УДК 519.87; 535:345.67

О.В. МІЦА., П.І. СТЕЦЮК

ЗАДАЧА ЗНАХОДЖЕННЯ ОПТИМАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ ОДНОРІДНОГО ОПТИЧНОГО ПОКРИТТЯ

Наведена багатоекстремальна задача нелінійного програмування для знаходження оптимальних параметрів однорідного оптичного покриття. Проведено порівняльний чисельний аналіз ряду методів нульового та першого порядку для знаходження її глобального екстремуму.

Вступ. За останні роки суттєвих успіхів досягнуто в області технологій отримання плівок та тонкоплівкових систем із різними оптичними властивостями [1]. Це значною мірою стимулювало розвиток математичних методів розрахунків інтерференційних покриттів. Існує велика кількість методів, які орієнтовані головним чином на розв'язання задач у спеціальних випадках. Найбільш універсальним підходом для знаходження параметрів оптичних плівок та тонкоплівкових систем є постановка цих задач у формі оптимізаційних задач математичного програмування, де невідомими змінними є шукані параметри, а цільова функція вибирається таким чином, щоб можна було забезпечити найкращу близькість до тих оптичних властивостей, яким має задовольняти оптична плівка чи тонкоплівкова система [1].

Для розв'язання конкретних оптимізаційних задач (як правило, багатоекстремальних) застосовуються методи багатовимірного пошуку екстремумів нелінійних функцій без обмежень [2–5]. Для ряду відомих методів нульового та першого порядку, взятих з монографій [2–5], у роботі проведено їх порівняльний аналіз при знаходженні глобального екстремуму в задачі нелінійного програмування, яка пов'язана зі знаходженням оптимальних параметрів однорідного оптичного покриття.

1. Математична модель задачі. Однорідна оптична плівка характеризується показником заломлення n та геометричною товщиною d. Коефіцієнт пропускання через дану плівку залежить від довжини хвилі λ та визначається за формулою

$$T(n,d,\lambda)=\frac{4}{2+\frac{n_0}{n_s}\cos^2\delta(n,d,\lambda)+\frac{n_s}{n_0}\cos^2\delta(n,d,\lambda)+\frac{n_0n_s}{n}\sin^2\delta(n,d,\lambda)+\frac{n}{n_0n_s}\sin^2\delta(n,d,\lambda)},$$

де $\delta(n,d,\lambda)=\frac{2\pi nd\cos\theta}{\lambda}$; n_0, n_S – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладинки відповідно; θ – кут між напрямом поширення випромінювання та нормаллю до поверхні розділу.

Розглянемо випадок, коли θ=0. Тоді

$$T(n,d,\lambda)=\frac{4}{2+\left(\frac{n_0}{n_s}+\frac{n_s}{n_0}\right)\cos^2\frac{2\pi nd}{\lambda}+\left(\frac{n_0n_s}{n}+\frac{n}{n_0n_s}\right)\sin^2\frac{2\pi nd}{\lambda}}.$$

Математичну модель задачі знаходження оптимальних параметрів однорідного оптичного покриття сформулюємо у формі задачі нелінійного програмування:

$$\max_{n,d} F(n,d)=\left(\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}v(\lambda_i)\cdot T^2(n,d,\lambda_i)\right)^{1/2}, \qquad (1)$$

при обмеженнях

$$\underline{n}\le n\le\overline{n},\ \underline{d}\le d\le\overline{d}, \qquad (2)$$

де L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2; $v(\lambda_i)$ – додатні вагові коефіцієнти; $\underline{n}$, $\overline{n}$ та $\underline{d}$, $\overline{d}$ - відповідно нижні та верхні границі на невідомі параметри показника заломлення та геометричну товщину однорідної оптичної плівки. При рівномірному поділі спектрального інтервалу $[\lambda_1,\lambda_2]$ з кроком $\Delta\lambda$ число точок буде дорівнювати $L=\frac{\lambda_2-\lambda_1}{\Delta\lambda}+1$.

Задача (1)-(2) має наступний зміст. Необхідно знайти такі значення показника заломлення n та геометричної товщини d для однорідної оптичної плівки, щоб для заданої сітки із спектрального діапазону $[\lambda_1,\lambda_2]$ зважене середньоквадратичне значення коефіцієнта пропускання було максимальним.

