

# Методы вычислительной физики в задаче математической интерпретации лазерных экспериментальных исследований

М.С.Бродин, В.Н.Старков

*Показано, что при проведении лазерных экспериментальных исследований на «несовершенной» установке, когда инструментальные искажения существенны, можно получить достаточно точные результаты, если использовать современные методы вычислительной физики. Впервые установлено, что именно в лазерных экспериментальных исследованиях оказалась востребованной новая аппаратная функция – функция «шапочка», «родная сестра» гауссовой кривой. Новая математическая модель измерительного тракта и тщательно реализованный вычислительный эксперимент позволили сделать заключение о том, что прошедший через мезопористую пленку пучок света имеет на самом деле более узкое распределение интенсивности, нежели регистрируемый пучок, а амплитудные значения истинного распределения интенсивности в два раза превышают амплитудные значения измеренных распределений.*

**Ключевые слова:** вычислительная физика, интерпретация, лазер, математическая модель, нанопленка, эксперимент.

В научной литературе существует понятие – редукция к идеальному прибору [1]. Предельные возможности экспериментальных установок обусловлены физическими явлениями, формирующими процесс измерения. При наличии математической модели явлений, контролирующей процесс измерения, можно попытаться скомпенсировать их искажающее влияние на данные измерений. Результат такого математического преобразования рассматривается как данные, полученные на некоторой виртуальной установке, возможности которой существенно выше возможностей реальной установки. Одной из целей лазерных экспериментальных исследований является получение истинного распределения интенсивности излучения, т. е. распределения, не искаженного в результате измерений. Для достижения этой цели можно применять различные методы, например использовать совершенные приборы, у которых полуширина аппаратной функции значительно меньше, чем интересующие исследователя детали распределения. Иной путь – использование математических методов. Во многих случаях, когда инструментальные искажения существенны, математическая задача сводится к нахождению функции  $u(x)$  по известной аппаратной функции  $K(x, y)$  и регистрируемой функции  $u(x)$ , т. е. к решению, в частности, линейного интегрального уравнения Фредгольма первого рода. Искомую функцию  $u(x)$ , определяемую математическим путем, можно интерпретировать как результат измерений на модельной (виртуальной) экспериментальной установке, точностные характеристики которой превышают предельно достижимые параметры используемого оборудования.

Цель работы – на примере конкретных лазерных экспериментальных исследований показать, что методы вычислительной физики позволяют экспериментатору в ря-

де случаев получать на «несовершенной» установке достаточно точные результаты.

Решается задача математической интерпретации результатов экспериментальных исследований оптических свойств тонких слоев пористых материалов (в частности, двуокиси кремния  $\text{SiO}_2$ , диоксида титана  $\text{TiO}_2$ ). В последнее время возрос интерес к изучению тонких пленок нанокристаллитов, поскольку существует потенциальная возможность их использования в фотовольтаических системах, сенсорных приборах, фотокатализе, микроэлектронике, оперативных запоминающих устройствах для компьютеров и т. д. Упомянутые материалы имеют высокий коэффициент преломления, достаточно высокую прочность и долговременную стабильность оптических свойств, прозрачны в видимом диапазоне света. В настоящее время разработаны методики, которые позволяют достаточно дешево и качественно изготавливать пленки с заданными параметрами.

К линейным оптическим параметрам пленок относятся дисперсионные зависимости показателя преломления и коэффициента поглощения, а также пространственное распределение интенсивности рассеяния. Линейные параметры являются исходными данными для анализа нелинейности, однако имеют и самостоятельную ценность.

Рассеяние исследуют, прежде всего, для того, чтобы правильно определить поглощение пленки, т. е. учесть вклад интегральной интенсивности рассеянного излучения в полное уменьшение мощности лазерного пучка, прошедшего сквозь пленку. Кроме того, детали пространственного распределения интенсивности рассеяния содержат информацию о строении пленки, включая шероховатость ее поверхности, размер кластеров наночастиц, образующих пленку, и т. д.

