

## СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ .....	2
ВВЕДЕНИЕ .....	3
1 Описание методов .....	7
1.1 Модель суперячейки .....	7
1.2 Фурье-модальный метод .....	7
1.3 Алгоритм восстановления дифференциальных уравнений на основе данных .....	13
1.3.1 Постановка задачи .....	13
1.3.2 Предобработка данных .....	14
1.3.3 Описание алгоритма .....	15
1.4 Алгоритм численного решения дифференциальных уравнений с использованием методов машинного обучения .....	17
2 Численное моделирование .....	19
2.1 Получение данных .....	19
2.2 Восстановление и решение дифференциальных уравнений .....	24
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	31
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	32
ПРИЛОЖЕНИЕ А (Псевдокод алгоритма восстановления дифференциальных уравнений) .....	35
ПРИЛОЖЕНИЕ Б (Расчет матрицы рассеяния составного слоя) .....	36

## **СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ**

ФММ – Фурье-модальный метод

ДУ – Дифференциальное уравнение

ЛДУ – Линеиной дифференциальное уравнение

## ВВЕДЕНИЕ

Изучение распространения и рассеяния электромагнитных волн в сильно неоднородных рассеивающих средах находит свое применение в различных областях физики, где возникает задача определения состава среды на основании светорассеяния/спектроскопии и некоторых предположений о составе среды. Например, в биофизике для неинвазивной диагностики биологических тканей в инфракрасном и видимом диапазонах [1–3]. В науках о Земле часто приходится работать с шероховатыми рассеивающими поверхностями, такими как почва, поверхность океанов, снежный покров и растительность, для чего применяются различные методы моделирования рассеяния света [4–7]. При этом моделирование распространения излучения в случае, когда нельзя пренебречь многократным рассеянием, является сложной вычислительной задачей. Поэтому необходимо изучение более простых аппроксимаций сложной модели многократного рассеяния, применимых даже для сложных композитных сред.

Существуют методы, позволяющие получать численные решения уравнений Максвелла при взаимодействии электромагнитных волн с рассеивателями произвольной формы. В их число входят метод конечных разностей, метод конечных элементов [8], методы объемных интегральных уравнений, методы поверхностных интегральных уравнений [9]. Широко используются методы, основанные на использовании Т-матриц [10]. Но их использование для моделирования распространения волн в сильно неоднородных рассеивающих средах затруднительно, так как требует большого количества вычислений.

Также для моделирования распространения излучения часто используется теория переноса излучения [11–13]. В соответствии с [14, 15] уравнение переноса излучения в трехмерном пространстве в случае рассеивающей, поглощающей и переизлучающей среды можно записать в следующем виде

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = -(\sigma_a(\mathbf{r}) + \sigma_s(\mathbf{r}))I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \frac{1}{4\pi} \int\limits_{\mathbb{S}^2} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\omega' + \mathcal{E}(\mathbf{r}, \mathbf{s}), \quad (1)$$

где  $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$  – спектральная интенсивность излучения,  $\mathbf{s}$  – направление, вдоль которого распространяется излучение,  $\mathbf{r}$  – радиус вектор,  $\sigma_a(\mathbf{r})$  – поперечное

сечение поглощения,  $\sigma_s(\mathbf{r})$  – поперечное сечение рассеяния,  $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$  – фазовая функция, равная доле излучения, распространяющегося в направлении  $\mathbf{s}'$  и рассеянного в направлении  $\mathbf{s}$ ,  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, \mathbf{s})$  – мощность излучения на единицу объема и на единицу телесного угла в направлении  $\mathbf{s}$ . Фазовая функция  $p(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$  удовлетворяет условию (2)

$$\frac{1}{4\pi} \iint_{\mathbb{S}^2} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') d\omega' \leq 1. \quad (2)$$

Равенство в уравнении (2) достигается в случае отсутствия поглощения излучения средой.

Уравнение (1) является интегро-дифференциальным в частных производных, и его решение даже в одномерном случае является достаточно сложной задачей. Поэтому обычно рассматриваются специальные случаи, позволяющие упростить рассматриваемое уравнение.

Например, в случае чисто рассеивающей среды уравнение (1) принимает более простой вид (3)

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = -\sigma_s(\mathbf{r}) I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \frac{1}{4\pi} \iint_{\mathbb{S}^2} p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') d\omega'. \quad (3)$$

Уравнение в таком случае остается интегро-дифференциальным в частных производных и не имеет прямого решения.

Хотя теория переноса излучения широко известна и хорошо разработана, использование численных методов моделирования, основанных на уравнении переноса излучения (1), ограничено и может применяться только для сред с достаточно низкой плотностью упаковки рассеивающих частиц, так как уравнение (1) получено в предположении однократного рассеяния на частице.

Кроме того, для моделирования переноса энергии электромагнитной волной в неоднородных средах используется закон Бугера-Ламберта-Бера [16, 17], который в соответствии с [18] может быть записан в следующем виде

$$I(h) = I_0 \exp(-n\sigma_{\text{ext}}h), \quad (4)$$

где  $I_0 = I(h = 0)$  – интенсивность на поверхности неоднородного слоя,  $n$  – концентрация частиц,  $\sigma_{\text{ext}}$  – сечение экстинкции.

Стоит отметить, что зависимость вида (4) (рисунок 1) может быть получена в рамках теории переноса излучения для поглощающей и излучающей среды в отсутствие рассеяния. В [18] демонстрируется, что в случае отсутствия в среде поглощения и излучения для интенсивности электромагнитной волны сохраняется зависимость (4) с учетом  $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{scat}}$ , где  $\sigma_{\text{scat}}$  – сечение рассеяния.

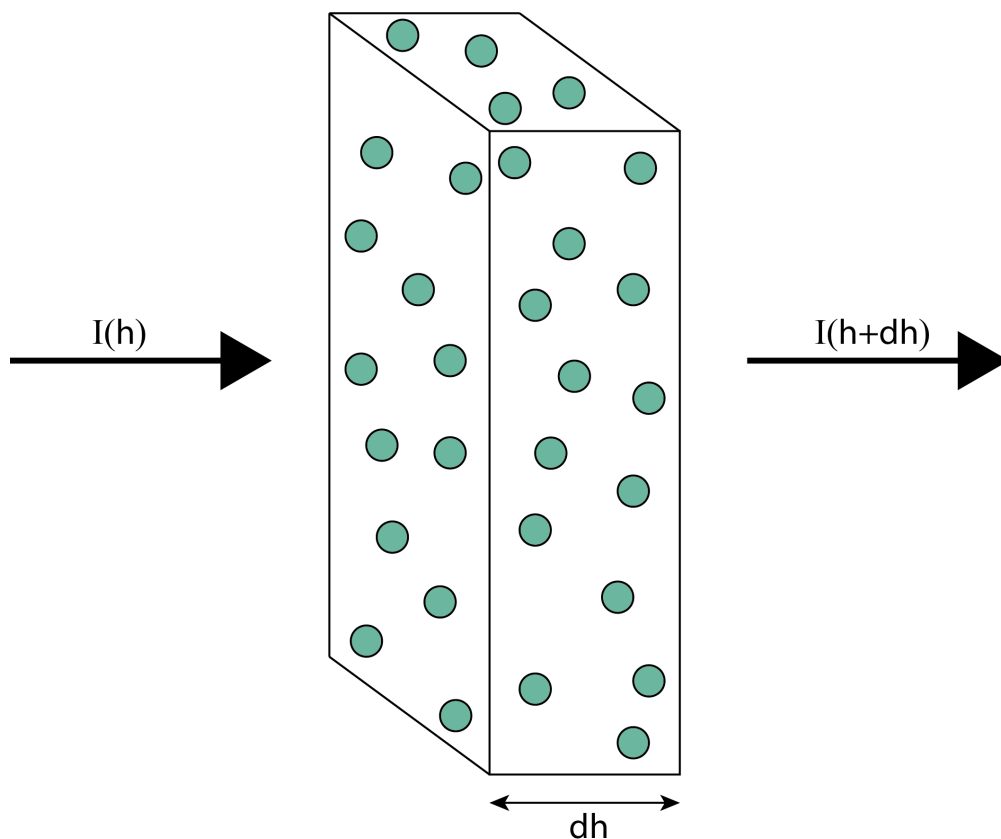


Рисунок 1 – Ослабление интенсивности переносимой электромагнитной волной энергией при распространении в неоднородной рассеивающей среде