Задача (1)-(2) є багатоекстремальною задачею нелінійного програмування з обмеженнями на змінні n та d . За допомогою заміни змінних

$$n(x_1)=\underline{n}\cos^2 x_1+\overline{n}\sin^2 x_1,\quad d(x_2)=\underline{d}\cos^2 x_2+\overline{d}\sin^2 x_2$$

задача (1)-(2) зводиться до задачі безумовної мінімізації нелінійної функції

$$\max\{f(x_1,x_2)=F(n(x_1),d(x_2))\}. \tag{3}$$

Задача (3) є складнішою за задачу (1)-(2), враховуючи, що заміни змінних $n(x_1)$ та $d(x_2)$ породжують додаткові екстремуми. Зате для знаходження екстремумів задачі (3) можно використовувати весь арсенал чисельних методів безумовної оптимізації.

У роботі проведено чисельне дослідження відомих методів нульового та першого порядків [2-5] для знаходження екстремумів задачі (3). При дослідженні вибирались наступні значення параметрів: $\underline{n}=1.35$, $\overline{n}=2.6$, $\underline{d}=50\,нм$, $\overline{d}=750\,нм$, $\Delta\lambda=5\,нм$, $\lambda_1=200\,нм$, $\lambda_2=1000\,нм$, n_0=1.0, n_S=1.51 [6-7].

2. Обчислювальний експеримент. Для знаходження оптимальних параметрів випробувано наступні методи багатовимірного пошуку екстремумів нелінійних функцій без обмежень: метод конфігурацій (Хука - Дживса), метод найскорішого спуску, методи спряжених градієнтів (Флетчера - Рівса, Поллака - Рібб'єра), методи змінної метрики (Девідона - Флетчера - Пауелла, Гольдфарба, Фіакко – Мак-Кормика, Грінстадта) та *r*-алгоритм в Н-формі [3]. Серед них перший є методом нульового порядку (використовує тільки значення функції в точках), а всі інші є методами першого порядку (використовують значення функції та значення градієнта в точках).

Для оцінки ефективності методів вибрано такі критерії: середню витрату машинного часу методом на пошук екстремуму та кількість тих початкових значень, з яких метод збігається до глобального максимуму. Початкові наближення вибирались наступним чином: показник заломлення $n=1.35+0.07\cdot i$ (i=0…15) та геометрична товщина $d=500+400\cdot j$ (j=0...15). Тобто всього 256 (16·16) точок.

Для всіх методів першого порядку пошук мінімуму функції в заданому на ітерації напрямку реалізований згідно з правилом "золотого перерізу". Критерієм припинення ітерацій для всіх методів була умова

$$\frac{\left|f\left(x^{(k+1)}\right)-f\left(x^{(k)}\right)\right|}{f\left(x^{(k+1)}\right)}<\varepsilon, \tag{4}$$

де $x^{(k)}$ – отримане значення на k-й ітерації.

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

3. Результати експерименту. Першим розглянемо випадок, коли вагові коефіцієнти функціоналу $F(n,d)$ вибрані за рівномірним розподілом, тобто $v(\lambda_i)=1$, $i=1,...,L$. Значення ε в (4) (параметр для критерію припинення ітерацій методів) вибиралось рівним 10^{-7}.

Внаслідок експерименту отримано, що найбільше значення функції (1) в досліджуваній області становить 0.9821362 і досягається при значенні показника заломлення $n_1^* = 1.35$ та геометричній товщині $d_1^* = 121.6$. Крім даного глобального максимуму існують ще два локальні максимуми: $n_2^* = 1.35$, $d_2^* = 482.3$ *нм*, $F(n_2^*, d_2^*) = 0.9773014$ та $n_3^* = 1.35$, $d_3^* = 750.0$ *нм*, $F(n_3^*, d_3^*) = 0.9773014$. Поверхні рівня функції $F(n,d)$ показані на рис.1, де відповідними номерами (1, 2, 3) позначені точки всіх трьох екстремумів.