В экспериментах измерялись индикатрисы рассеяния мезопористых пленок. Одной из задач проводимых измерений являлось получение истинного распределения интенсивности рассеяния, т. е. распределения, не искаженного прибором. Квинтэссенция проблемы математической интерпретации результатов эксперимента заклю-

чается в том, что в большинстве общезначимых исследований искомым элементом  $v$ , характеризующий изучаемый физический объект, явление или их свойства, недоступен для прямого наблюдения, и поэтому исследуется некоторое его проявление, которое можно представить в виде [2]

$$u = Av, \quad A : V \rightarrow U, \quad v \in V, \quad u \in U,$$

где  $A$  – линейный и компактный оператор, действующий из гильбертова пространства  $V$  в гильбертово пространство  $U$ , т. е. экспериментатор фиксирует некоторый образ  $u$  истинного элемента состояния  $v$  объекта, явления или процесса.

При решении задачи восстановления элемента  $v$  следует различать два основных этапа:

- построение оператора  $A$ , который действует на элемент  $v$  ( $v \in V, u \in U, A : V \rightarrow U$ );
- определение характеристик модели элемента  $v$  по известному элементу  $u$  и оператору  $A$ , т. е. решение операторного уравнения  $u = Av$  ( $v \in V, u \in U$ ).

Построение оператора  $A$  называют этапом моделирования измерительного тракта экспериментальной установки, поскольку именно он искажает элемент  $v$ . Часто этот оператор можно представить в виде

$$Av \equiv \int_c^d K(x, s)v(s)ds, \tag{1}$$

где  $v(s)$  – искомая функция;  $c \leq s \leq d$ ;  $K(x, s)$  – аппаратная функция, такая, что

$$\int_c^d K(x, s)v(s) ds = u(x), \quad a \leq x \leq b, \tag{2}$$

$$K(x, s) \in C([a, b] \times [c, d]), u \in L_2(a, b).$$

В физических исследованиях под аппаратной функцией понимают характеристику линейного измерительного устройства, которая устанавливает связь измеренной величины на выходе устройства с истинным значением этой величины на его входе. Задача при таком подходе сводится к нахождению функции  $v(s)$  по известным аппаратной ( $K(x, s)$ ) и регистрируемой ( $u(x)$ ) функциям, т. е.

к решению линейного интегрального уравнения Фредгольма первого рода, которое в общем случае имеет вид

$$u(x) = \int_c^d K(x, s)v(s)ds. \tag{3}$$

Схема эксперимента приведена на рис.1 [3]. Диаметр пучка поляризованного излучения He–Ne-лазера ( $\lambda = 632.8$  нм, мощность 1 мВт) с гауссовым распределением интенсивности составлял в плоскости образца  $\sim 0.95$  мм. Образец, закрепленный на оси гониометра (перпендикулярно лазерному пучку), представлял собой тонкую ( $\sim 1$  мкм) пленку пористого материала, нанесенную на стеклянную подложку. Для сбора рассеянного света на подвижном плече гониометра установлена линза, за которой смонтирована CCD-камера на расстоянии 8.6 см от образца. В плоскости линзы размещен непрозрачный экран с отверстием, диаметр которого был равен диаметру линзы (1 см). В процессе измерений исследовалась меридиональная угловая зависимость (ось вращения фотоприемника лежит в плоскости образца) интенсивности рассеянного света относительно направления распространения лазерного пучка, перпендикулярного пористой пленке. Интенсивность рассеяния определялась при каждом положении линзы с фотоприемником суммированием интенсивностей на всех элементах CCD-матрицы.

Математическая интерпретация результатов проводимого эксперимента предполагает прежде всего получение информации на виртуальной установке, характеристики которой могут превышать предельно достижимые для экспериментального оборудования. Поэтому решение проблемы повышения информационной достоверности регистрируемых экспериментальных данных начинается с построения математической модели экспериментальной установки.

При анализе результатов эксперимента возникает вопрос о соотношении между интенсивностью рассеянного образца света перед линзой и интенсивностью, регистрируемой CCD-камерой. На него можно ответить следующим образом.