Но использование закона Бугера-Ламберта-Бера для моделирования распространения электромагнитных волн в неоднородных средах также может быть допустимо только в случае достаточно низкой плотности упаковки рассеивателей, так как он получен в предположении однократного рассеяния электромагнитной волны на частице.

Таким образом, основной целью работы является поиск одномерных дифференциальных уравнений, описывающих распространение излучения в сильно неоднородной рассеивающей среде, на основании строгих численных

решений уравнений Максвелла с использованием методов искусственного интеллекта

## 1 Описание методов

### 1.1 Модель суперячейки

Для моделирования случайных конечных или полубесконечных систем может быть использована модель суперячейки [19–21]. Двумерная суперячейка представляет собой среду с произвольным распределением оптических параметров вдоль одной из декартовых осей, вдоль другой из осей вводится искусственная периодичность с периодом  $\Lambda$ , как это изображено на рисунке 2. Необходимо отметить, что в пределе  $\Lambda \rightarrow \infty$  энергетические параметры, описывающие взаимодействие электромагнитной волны со средой, становятся независимыми от  $\Lambda$ .

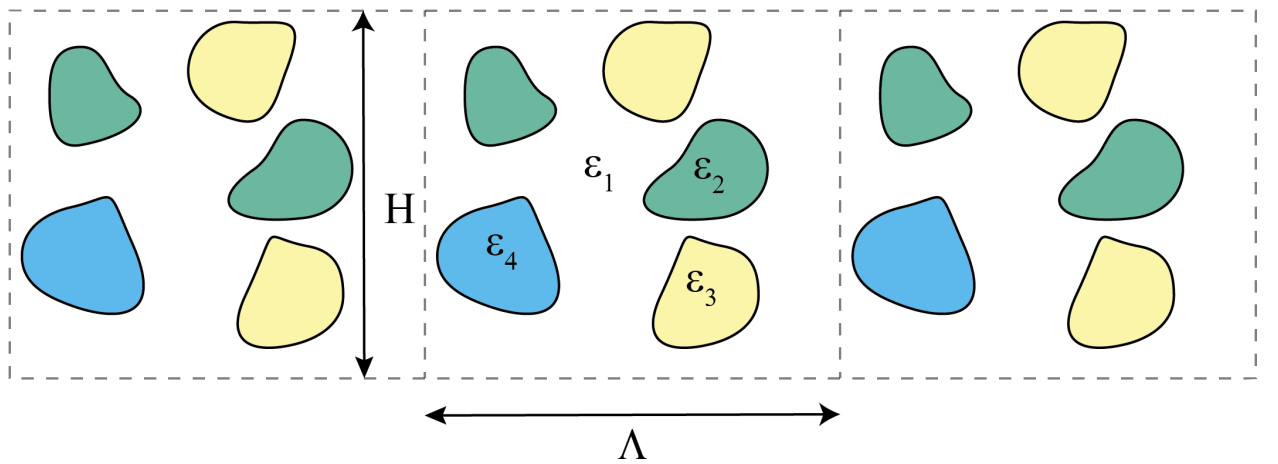


Рисунок 2 – Пример двумерной суперячейки конечной толщины  $H$ ,  $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_4$  – различные диэлектрические проницаемости,  $\Lambda$  – период суперячейки

В рамках модели суперячейки может быть применен Фурье-модальный метод, который используется для решения уравнений Максвелла с гармонической зависимостью от времени для одномерных и двумерных фотонных кристаллов. Подробное описание Фурье-модальных методов приведено в следующем разделе.

### 1.2 Фурье-модальный метод

Рассмотрим уравнения Максвелла

$$\begin{cases} \nabla \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \\ \nabla \times \vec{H} = -i\omega\varepsilon\vec{E} \end{cases} \quad (5)$$

с периодической вдоль оси  $Ox$  функцией  $\varepsilon(x, y) = \varepsilon(x + \Lambda, y)$  и  $\mu(x, y) = \mu_0$ .

Задача нахождения решений уравнений (5) с помощью ФММ для фотонного кристалла конечной толщины решается (рисунок 3) в два основных

этапа. На первом этапе записывается разложение поля и диэлектрической проницаемости в ряд Фурье внутри фотонного кристалла. Для численного решения задачи учитывается конечное число гармоник Фурье. Подстановка указанных разложений в исходные уравнения приводит к алгебраической задаче на собственные значения. На втором этапе записывается разложение поля по плоским волнам в однородном пространстве, которое соответствует областям  $y < -d/2$  и  $y > d/2$  и с помощью граничных условий выполняется «сшивку» полей на границах  $y = \pm d/2$ .

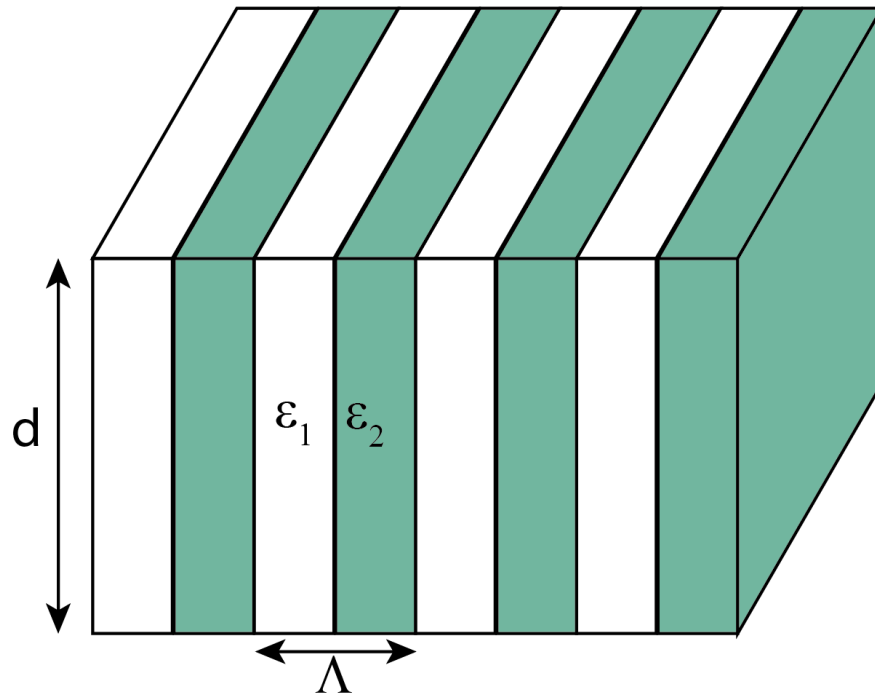


Рисунок 3 – Одномерный фотонный кристалл,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  – различные диэлектрические проницаемости,  $\Lambda$  – период фотонного кристалла,  $d$  – толщина фотонно-кристаллической пластины

Рассмотрим фотонный кристалл в виде пластины, параллельной плоскости  $y = 0$  и имеющей период  $\Lambda$  вдоль оси  $Ox$ . Для решения системы уравнений (5) применим теорему Блоха и разложим периодическую часть решения в ряд Фурье, как это сделано в уравнении (6)

$$\Phi(x, y) = \exp(ikx) \cdot \varphi(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m(y) \cdot \exp(ik_{xm}x), \quad (6)$$

где  $k$  - волновое число Блоха,  $\varphi(x, y)$  - периодичная вдоль оси  $x$  функция с периодом  $\Lambda$ ,  $k_{xm} = k + \frac{2\pi}{\Lambda}m$ .