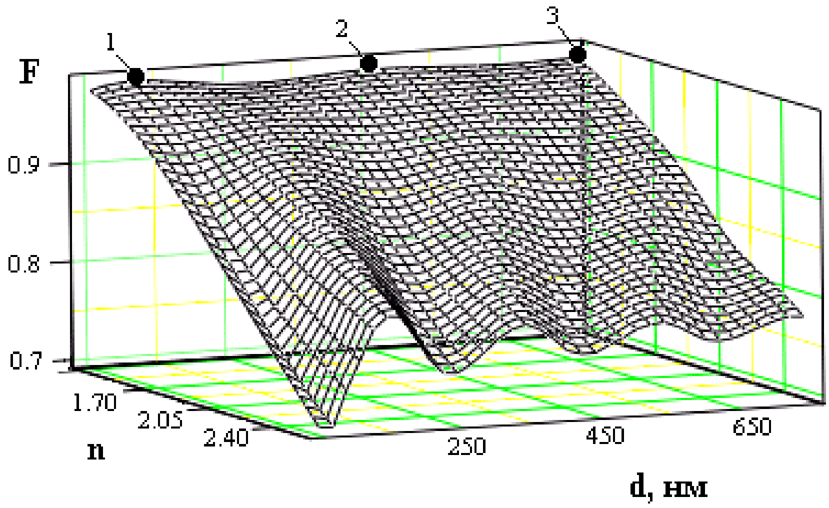

РИС.1. Поверхня функції $F(n,d)$ з ваговими коефіцієнтами $v(\lambda_i) = 1$, $i = 1,...,L$

Розглянемо випадок, коли вагові коефіцієнти функції $F(n,d)$ визначаються за нормальним розподілом *N*(0, 1). Тобто спектральний діапазон $[\lambda_1, \lambda_2]$ відобразимо на інтервал [-5, 5] кривої нормального розподілу і коефіцієнт $v(\lambda_i)$ виберемо таким, що відповідає значенню кривої нормального розподілу в точці з інтервалу [-5, 5], яка є відображенням точки λ_i.

Для другого експерименту отримано, що найбільше значення функції (1) в досліджуваній області становить 0.3129592 і досягається при значенні показника заломлення $n_1^* = 1.35$ та геометричній товщині $d_1^* = 107.0$ *нм*. Значення ε вибиралось рівним 10^{-7}.

Крім зазначеного глобального максимуму існують ще три локальні максимуми: $n_2^* = 1.35$, $d_2^* = 330.2$ *нм*, $F(n_2^*, d_2^*) = 0.3106291$, $n_3^* = 1.35$, $d_3^* = 570.4$ *нм*, $F(n_3^*, d_3^*) = 0.3090383$ та $n_4^* = 1.35$, $d_4^* = 750.0$ *нм*, $F(n_4^*, d_4^*) = 0.3081453$. Поверхня функції $F(n,d)$ для другого експерименту показана на рис.2.

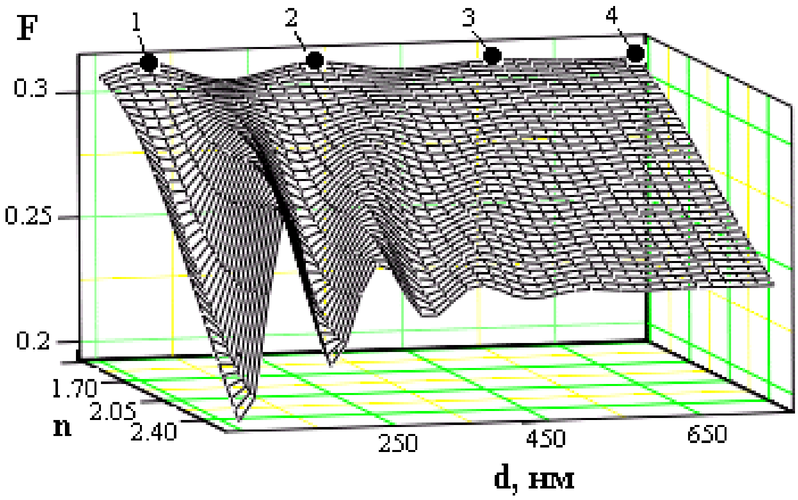

РИС. 2. Поверхня функції $F(n,d)$ з ваговими коефіцієнтами, вибраними згідно із нормальним розподілом

У таблиці наведено характеристики ефективності вищезазначених методів оптимізації для першого та другого експериментів.