Бесконечно малое значение регистрируемой интенсивности определяется приближенно выражением

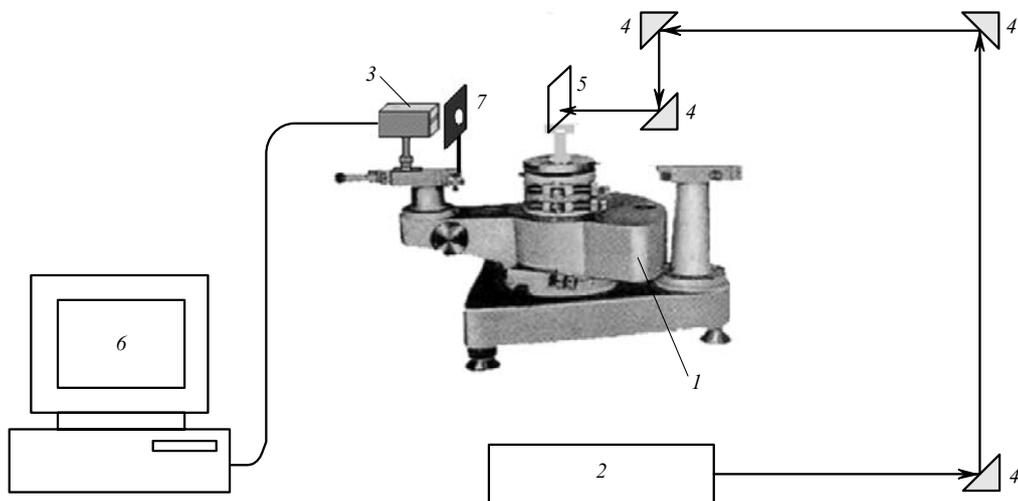


Рис.1. Схема экспериментальной установки для измерения сечения пространственного распределения интенсивности света: 1 – гониометр Г-5; 2 – He–Ne-лазер; 3 – фотодиодная линейка; 4 – набор поворотных призм; 5 – образец; 6 – компьютер; 7 – экран с линзой.

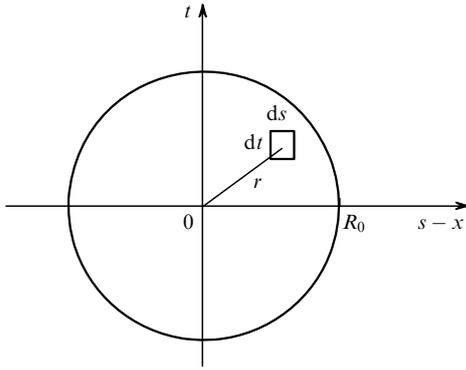


Рис.2. К расчету интенсивности рассеянного излучения, регистрируемого CCD-камерой.

$$\Delta u = vG\Delta S,$$

где  $v$  – истинная интенсивность рассеяния;  $G$  – функция пропускания излучения линзой в точке падения на нее пучка;  $\Delta S$  – элемент площади круга, занимаемого линзой (рис.2) Выражение для измеряемой CCD-камерой интенсивности естественно представить в таком случае в виде

$$u(x) = \iint_S v G ds dt, \quad x \in [-a_0, a_0], \quad (4)$$

где  $x$  – координата центра линзы.

Сделаем несколько замечаний относительно функций  $v$  и  $G$ . В общем случае  $v$  – функция двух переменных  $s$  и  $t$ . Однако поскольку она является прообразом функции одной переменной  $u(x)$  при отображении (4), то считаем ее также функцией одной переменной –  $v(s)$ . Естественным можно считать и допущение о том, что функция  $G$  является осесимметричной и зависит лишь от радиуса  $r \in [0, R_0]$ , где  $R_0$  – радиус линзы. С учетом этих замечаний формулу (4) можно записать в виде

$$u(x) = \int_{x-R_0}^{x+R_0} \int_{-[\sqrt{R_0^2-(x-s)^2}]^{1/2}}^{[\sqrt{R_0^2-(x-s)^2}]^{1/2}} v(s)G(r)ds dt. \quad (5)$$