Необходимо отметить невозможность осуществления преобразования Фурье для произведения функций  $D_x = \varepsilon(x) \cdot E_x$ , так как нарушается непрерывность на границах однородных слоев, поэтому это равенство переписывается как  $\frac{1}{\varepsilon} D_x = E_x$ . Далее осуществляется преобразование Фурье (7)

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)_{mn} \cdot D_{xn} = E_{xm}, \quad (7)$$

а также учитывается конечное число гармоник  $N$  и формируются конечные матрицы и векторы. Перепишем (7) в следующем виде

$$\begin{pmatrix} D_{x,-N} \\ \dots \\ D_{x,-1} \\ D_{x,0} \\ D_{x,1} \\ \dots \\ D_{x,N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon_0} & \frac{1}{\varepsilon_1} & \frac{1}{\varepsilon_2} & \dots & \frac{1}{\varepsilon_N} \\ \frac{1}{\varepsilon_{-1}} & \frac{1}{\varepsilon_0} & \frac{1}{\varepsilon_1} & \dots & \frac{1}{\varepsilon_{N-1}} \\ \frac{1}{\varepsilon_{-2}} & \frac{1}{\varepsilon_{-1}} & \frac{1}{\varepsilon_0} & \dots & \frac{1}{\varepsilon_{N-2}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{\varepsilon_{-N}} & \frac{1}{\varepsilon_{-N+1}} & \frac{1}{\varepsilon_{-N+2}} & \dots & \frac{1}{\varepsilon_0} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} E_{x,-N} \\ \dots \\ E_{x,-1} \\ E_{x,0} \\ E_{x,1} \\ \dots \\ E_{x,N} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Подстановка выражения (8) в уравнения Максвелла (5) приводят к уравнениям (9) в случае ТЕ-поляризации

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial y} E_z(y) = i\omega\mu_0 H_x(y) \\ iK E_z(y) = i\omega\mu_0 H_y(y) \\ \frac{\partial}{\partial y} H_x(y) - iK H_y(y) = -i\omega[\varepsilon] E_z(y) \end{cases} \quad (9)$$

и к уравнениям (10) случае ТМ-поляризации

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y} H_z(y) = i\omega \left[ \frac{1}{\varepsilon} \right]^{-1} E_x(y) \\ iK H_z(y) = -i\omega[\varepsilon] E_y(y) \\ \frac{\partial}{\partial y} E_x(y) - iK E_y(y) = i\omega\mu_0 H_z(y) \end{cases}, \quad (10)$$

где  $K = \{k_{xm}\}$  – диагональная матрица.

Подставляя первые два уравнения системы (9) в третье, можно получить следующее уравнение

$$\frac{d^2}{dy^2} E_z(y) + (\omega^2\mu_0[\varepsilon] - K^2) E_z(y) = 0. \quad (11)$$

Систему (10) можно записать в следующем виде

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} H_z(y) \\ E_x(y) \end{pmatrix} = i\omega \begin{pmatrix} 0 & [\frac{1}{\varepsilon}]^{-1} \\ \mu_0 \left( I - \frac{1}{\omega^2 \mu_0} K[\varepsilon]^{-1} K \right) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_z(y) \\ E_x(y) \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Будем искать решения (11) и (12) в виде  $\varphi_m(y) = \varphi_m \exp(i\beta y)$ . Получим задачу на собственные значения в случае ТЕ-поляризации

$$\beta^2 \mathbf{e}_z = (\omega^2 \mu_0 [\varepsilon] - K^2) \mathbf{e}_z = M^e \mathbf{e}_z \quad (13)$$

и в случае ТМ-поляризации

$$i\beta \begin{pmatrix} \mathbf{h}_z \\ \mathbf{e}_x \end{pmatrix} = i\omega \begin{pmatrix} 0 & [\frac{1}{\varepsilon}]^{-1} \\ \mu_0 \left( I - \frac{1}{\omega^2 \mu_0} K[\varepsilon]^{-1} K \right) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_z \\ \mathbf{e}_x \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где  $\mathbf{e}$  и  $\mathbf{h}$  - амплитуды полей в разложении в ряд Фурье

Видоизменим уравнение (14), домножив левую часть на  $i\beta$  и возводя в квадрат матрицу в правой части. Таким образом, матричная задача на собственные значения в случае ТМ-поляризации переписывается в виде (15)

$$\beta^2 \begin{pmatrix} \mathbf{h}_z \\ \mathbf{e}_x \end{pmatrix} = M^h \begin{pmatrix} \mathbf{h}_z \\ \mathbf{e}_x \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$M^h = \omega^2 \mu_0 \begin{pmatrix} [\frac{1}{\varepsilon}]^{-1} \left( I - \frac{1}{\omega^2 \mu_0} K[\varepsilon]^{-1} K \right) & 0 \\ 0 & \left( I - \frac{1}{\omega^2 \mu_0} K[\varepsilon]^{-1} K \right) [\frac{1}{\varepsilon}]^{-1} \end{pmatrix}.$$

Численно решая уравнения (13) и (15), получим наборы собственных значений  $\{\beta_m^e\}$  и  $\{\beta_m^h\}$  и собственных векторов  $\mathbf{e}_z$  и  $\mathbf{e}_x, \mathbf{h}_z$ , соответственно. Выполняя описанные выше действия, можно получить значения поля внутри бесконечного фотонного кристалла.