Методи		1-й		2-й	
		Кількість точок	Середній час, с	Кількість точок	Середній час, с
	Конфігурацій (Хука - Дживса)	116	0.18	80	0.25
Першого порядку	Найскорішого спуску	97	0.25	73	1.45
	Флетчера - Рівса	95	0.26	62	1.40
	Поллака - Рібб'єра	97	0.33	73	1.84
	Девідона - Флетчера - Пауелла	113	0.21	83	0.35
	Гольдфарба	112	0.20	85	0.35
	Фіакко – Мак-Кормика	108	0.21	83	0.35
	Грінстадта	108	0.22	93	0.42
	r-алгоритм (α=3)	135	0.24	52	0.40
	r-алгоритм (α=2)	127	0.24	74	0.43
	r-алгоритм (α=1000)	77	0.19	15	0.31

Як бачимо, при розв'язуванні першої задачі найбільш ефективними виявилися r-алгоритм із значенням коефіцієнта розтягу простору α=3 та метод конфігурацій (Хука – Дживса). Далі йдуть методи змінної метрики, які є ефективнішими за метод найскорішого спуску, та методи спряжених градієнтів. Зазначимо, що в рамках методів змінної метрики методи Девідона - Флетчера - Пауелла та Гольдфарба виявились ефективнішими за методи Фіакко - Мак-Кормика та

Грінстадта. Для r-алгоритма із значенням α=1000 результати експерименту близькі до результатів, які показують методи змінної метрики.

При розв'язуванні другої задачі найбільш ефективним показав себе метод конфігурацій (Хука - Дживса). Використання коефіцієнта розтягу простору α=2 для r-алгоритму виявилося більш ефективним, ніж використання α=3.

Методи змінної метрики знову виявилися ефективнішими за метод найскорішого спуску та методи спряжених градієнтів. Зазначимо, що метод Гольдфарба має більшу кількість початкових значень, які дозволяють досягти глобального максимуму, ніж інші методи змінної метрики, але має гірші показники за середнім часом роботи (див. таблицю). r-алгоритм із значенням параметра α=1000 значно поступається ефективністю методам змінної метрики.

Зменшення значення ε в (4) значно погіршує результати середньої витрати машинного часу для методів найскорішого спуску та спряжених градієнтів (Флетчера - Рівса, Поллака - Рібб'єра) і значно менше впливає на інші методи.

За отриманими результатами експериментів побудуємо криві коефіцієнта пропускання для однорідної структури з оптимальними значеннями параметрів на досліджуваному спектральному діапазоні (рис. 3).

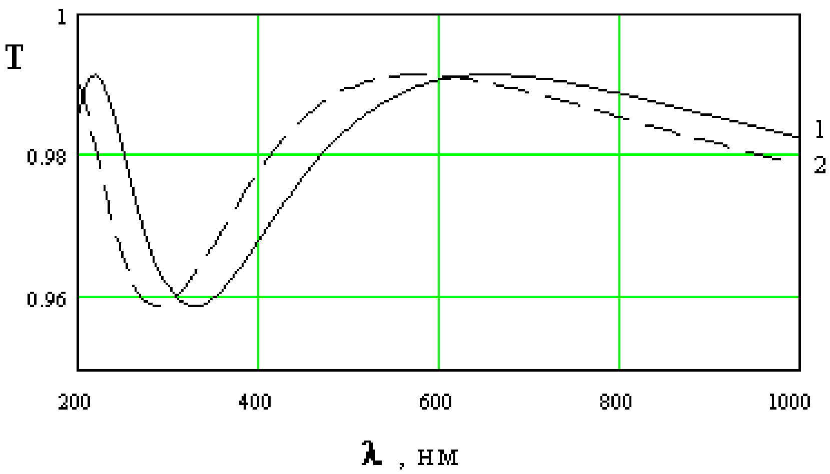

РИС. 3. Криві коефіцієнта пропускання однорідної структури: 1, 2 – вагові коефіцієнти вибрані відповідно за рівномірним та нормальним законами