Используя в качестве переменной интегрирования радиус  $r$ , получаем

$$u(x) = \int_{x-R_0}^{x+R_0} v(s)ds \int_0^{R_0} G(r) \times \frac{2r}{[r^2 - (x-s)^2]^{1/2}} dr, \quad |x-s| \leq r, \quad (6)$$

или

$$u(x) = \int_{-R_0}^{R_0} K(s)v(x-s)ds, \quad x \in [-a_0, a_0], \quad (7)$$

где

$$K(s) = \int_{|s|}^{R_0} G(r) \frac{2r}{(r^2 - s^2)^{1/2}} dr. \quad (8)$$

Сразу же необходимо дополнить соотношения (7) и (8) априорным физическим условием

$$v(s) \geq 0, \quad \forall s \in (-\infty, \infty). \quad (9)$$

Следует подчеркнуть, что решение задачи (7), (9) сопровождается серьезными трудностями, связанными с ошибками измерений. До сих пор предполагалось, что необходимые для нахождения искомой функции  $v(s)$  аппаратная ( $K(s)$ ) и регистрируемая ( $u(x)$ ) функции известны точно. В действительности же обе эти функции могут быть получены лишь в результате экспериментального измерения  $u(x)$  и  $G(r)$  с помощью CCD-камеры. Эти измерения всегда содержат ошибки, связанные со свойствами и погрешностями измерительного тракта (дефекты оптики прибора, его фокусировки и т. д.).

Из выражения (8) следует, что функция  $K(s)$  является по существу экспериментально определяемой функцией при известных экспериментальных значениях функции пропускания  $G(r)$ .

Зависимость  $G(r)$  в эксперименте измерялась на установке, описанной выше, в отсутствие образца, т. е. лазерный пучок сканировал линзу вдоль ее диаметра. Экспериментальные значения  $G(r)$  представлены на рис.3 [3]. Экспериментальную зависимость  $\hat{K}(s)$  можно найти по этим значениям путем интегрирования по формуле (8). Для аппроксимации экспериментальных значений аппаратной функции  $\hat{K}(s)$  используется функция «шапочка» [2, 4]

$$\hat{K}(s) = \theta(R^2 - s^2)C \exp\left(-\frac{R^2}{R^2 - s^2}\right), \quad -R \leq s \leq R, \quad (10)$$

где  $\theta(R^2 - s^2)$  – функция Хевисайда;  $C = 4.13 \text{ см}^{-1}$ ;  $R = 0.545 \text{ см}$ . Зависимость функции  $\hat{K}(s)$ , наилучшим образом аппроксимирующая значения  $\hat{K}(s)$  в метрике  $L_2(-R, R)$ , представлена на рис.4.

С точки зрения практического применения аппаратная функция «шапочка» представляет большой интерес, т. к. она обладает важными свойствами. Во-первых, мала погрешность аппроксимации аппаратной функции функцией «шапочка»:  $\|\hat{K}(s) - \hat{K}(s)\|_2 = 0.0157876$  (рис.4). Во-вторых, она финитна по определению, т. е.  $\hat{K}(s) = 0$  при  $|s| \geq R$ . В-третьих, она бесконечно дифференцируема по  $s$ .

Финитность и бесконечная дифференцируемость аппаратной функции «шапочка»  $\hat{K}(s)$  принципиальным образом отличают ее от хорошо известных в физике аппаратных функций [2]. Множество аппаратных функций, которое включает дифракционную,

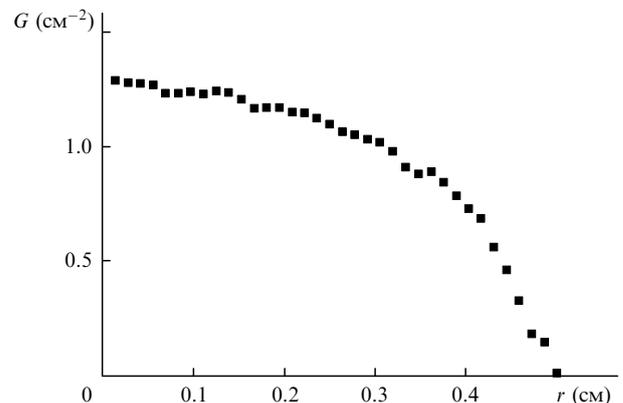


Рис.3. Экспериментальные значения функции  $G(r)$ .