Следующим шагом необходимо записать разложение поля по плоским волнам в случае однородной среды и применить граничные условия (16) на непрерывность тангенциальных компонент полей на границах  $y = \pm d/2$

$$\begin{cases} E_{x,z}(y = \pm d/2 - 0) = E_{x,z}(y = \pm d/2 + 0) \\ H_{x,z}(y = \pm d/2 - 0) = H_{x,z}(y = \pm d/2 + 0) \end{cases}. \quad (16)$$

Разложение поля по плоским волнам в рассматриваемой периодической задаче в однородной среде записывается в виде (17)

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-N}^N \exp(ik_{xm}x) \begin{bmatrix} (a_m^{e+} e^{e+} - \frac{k}{\omega\varepsilon} a_m^{h+} e^{h+}) \exp(ik_{ym}y) + \\ (a_m^{e-} e^{e-} - \frac{k}{\omega\varepsilon} a_m^{h-} e^{h-}) \exp(-ik_{ym}y) \end{bmatrix} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-N}^N \exp(ik_{xm}x) \begin{bmatrix} (a_m^{h+} e^{e+} + \frac{k}{\omega\mu} a_m^{e+} e^{h+}) \exp(ik_{ym}y) + \\ (a_m^{h-} e^{e-} + \frac{k}{\omega\mu} a_m^{e-} e^{h-}) \exp(-ik_{ym}y) \end{bmatrix} \end{cases} . \quad (17)$$

Рассмотрим детально процесс «сшивки» полей на границах на примере ТЕ-поляризованной волны. В случае ТМ-поляризации необходимо проделать аналогичные действия. Разложение поля в нижнем однородном полупространстве (область  $y < -d/2$ ) с параметрами  $\varepsilon = \varepsilon_1$ ,  $\mu = \mu_0$  и  $k_{ym}^{(1)} = \sqrt{\omega^2 \varepsilon_1 \mu_0 - k_{xm}^2}$  запишется в виде (18)

$$\begin{pmatrix} E_z \\ H_x \end{pmatrix} = \sum_{m=-N}^N \exp(ik_{xm}x) \begin{bmatrix} \left( \frac{a_m^{e+}}{\omega\mu_0} \right) \exp\{ik_{ym}^{(1)}(z + d/2)\} + \\ \left( \frac{a_m^{e-}}{\omega\mu_0} \right) \exp\{-ik_{ym}^{(1)}(z + d/2)\} \end{bmatrix} . \quad (18)$$

Аналогичным образом можно записать поле в верхнем однородном полупространстве (область  $y > d/2$ ) с параметрами  $\varepsilon = \varepsilon_2$ ,  $\mu = \mu_0$  и  $k_{ym}^{(2)} = \sqrt{\omega^2 \varepsilon_2 \mu_0 - k_{xm}^2}$  в виде (19)

$$\begin{pmatrix} E_z \\ H_x \end{pmatrix} = \sum_{m=-N}^N \exp(ik_{xm}x) \begin{bmatrix} \left( \frac{b_m^{e+}}{\omega\mu_0} \right) \exp\{ik_{ym}^{(2)}(z + d/2)\} + \\ \left( \frac{b_m^{e-}}{\omega\mu_0} \right) \exp\{-ik_{ym}^{(2)}(z + d/2)\} \end{bmatrix} . \quad (19)$$

Разложение поля по плоским волнам внутри фотонного кристалла, полученное на предыдущем шаге, имеет вид (20)

$$\begin{pmatrix} E_z \\ H_x \end{pmatrix} = \sum_{m=-N}^N \exp(ik_{xm}x) \sum_{q=-N}^N [c_q^+ \exp(i\beta_q y) + c_q^- \exp(-i\beta_q y)] \begin{pmatrix} e_{zqm} \\ h_{xqm} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Применим граничные условия (16) с учетом  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ik_{xm}x) \exp(ik_{xn}x) dx = \delta_n^m$  и получим следующие уравнения

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_{ym}^{(1)}}{\omega\mu_0} & -\frac{k_{ym}^{(1)}}{\omega\mu_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_m^{e+} \\ a_m^{e-} \end{pmatrix} = \sum_{q=-N}^N \begin{pmatrix} e_{zqm} & e_{zqm} \\ h_{xqm} & h_{xqm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-i\beta_q d/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\beta_q d/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_q^+ \\ c_q^- \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_{ym}^{(2)}}{\omega\mu_0} & -\frac{k_{ym}^{(2)}}{\omega\mu_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_m^{e+} \\ b_m^{e-} \end{pmatrix} = \sum_{q=-N}^N \begin{pmatrix} e_{zqm} & e_{zqm} \\ h_{xqm} & h_{xqm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(i\beta_q d/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\beta_q d/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_q^+ \\ c_q^- \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Перепишем уравнения (21) и (22) в виде (23) и (24), соответственно

$$\begin{pmatrix} a_m^{e+} \\ b_m^{e-} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\omega\mu_0}{k_{ym}^{(1)}} \\ 1 & -\frac{\omega\mu_0}{k_{ym}^{(1)}} \end{pmatrix} \cdot \sum_{q=-N}^N \exp(-i\beta_q d/2) \begin{pmatrix} e_{zqm} & 0 \\ 0 & h_{xqm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \exp(i\beta_q d) \\ \exp(i\beta_q d) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_q^+ \\ c_q^- \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$\begin{pmatrix} a_m^{e-} \\ b_m^{e+} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\omega\mu_0}{k_{ym}^{(1)}} \\ 1 & \frac{\omega\mu_0}{k_{ym}^{(2)}} \end{pmatrix} \cdot \sum_{q=-N}^N \exp(-i\beta_q d/2) \begin{pmatrix} h_{zqm} & 0 \\ 0 & e_{xqm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \exp(i\beta_q d) \\ \exp(i\beta_q d) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_q^+ \\ c_q^- \end{pmatrix}. \quad (24)$$

в матрично-векторной форме уравнения (23) и (24) можно записать в виде (25) и (26), соответственно

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{e+} \\ \mathbf{b}^{e-} \end{pmatrix} = Q_1 \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{e-} \\ \mathbf{b}^{e+} \end{pmatrix} = Q_2 \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix}. \quad (26)$$

На основании уравнений (25) и (26) можно записать уравнение (27)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{e-} \\ \mathbf{b}^{e+} \end{pmatrix} = Q_2(Q_1)^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{e+} \\ \mathbf{b}^{e-} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{e+} \\ \mathbf{b}^{e-} \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где  $S^e$  – матрица рассеяния фотонно-кристаллической пластины, параллельной плоскости  $y = 0$  и заполняющей пространство в области  $-\frac{d}{2} \leq y \leq \frac{d}{2}$ .

Таким образом, с помощью Фурье-модального метода можно сформировать  $S$ -матрицу фотонно-кристаллической пластины, связывающую падающее на нее поле с рассеянным.

### 1.3 Алгоритм восстановления дифференциальных уравнений на основе данных

В данном разделе описывается метод восстановления дифференциальных уравнений на основе данных. В предлагаемом методе используется комбинация эволюционного алгоритма и разреженной регрессии.

#### 1.3.1 Постановка задачи

Рассмотрим общую постановку задачи, для которой может быть применен описываемый алгоритм восстановления ДУ на осве данных. Пусть есть некоторая скалярная функция  $u$  заданная в области  $\Omega$  (для простоты рассмотрим случай зависимости от времени и двух пространственных координат). В общем случае искомое дифференциальное уравнение можно записать в виде (28). Коэффициенты в уравнении (28) могут быть произвольными функциями

$$\begin{cases} F(u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \dots, x) = 0 \\ G(x) = 0, x \in \Gamma(\Omega) \times [0, T] \end{cases}. \quad (28)$$

На вход алгоритму подается дискретное множество точек  $\{(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, t)\}_{i=1}^n, \forall (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, t) \in \Gamma(\Omega) \times [0, T]$  и соответствующее им множество  $U = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  значений функций в точках  $u_i = u(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, t)$ . Также задается некоторый набор ограничений на вид уравнения (например, максимальный порядок производных). Итогом работы алгоритма является восстановленное по заданным множествам  $\{(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, t)\}_{i=1}^n$  и  $U$  уравнение (28).

