation of a gradient of complex multiextreme function related to a problem of synthesis of multilayer optical coatings. Drawbacks and advantages of the finite-difference approximation method and the analytical method of finding of a gradient are analized.

1. *Фурман Ш.А.* Тонкослойные оптические покрытия. – Л.: Машиностроение, 1977. – 264 с.
2. *Furman Sh.A., Tikhonravov A.V.* Basics of optics of multiplayer systems. – Editions Frontiers, Gif-sur Yvette, 1992. – 242 p.
3. *Міца О.В.* Математичне моделювання оптичних шаруватих покриттів та оптимізація їх структури: Автореф. дис. … канд. техн. наук. Тернопільський держ. техн. ун-т ім. Івана Пулюя. – Тернопіль, 2004. – 20 с.
4. *Міца О.В., Стецюк П.І.* Задача знаходження оптимальних параметрів однорідного оптич-ного покриття // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. – С. 127–134.
5. *Шор Н.З.* Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. – Киев: Наук. думка, 1979. – 199 с.

Получено 25.03.2005