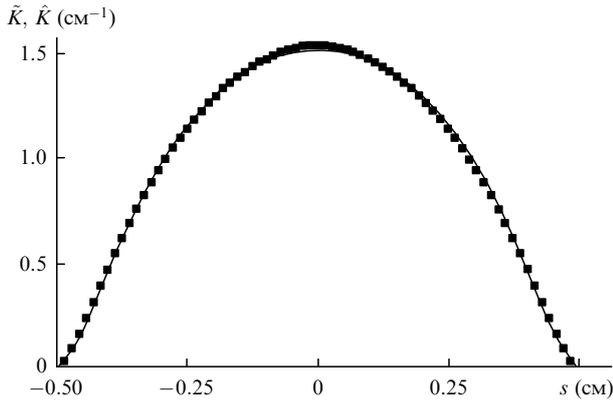


Рис.4. Экспериментальная ( $\tilde{K}(s)$ , точки) и теоретическая ( $\hat{K}(s)$ , сплошная кривая) зависимости аппаратной функции.

$$K(x) = \frac{1}{\gamma} \left[ \frac{\sin(\pi x/\gamma)}{\pi x/\gamma} \right]^2 \quad (11)$$

(полуширина инструментального контура определяется соотношением  $a = 0.886\gamma$ ), щелеобразную,

$$K(x) = \begin{cases} 1/a & \text{при } |x|/a \leq 1/2, \\ 0 & \text{при } |x|/a > 1/2 \end{cases} \quad (12)$$

( $a$  – ширина изображения щели), гауссову,

$$K(x) = \frac{2}{a} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left( -4 \frac{x^2}{a^2} \ln 2 \right), \quad (13)$$

дисперсионную,

$$K(x) = \frac{a/(2\pi)}{x^2 + (a/2)^2}, \quad (14)$$

Дирихле,

$$K(x) = \frac{\sin(x/a)}{\pi x}, \quad (15)$$

экспоненциальную,

$$K(x) = \frac{\ln 2}{a} \exp \left( -2 \frac{|x|}{a} \ln 2 \right), \quad (16)$$

и треугольную,

$$K(x) = \begin{cases} a^{-1}(1 - |x|/a) & \text{при } |x|/a \leq 1, \\ 0 & \text{при } |x|/a > 1, \end{cases} \quad (17)$$

функции, образует подмножество дельта-образных последовательностей (импульсных функций). Отметим в качестве примера, что в отличие от функции «шапочка» щелеобразная (12) и треугольная (17) аппаратные функции финитны, но не обладают непрерывными первыми производными. С другой стороны, гауссова (13) и дифракционная (11) аппаратные функции бесконечно дифференцируемы, но не финитны.

Для сравнения на рис.5 приведена наилучшая аппроксимация аппаратной функции  $\tilde{K}(s)$  гауссовой функцией  $K_G(s)$ . Очевидно, что «шапочка»  $\hat{K}(s)$  гораздо лучше подходит для аппроксимации экспериментальной аппаратной функции, т. к.