Для восстановления ДУ формируется модель вида (29), представляющая собой линейную комбинацию слагаемых  $t(x) = \prod_{j=1}^{N_{\text{tokens}}} \phi_j$  ( $N_{\text{tokens}}$  – гиперпараметр алгоритма)

$$F(x) = \sum_i c_i t_i(x). \quad (29)$$

Множители в каждом слагаемом выбираются из различных наборов операторов одинаковой природы  $\phi_j \in \Phi = \bigcup_j \Phi_j$ . Например, такой набор может быть представлен простейшими тригонометрическими функциями  $\Phi_j = \{\sin x_1, \cos x_1, \sin x_2, \cos x_2, \dots\}$  или операторами дифференцирования  $\Phi_j = \{u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots\}$ . Поиск уравнения в предложенном виде позволяет рассматривать не только уравнения с постоянными коэффициентами, но и с коэффициентами в виде различных функций.

Предполагается, что в процессе восстановления ДУ шум  $E_{x_j}$  в направлении  $x_j$  описывается условием вида (30)

$$E_{x_j}(u(x_1, \dots, x_n, t)) = u(\bar{x}_1, \dots, x_j, \dots, \bar{x}_n, t) + \varepsilon(x_j), \quad (30)$$

где  $\bar{x}_i$  – «фиксированные» переменные,  $\varepsilon(x_i)$  – шум (предполагается  $\varepsilon \sim N(0, \sigma)$ ). Для получения многонаправленного шума строится суперпозиция однонаправленных шумов, то есть  $E_{x_j, x_k} = E_{x_j} \circ E_{x_k}$ .

### 1.3.2 Предобработка данных

Как правило, на вход алгоритму подаются только значения самой исследуемой величины на сетке. В связи с этим для формирования ДУ необходимо вычислять значения производных исследуемой величины. Для более корректного расчета значений производных по известным данным с учетом шума на этапе предобработки используется сглаживание исходных данных, а

также устойчивая к помехам схема численного дифференцирования. Для получения значений производной осуществляется дифференцирование интерполяционного полинома, построенного по сглаженному набору подающихся на вход точек.

### 1.3.3 Описание алгоритма

Задача восстановления ДУ разделяется на две основные подзадачи: определение структуры ДУ (под структурой следует понимать набор слагаемых, присутствующих в ДУ) и вычисление вещественных коэффициентов, с которыми слагаемые входят в уравнение. Для определения структуры уравнения используется эволюционный алгоритм, а для вычисления коэффициентов в ДУ регуляризованная регрессия.

В процессе работы алгоритма используются значения операторов  $\phi_i \in \Phi$ , рассчитанные на сетке, с помощью которых могут быть построены векторы вида (31), формирующие слагаемые в искомом уравнении

$$f_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}; f_2 = \begin{pmatrix} u(t_0, x_0) \\ \vdots \\ u(t_i, x_j) \\ \vdots \\ u(t_m, x_n) \end{pmatrix}; f_3 = \begin{pmatrix} u_x(t_0, x_0) \\ \vdots \\ u_x(t_i, x_j) \\ \vdots \\ u_x(t_m, x_n) \end{pmatrix}; \dots \quad (31)$$

Пример гена, используемого в генетическом алгоритме, приведен в выражении (32)

$$F'_k = f_2 \odot f_3 = \begin{pmatrix} u(t_0, x_0) * u_x(t_0, x_0) \\ \vdots \\ u(t_i, x_j) * u_x(t_i, x_j) \\ \vdots \\ u(t_m, x_n) * u_x(t_m, x_n) \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Используя значения функции, ее производных, а также различных семейств функций (например, тригонометрических), можно сформировать вектор  $F'_k$  как поэлементное произведение. Также вектор  $F'_k$  нормируется для каждого значения времени (33)

$$F_k = \begin{pmatrix} \frac{u(t_0, x_0) * u_x(t_0, x_0)}{\|f_2(t_0) \odot f_3(t_0)\|} \\ \vdots \\ \frac{u(t_i, x_j) * u_x(t_i, x_j)}{\|f_2(t_i) \odot f_3(t_i)\|} \\ \vdots \\ \frac{u(t_m, x_n) * u_x(t_m, x_n)}{\|f_2(t_m) \odot f_3(t_m)\|} \end{pmatrix}. \quad (33)$$

На этом этапе может быть использована произвольная метрика, но обычно используются  $L_2$  или  $L_\infty$ .

Далее происходит подбор слагаемых в ДУ с помощью генетического алгоритма. В начале формируется случайный набор возможных уравнений, называемый популяцией. Для формирования каждой особи в популяции из полного набора слагаемых вида (33) случайным образом выбирается одно, которое аппроксимируется линейной комбинацией остальных слагаемых. Это слагаемое можно интерпретировать как правую часть уравнения, в то время как линейная комбинация остальных будет интерпретироваться как левая часть. Для проведения отбора вводится функция соответствия (34)

$$f_{\text{fitness}} = \frac{1}{\|F \cdot \alpha - F_{\text{target}}\|_2} \longrightarrow \max, \quad (34)$$

где  $\alpha$  – вектор весов,  $F$  – набор признаков, линейная комбинация которых с весами  $\alpha$  составляет левую часть уравнения. Таким образом, задача генетического алгоритма сводится к задаче получения структуры уравнения с наибольшим значением функции соответствия.

Эволюция особей в генетическом алгоритме происходит как путем мутации, так и путем кроссинговера. Мутациям соответствуют случайные изменения (добавление, удаление или изменение) слагаемых в левой части. Также на каждом шаге алгоритма выделяется особь с наибольшим значением функции соответствия. Кроссинговер – часть эволюционного механизма, представляющая собой обмен генами между двумя особями в популяции для получения потомства с большим значением функции соответствия. В рассматриваемом алгоритме кроссинговер реализован как обмен слагаемыми между уравнениями.

Следующим шагом является применение разряженной регрессии. Для каждого уравнения в популяции применяются оператор вида (35)



$$||F\alpha - F_{\text{target}}||_2^2 + \lambda ||\alpha||_1 \longrightarrow \min_{\alpha}. \quad (35)$$

Описанные действия повторяются многократно, на выходе получается ДУ с наибольшим значением функции соответствия. К полученному ДУ применяется линейная регрессия для окончательного определения коэффициентов в уравнении. Псевдокод алгоритма приведен в приложении А.

#### 1.4 Алгоритм численного решения дифференциальных уравнений с использованием методов машинного обучения

В данном разделе описан метод решения дифференциальных уравнений, основанный на данных.

Рассмотрим краевую задачу (36) для уравнения в частных производных, заданную в области  $\Omega \in \mathbb{R}^n$  с границей  $\partial\Omega$

$$\begin{cases} Lu = f|_{\Omega} \\ bu = g|_{\partial\Omega} \end{cases}, \quad (36)$$

где  $L$  – дифференциальный оператор,  $b$  – оператор, задающий граничные условия,  $f, g$  – произвольные функции.

Предположим, что  $\Omega \in \mathbb{R}^2$ . Для простоты будем считать, что имеются значения функции  $u(x, t)$ , зависящей от времени и одной пространственной координаты, на двумерной сетке (37)

$$\begin{aligned} \bar{u} = \{u(x^{(i)}, t^{(i)}), i = 1, 2, \dots, n\} \\ \forall i(x^{(i)}, t^{(i)}) \in \Omega \end{aligned} \quad (37)$$

Для использования машинного обучения необходимо сформулировать следующую задачу минимизации

$$\min_{\bar{u}} \{ ||L\bar{u} - f||_i + \lambda ||b\bar{u} - g||_j \}, \quad (38)$$

где  $||\cdot||_i$  и  $||\cdot||_j$  – произвольные нормы, обычно выбираются нормы  $||\cdot||_i = L_2$  и  $||\cdot||_j = L_1$ .  $\lambda \leq 0$  – произвольная функция, выбор которой влияет только на скорость сходимости алгоритма.