Із рис.3 бачимо, що при виборі вагових коефіцієнтів за нормальним законом максимум коефіцієнта пропускання знаходиться лівіше від середини досліджуваного спектрального діапазону (λ_{max}=577.8 нм), а при виборі вагових коефіцієнтів за рівномірним законом - правіше (λ_{max}=656.6 нм). Це можно пояснити впливом вагових коефіцієнтів на $F(n,d)$, так як при їх виборі за рівномірним законом (експеримент 2) чим далі точка λ_i знаходиться від центра інтервала $[\lambda_1, \lambda_2]$, тим менше її вклад у значення функції $F(n,d)$. Оскільки в крайніх діапазонах $\lambda \in [200\ нм, 400\ нм]$ і $\lambda \in [800\ нм, 1000\ нм]$ зареєстровано найнижчі коефіцієнти пропускання, в діапазоні $\lambda \in [400\ нм, 800\ нм]$ різниця між максимальним та мінімальним коеффіцієнтами пропускання має бути меншою для другого експерименту (див. рис.3).

Висновки. Найкращі результати при розв'язуванні задач синтезу оптичних покриттів отримуються при використанні методів багатовимірного пошуку екстремумів нелінійних функцій. У даній роботі розглянуто методи багатовимірного пошуку: метод конфігурацій (Хука - Дживса), метод найскорішого спуску, методи спряжених градієнтів (Флетчера - Рівса, Поллака - Рібб'єра), методи змінної метрики (Девідона - Флетчера - Пауелла, Гольдфарба, Фіакко – Мак-Кормика, Грінстадта) та r-алгоритм. На базі них складено пакети програм для ЕОМ, володіючи якими синтезом покриттів може займатись персонал, що не має спеціальної математичної підготовки.

Отримані результати при розв'язуванні обернених задач синтезу оптичних шаруватих покриттів актуальні для застосування в оптичних системах космічної техніки, оптичному приладобудуванні, інтегральній оптиці, рентгенівській і нейтронній спектроскопіях, електродинаміці відкритих структур, при створенні генераторів та перетворювачів електромагнітного та інших випромінювань, розробці апаратури для контролю довкілля і т.д.

А.В. Мица., П.И. Стецюк

ЗАДАЧА НАХОЖДЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ОДНОРОДНОГО ОПТИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ

Приведена многоэкстремальная задача нелинейного программирования для нахождения оптимальных параметров однородного оптического покрытия. Проведен сравнительный численный анализ ряда методов нулевого и первого порядков для нахождения ее глобального экстремума.

O.V. Mitsa., P.I. Stetsyuk

THE PROBLEM FOR FINDING OPTIMAL PARAMETERS OF HOMOGENEOUS OPTICAL COVERING

The multiextremal nonlinear programming problem for finding optimal parameters of homogeneous optical covering is given. The comparative numerical analysis of a number of the zero- and first-order methods for finding its global extremum is carried out.

1. *Furman Sh., Tikhonravov A.V.* Basics of optics of multiplayer systems. – Editions Frontiers, Gif-sur Yvette, 1992. – 242 p.
2. *Гилл Ф., Мюррей У., Райт М.* Практическая оптимизация: пер. с англ. – М.: Мир, 1985. – 509 с.
3. *Михалевич В.С., Трубин В.А., Шор Н.З.* Оптимизационные задачи производственно-транспортного планирования. – М.: Наука, 1986. – 264 с.

4. *Фиакко А., Мак-Кормик Г.* Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации. – М.: Мир, 1972. – 240 с.
5. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 534 с.
6. *Міца О.В.* Аналіз ефективності методів багатовимірної оптимізації при дослідженні однорідних та неоднорідних структур // Штучний інтелект. – 2002. – Вип. 4. – С. 42–48.
7. *Міца О.В.* Синтез чотиришарових структур та аналіз ефективності методів багатовимірного пошуку // Наук. вісн. Чернівецького ун-ту. Сер. математика. – 2002. – Вип. 150. – С. 63–68.

Отримано 08.10.2003