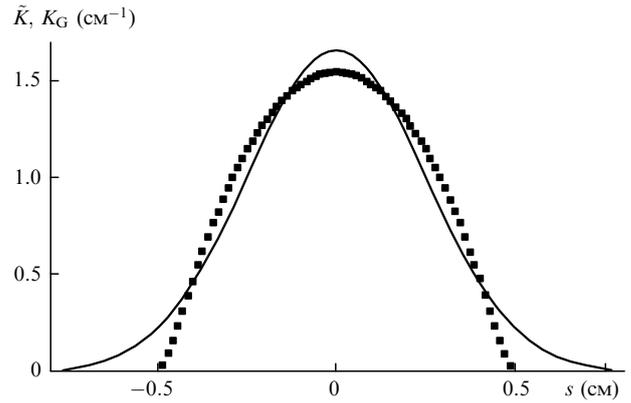


Рис.5. Экспериментальная ( $\tilde{K}(s)$ , точки) и теоретическая ( $K_G(s)$ , сплошная кривая) зависимости аппаратной функции.

$$\|\tilde{K}(s) - K_G(s)\|_2 = 0.135952,$$

$$K_G(s) = 1.639 \exp(-7.56066s^2).$$

Возвращаясь к проблеме редукции, остановимся на существующих подходах к решению интегрального уравнения (7) (уравнения типа свертки), когда известны регистрируемая функция  $u(x)$  и аппаратная функция  $K(s)$ .

Следует подчеркнуть, что особенностью рассматриваемых обратных задач (3), (7) является то, что наблюдаемая функция  $u(x)$  представляет собой интеграл, поэтому она малочувствительна к большим изменениям функции  $u(s)$ , когда эти изменения компенсируют друг друга. Это означает, что двум существенно различающимся функциям  $u(s)$  могут соответствовать близкие экспериментально наблюдаемые функции. А поскольку регистрируемые функции измеряются всегда с некоторой погрешностью, то возникает проблема определения приближенного решения обратной задачи (7), близкого к истинному. Именно эта проблема с математической точки зрения является основной при интерпретации результатов экспериментальных исследований.

Известно, что решение уравнения (7) существует и единственно, если преобразование Фурье аппаратной функции не обращается в нуль ни в каком конечном интервале.

Классический метод решения уравнения типа свертки с помощью прямого и обратного преобразований Фурье состоит в следующем. Пусть  $u(x) \in L_2(-\infty, \infty)$ ,  $K(s) \in L_1(-\infty, \infty)$ ,  $v(s) \in L_1(-\infty, \infty)$ , тогда решение уравнения (7) определяется выражением

$$v(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{U(\omega)}{K(\omega)} \exp(-i\omega s) d\omega, \quad s \in (-\infty, \infty), \quad (18)$$

где  $U(\omega)$  и  $K(\omega)$  – фурье-образы наблюдаемой ( $u(x)$ ) и аппаратной ( $K(s)$ ) функций, т. е.

$$U(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \exp(i\omega x) dx,$$

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(s) \exp(i\omega s) ds.$$

Если при  $\omega \rightarrow \infty$  фурье-образы  $U(\omega)$ ,  $K(\omega)$  согласованно стремятся к нулю так, что

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} [U(\omega)/K(\omega)] = 0,$$

и интеграл (18) сходится, то решение  $v(s)$  существует, единственно и дается формулой (18), т. е. при точных  $u(x)$  и  $K(s)$  могут быть выполнены первые два пункта определения корректности задачи по Адамару.

Однако уже на данном этапе возникают трудности использования формулы (18), поскольку оперирование с бесконечными пределами возможно лишь в случае, когда функции  $U(\omega)$  и  $K(\omega)$  представлены аналитически. Аналитическое выражение для фурье-образа аппаратной функции в виде «шапочки» отсутствует.

Серьезные проблемы возникают, как уже отмечалось, из-за погрешностей измерений распределения интенсивности, которые связаны со свойствами и погрешностями измерительного тракта. При наличии погрешностей измерений результирующий контур можно представить в виде

$$\tilde{u}(x) = u(x) + \delta(x),$$

где  $\delta(x)$  – «помеха», содержащая, в частности, в качестве компоненты белый шум, вследствие чего при  $\omega \rightarrow \infty$  функция  $\tilde{U}(\omega)$  стремится не к нулю, а к некоторой константе, зависящей от уровня белого шума. Тогда

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} [\tilde{U}(\omega)/K(\omega)] = \infty$$

и, как следует из (18), решение уравнения (4) не существует. Таким образом, высокие гармоники в решении  $v(s)$  реагируют даже на малые погрешности в определении  $u(x)$ . Отсюда следует, что игнорирование неустойчивости задачи редукции к идеальному прибору может привести к неверной интерпретации результатов экспериментальных измерений.