В действительности операторы  $L$  и  $b$  могут быть известны с некоторой ошибкой. Поэтому задача минимизации переписывается в виде (39)

$$\min_{\bar{u}} \{ \|\bar{L}\bar{u} - f\|_2 + \lambda \|\bar{b}\bar{u} - g\|_1 \} \Big|_X, \quad (39)$$

где  $\bar{L}$  и  $\bar{b}$  – приближения дифференциального оператора и оператора, задающего граничные условия (производные заменяются приближенными значениями),  $X = \{(x^{(i)}, t^{(i)})\}$  – двумерная сетка, значения функции  $\bar{u}$  берутся на сетке.

Для построения численного решения  $u(x, t)$  уравнения  $Lu = f$  аппроксимируется непрерывной функцией  $u(x, t, \Theta) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ , которая зависит от набора параметров  $\Theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N\}$ , который определяется формой аппроксимирующей функции. Например,  $u(x, t, \Theta) = \theta_1 x + \theta_2 t + \theta_3$  соответствует линейной регрессии. Также в качестве аппроксимирующей функции может быть выбрана нейронная сеть.

Окончательное выражение для нахождения оптимального набора параметров записывается в виде (40)

$$\min_{\Theta} \{ \|\bar{L}\bar{u}(x, t, \Theta) - f\|_2 + \lambda \|\bar{b}\bar{u}(x, t, \Theta) - g\|_1 \} \Big|_X. \quad (40)$$

## 2 Численное моделирование

В данной главе приведено описание изучаемой системы и представлены результаты численного моделирования процесса распространения излучения в сильно неоднородной рассеивающей среде с помощью языка программирования MATLAB, а также результаты восстановления дифференциальных уравнений по результатам численного моделирования и получения их численных решений с помощью библиотек EPDE и TEDEouS на языке программирования Python.

### 2.1 Получение данных

В работе исследовалась двумерная подложка конечной толщины с диэлектрическими цилиндрическими включениями, имеющая периодичность вдоль горизонтальной оси  $Ox$  и расположенная в свободном пространстве. Падающая на подложку волна распространялась вдоль вертикальной оси  $Oy$ . Общая схема исследуемой системы представлена на рисунке 4.

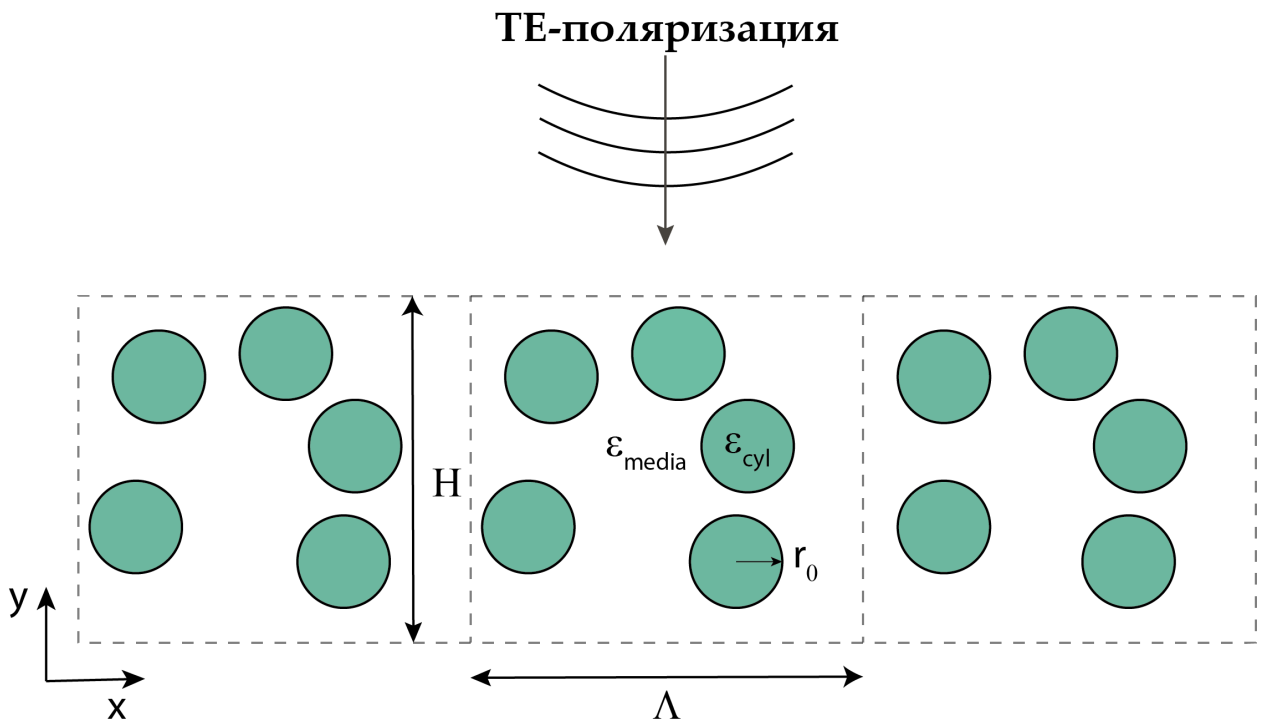


Рисунок 4 – Общая схема исследуемой двумерной системы,  $\epsilon_{cyl}$  – диэлектрическая проницаемость цилиндрических включений,  $\epsilon_{media}$  – диэлектрическая проницаемость пространства между диэлектрическими включениями,  $H$  – толщина подложки,  $\Lambda$  – период суперячейки

Падающее на исследуемую структуру поле представляло собой TE-поляризованную плоскую монохроматическую волну, длина волны которой составляла  $\lambda = 0.5$  мкм. Полная толщина  $H = 50$  мкм ( $\frac{H}{\lambda} = 100$  в безраз-

мерных единицах), период  $\Lambda = 15$  мкм ( $\frac{\Lambda}{\lambda} = 30$  в безразмерных единицах). Область между цилиндрическими включениями заполнена свободным пространством с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_{\text{media}} = 1$ . Диэлектрическая проницаемость включений составляет  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ . Плотность упаковки включений составляла  $n = 0.3$ . Радиусы цилиндров были одинаковыми в ходе каждого запуска, в общем случае включения внутри подложки могут иметь разные радиусы.

Для моделирования процесса распространения электромагнитной волны подложка «разрезалась» на тонкие слои равной толщины (каждый цилиндр разбивался на 41 равную часть), как это показано на рисунке 5. Затем на каждом слое применялся Фурье-модальный метод с учетом  $N = 150$  гармоник Фурье, с помощью которого формировалась матрица рассеяния ( $S$ -матрица) размера  $2N \times 2N$  рассматриваемого тонкого слоя. Чтобы рассчитать поле на произвольном расстоянии от поверхности подложки, с помощью правила перемножения  $S$ -матриц (приложение Б) формировались матрицы рассеяния верхней  $S_{\text{up}}$  и нижней  $S_{\text{down}}$  относительно рассматриваемого слоя частей.