Как отмечалось, аналитическое выражение для фурье-образа «шапочки»  $\hat{K}(s)$  отсутствует. На рис.6 приведены результаты численного расчета спектра спектра  $\hat{K}(\omega)$ . Из этого расчета можно сделать заключение, что аппаратная функция  $\hat{K}(s)$  в виде «шапочки» обладает свойством, которое создает серьезные трудности при решении исходной задачи, а именно: фурье-образ «шапочки» имеет счетное множество нулей.

С учетом перечисленных причин решение интегрального уравнения типа свертки (7) – существенно некорректная задача. Одним из наиболее эффективных методов численного построения приближенного решения не-

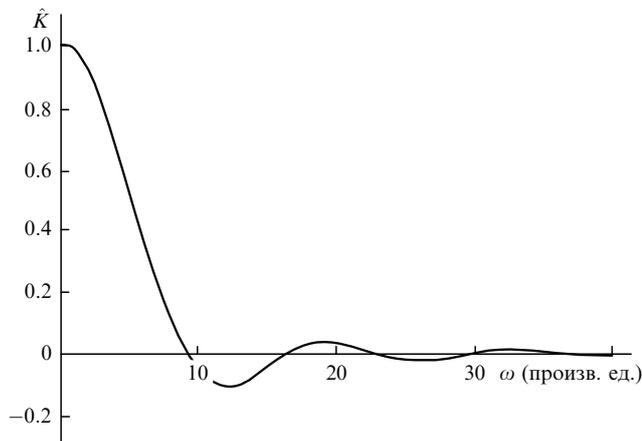


Рис.6. Фурье-образ «шапочки»  $\hat{K}(\omega)$ .

корректных задач является итерационный метод Ландвебера [5]. Для решения интегрального уравнения (7) с учетом условия (9) разработана сплайн-итерационная модификация метода Ландвебера [6]:

$$v_0(s) = 0, \quad s \in [-\alpha, \alpha], \quad v_m(s) = v_{m-1}^G(s) + \eta [F(s) - \int_{-\alpha}^{\alpha} \Re(s, t) v_{m-1}^G(t) dt], \quad m = 1, 2, \dots,$$

$$v_m^G(s) = g_m \exp(-s^2/h_m^2) = \arg \min_{g \geq 0, h > 0} \|v_m(s) - g \exp(-s^2/h^2)\|,$$

$$0 < \eta < 2/\|A^*A\|, \quad F(s) = \int_{-a_0}^{a_0} \hat{K}(x, s) \tilde{u}(x) dx,$$

$$\alpha = a_0 + R, \quad \Re(t, s) = \Re(s, t) = \int_{-a_0}^{a_0} \hat{K}(x, t) \hat{K}(x, s) dx,$$

$$\|A^*A\|^2 = \|\Re(t, s)\|^2 \leq \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\alpha}^{\alpha} \Re^2(t, s) dt ds.$$

Условие выхода из итерационного цикла – норма разности соседних решений не должна превышать  $10^{-8}$  при стабилизации значений  $g_m, h_m$  до шести значащих цифр включительно. Число итераций  $m$ , удовлетворяющих этим требованиям в рассмотренном вычислительном эксперименте, составило 375. В качестве наблюдаемой функции  $\tilde{u}(x)$  использовался интерполяционный кубический сплайн регистрируемых экспериментальных данных (рис.7) [6, 7].

На рис.8 приведены результаты вычислительного эксперимента: истинная интенсивность рассеяния  $v_{375}^G(s) = 1.62725 \exp(-17.2906 s^2)$ , ее образ  $Av_{375}^G(s)$  и экспериментальные данные. При этом невязка

$$\|Av_{375}^G - \tilde{u}\|_2^2 = 0.0110802.$$

В заключение перечислим основные результаты работы:

- 1) построена математическая модель в виде интегрального уравнения Фредгольма первого рода измерительного тракта экспериментальной лазерной установки для исследования оптических свойств нанопленок пористого материала;

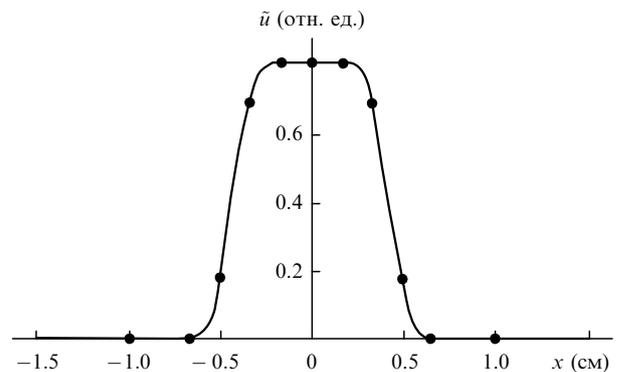


Рис.7. Экспериментальная функция  $\tilde{u}(x)$  (точки) и ее интерполяционный кубический сплайн (сплошная линия)

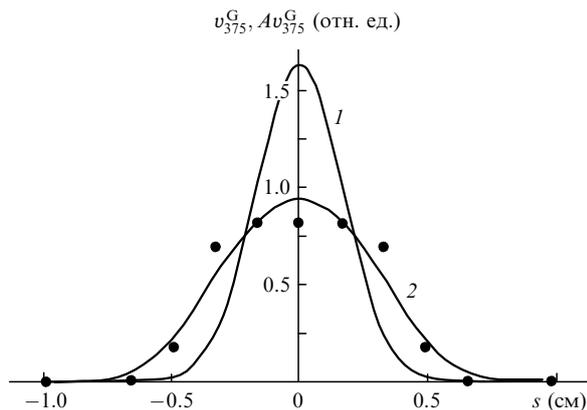


Рис.8. Распределения истинной интенсивности рассеяния  $v_{375}^G = 1.62725 \exp(-17.2906 s^2)$  (1) и ее образа  $Av_{375}^G$  (2). Точки – экспериментальные данные.

2) обосновано использование в качестве аппаратной функции функции «шапочка»

$$\hat{K}(s) = \theta(R^2 - s^2)C \exp[-R^2/(R^2 - s^2)],$$

где  $\theta(R^2 - s^2)$  – функция Хевисайда, как принципиального дополнения к существующему перечню аппаратных функций;

3) развита теория сплайн-итерационных методов вычислительной физики, разработана сплайн-итерационная модификация метода Ландвебера решения линейного интегрального уравнения Фредгольма первого рода;

4) с помощью вычислительного эксперимента установлено, что математическая интерпретация корректирует результаты лазерных измерений; выяснилось, что амплитудные значения истинного распределения интенсивности в два раза превышают амплитудные значения измеренных распределений;

5) результатом математической интерпретации является тот факт, что прошедший через мезопористую пленку пучок света имеет на самом деле более узкое распределение интенсивности, нежели регистрируемый пучок.

1. Раутиан С.Г. *УФН*, **66**, 475 (1958).
2. Старков В.Н. *Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации* (Киев: Наукова думка, 2002).
3. Borshch A.O., Brodyn M.S., Gayvoronsky V.Ya., Maksyutenko P.V., Starkov V.N. *Ukr. J. Phys.*, **49**, 196 (2004).
4. Старков В.Н. *Проблемы управления и информатики*, № 5, 97 (2001).
5. Landweber L. *Amer. J. Math.*, **73**, 615 (1951).
6. Старков В.Н. *Труды Междунар. конф. «Тихонов и современная математика». Обратные и некорректно поставленные задачи* (М.: Изд-во МГУ, 2006).
7. Борщ А.А., Бродин М.С., Гайворонский В.Я., Старков В.Н., Якунин С.В. В сб.: *Питання оптимізації обчислень* (Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2005).