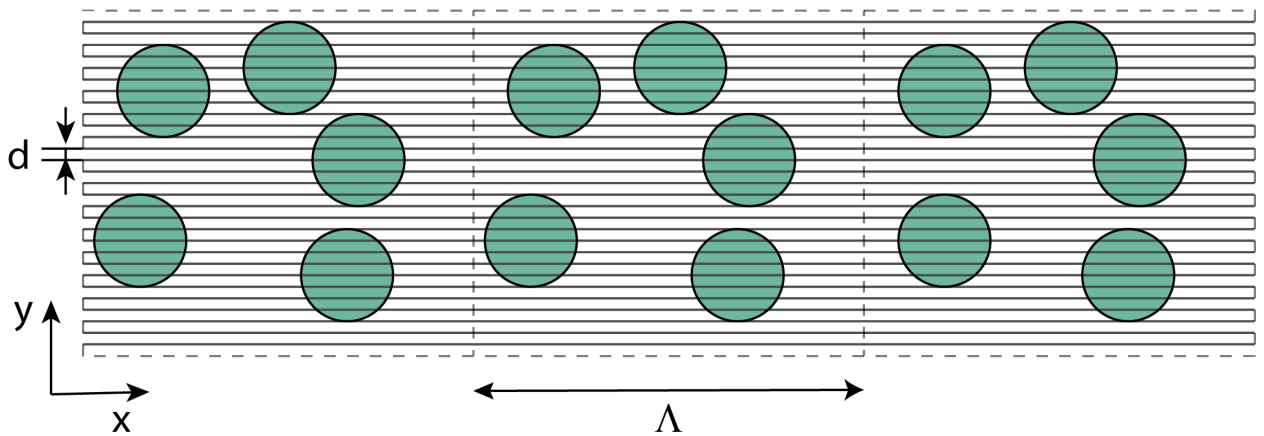


Рисунок 5 – «Разрезание» подложки на слои равной толщины  $d \ll H$

Затем на каждом слое (рисунок 6) применялся Фурье-модальный метод с учетом  $N = 150$  гармоник Фурье, с помощью которого формировалась матрица рассеяния ( $S$ -матрица) размера  $2N \times 2N$  рассматриваемого слоя.

Чтобы рассчитать поле на произвольном расстоянии от поверхности подложки, с помощью правила перемножения  $S$ -матриц (приложение Б) формировались матрицы рассеяния верхней  $S_{\text{up}}$  и нижней  $S_{\text{down}}$  частей, как показано на рисунке 7.

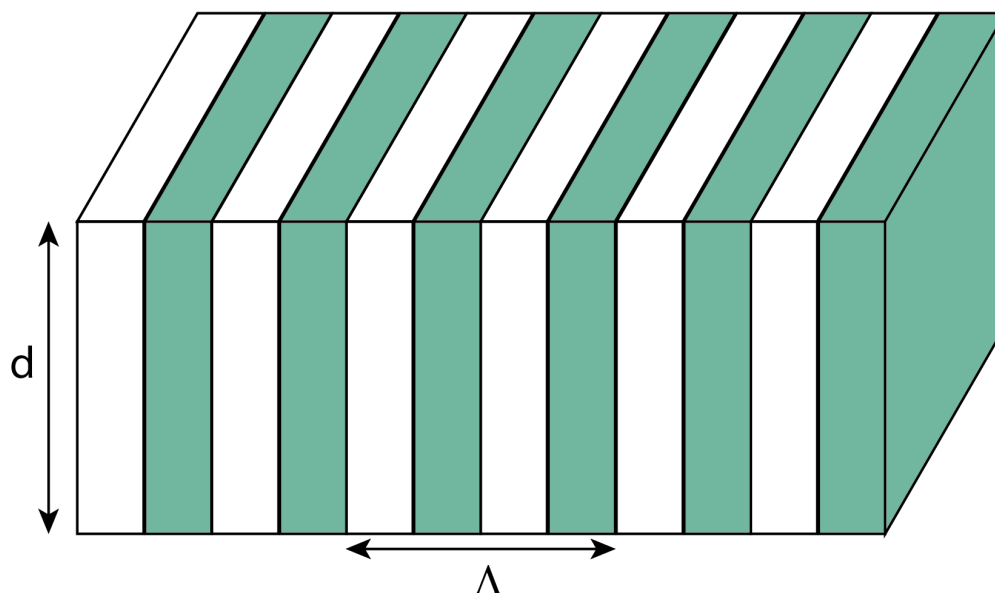


Рисунок 6 – Общая схема одиночного слоя толщины  $d \ll H$  для применения Фурье-модального метода

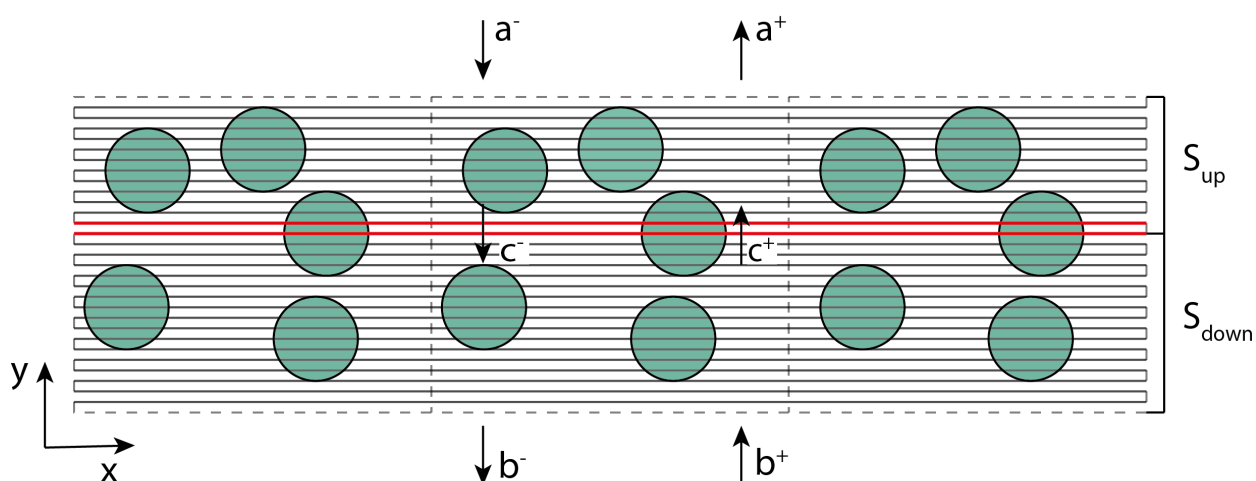


Рисунок 7 – Формирование матриц рассеяния верхней и нижней частей подложки,  $a^\pm$  – амплитуды гармоник Фурье, распространяющихся в верхнем однородном полупространстве,  $b^\pm$  – амплитуды гармоник Фурье, распространяющихся в нижнем однородном полупространстве,  $c^\pm$  – амплитуды гармоник Фурье, возникающих внутри неоднородного слоя, знаки  $\pm$  соответствуют направлению распространения относительно оси  $Oy$ ,  $S_{up}$ ,  $S_{down}$  – матрицы рассеяния верхней и нижней частей соответственно

По известным матрицам рассеяния  $S_{up}$  и  $S_{down}$  верхней и нижней частей неоднородного слоя и падающим на подложку амплитудам  $a^-$  и  $b^+$ , можно рассчитать амплитуды  $c^\pm$  распространяющихся внутри слоя волн (рисунок 8).

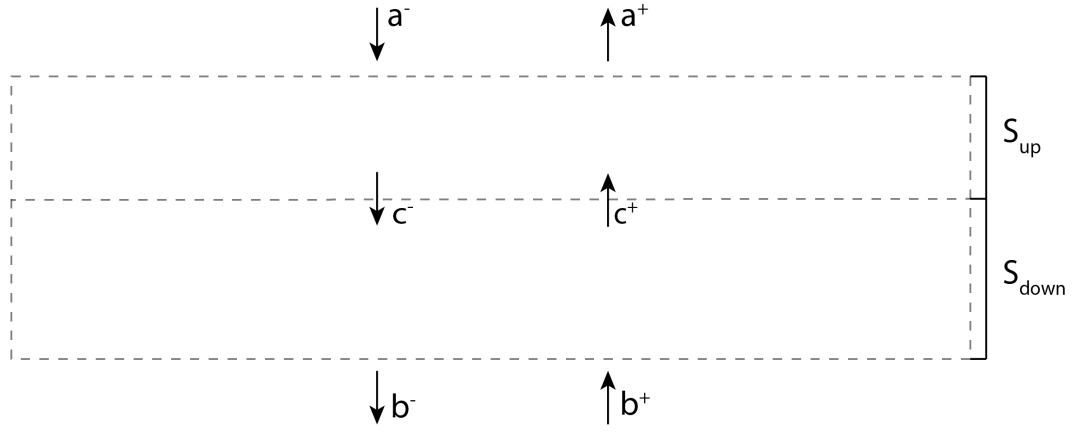


Рисунок 8 – Расчет гармоник Фурье внутри неоднородного слоя,  $a^{\pm}$  – амплитуды гармоник Фурье, распространяющихся в верхнем однородном полупространстве,  $b^{\pm}$  – амплитуды гармоник Фурье, распространяющихся в нижнем однородном полупространстве,  $c^{\pm}$  – амплитуды гармоник Фурье, возникающих внутри неоднородного слоя, знаки  $\pm$  соответствуют направлению распространения относительно оси  $Oy$ ,  $S_{up}$ ,  $S_{down}$  – матрицы рассеяния верхней и нижней частей соответственно

Пользуясь определением матрицы рассеяния для верхнего неоднородного слоя, можно записать следующее матрично-векторное уравнение

$$\begin{pmatrix} c^- \\ a^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{up}^{11} & S_{up}^{12} \\ S_{up}^{21} & S_{up}^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^+ \\ a^- \end{pmatrix} \quad (41)$$

аналогично для нижнего неоднородного слоя

$$\begin{pmatrix} b^- \\ c^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{down}^{11} & S_{down}^{12} \\ S_{down}^{21} & S_{down}^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^+ \\ c^- \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Из уравнений (41) и (42) следует система линейных уравнений на  $c^{\pm}$

$$\begin{cases} c^- = S_{up}^{11} c^+ + S_{up}^{12} a^- \\ c^+ = S_{down}^{21} b^+ + S_{down}^{22} c^- \end{cases}. \quad (43)$$

Из системы (43) подстановкой уравнений друг в друга можно найти амплитуды гармоник  $c^{\pm}$  (44)

$$\begin{cases} c^- = (I - S_{up}^{11} S_{down}^{22})^{-1} \cdot (S_{up}^{11} S_{down}^{21} b^+ + S_{up}^{12} a^-) \\ c^+ = (I - S_{down}^{22} S_{up}^{11})^{-1} \cdot (S_{down}^{21} b^+ + S_{down}^{22} S_{up}^{12} a^-) \end{cases}, \quad (44)$$

где  $I$  – единичная матрица.

Необходимо отметить, что в случае, когда учитывается  $N$  гармоник в разложении поля в ряд Фурье, матрицы рассеяния  $S_{\text{up}}$  и  $S_{\text{down}}$  являются блочными, каждый блок  $S^{ij}; i, j \in \{1, 2\}$  таких матриц имеет размер  $N \times N$  элементов.

После расчета поля внутри неоднородного слоя можно рассчитать проекцию вектора Пойнтинга на направление распространения для каждой из учитываемых гармоник Фурье. Для расчета проекции вектора Пойнтинга ТЕ-поляризованной плоской волны в однородной среде в соответствии с [22] можно воспользоваться формулой (45)

$$I_y = \frac{1}{2} \left( \frac{\text{Re}(k_y)}{\omega \mu_0} |\mathbf{c}_{\text{TE}}^+|^2 - \frac{\text{Re}(k_y)}{\omega \mu_0} |\mathbf{c}_{\text{TE}}^-|^2 \right), \quad (45)$$

где  $\mathbf{c}_{\text{TE}}^\pm$  – амплитуды гармоник Фурье, распространяющихся в положительном и отрицательном направлениях оси  $Oy$ ,  $k_y$  – проекция волнового вектора на вертикальную ось  $Oy$ ,  $\omega$  – частота. Но при распространении волны в неоднородной среде выражение (45) приводит к ошибкам, так как в этом случае необходим учет вклада от интерференционных слагаемых, как это показано в уравнении (46)

$$I_y = \frac{1}{2} \left( \frac{\text{Re}(k_y)}{\omega \mu_0} |\mathbf{c}_{\text{TE}}^+|^2 - \frac{\text{Re}(k_y)}{\omega \mu_0} |\mathbf{c}_{\text{TE}}^-|^2 \right) - \frac{\text{Im}(k_y)}{\omega \mu_0} \text{Im}(\mathbf{c}_{\text{TE}}^+ \mathbf{c}_{\text{TE}}^{-*}). \quad (46)$$

Так как диэлектрическая проницаемость цилиндрических включений является чисто действительной, суммарная энергия, переносимая всеми учитываемыми гармониками Фурье, остается неизменной при распространении волны вдоль вертикальной оси внутри подложки в силу отсутствия диссипации. В качестве данных для дальнейшего восстановления дифференциальных уравнений сохранялись значения проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье  $I_{0,y}(H)$ . В дальнейшем опустим индексы у  $I_{0,y}(H)$  и будем записывать  $I$ . В ходе работы были получены данные для различных значений радиусов цилиндров  $r_0 = 0,1; 0,2; 0,3; \dots; 1,0$  мкм. Для каждого значения радиуса окончательные данные получались путем усреднения по 250 реализациям подложек с различным расположением рассеивающих цилиндрических включений.

## 2.2 Восстановление и решение дифференциальных уравнений

Для восстановления и решения ДУ использовались библиотеки EPDE и TEDEouS для языка программирования Python. В качестве уравнений, описывающих перенос энергии нулевой гармоникой Фурье при распространении излучения в неоднородной среде, рассматривались уравнения вида (47)

$$C_1 \frac{d^2 I}{dH^2} + C_2 \frac{dI}{dH} = C_3 I + C_4 I^2 + C_5 I^3 + C_6 I^4 + C_7. \quad (47)$$

При распространении волны в неоднородной среде с низкой концентрацией рассеивающих частиц в предположении однократного рассеяния на частице изменение интенсивности может быть описано линейным дифференциальным уравнением. В случае среды с высокой концентрацией частиц нельзя пренебрегать многократным рассеянием и следует ожидать отклонений от линейности. Строгое рассмотрение уравнения вида (11) приводит к уравнениям, содержащим степени некоторых матриц [23, 24].

На рисунке 9 представлены данные для восстановленного уравнения  $\frac{dI}{dH} = -0,025 - 39,643 \cdot I$  для  $r_0 = 0,1$  мкм.

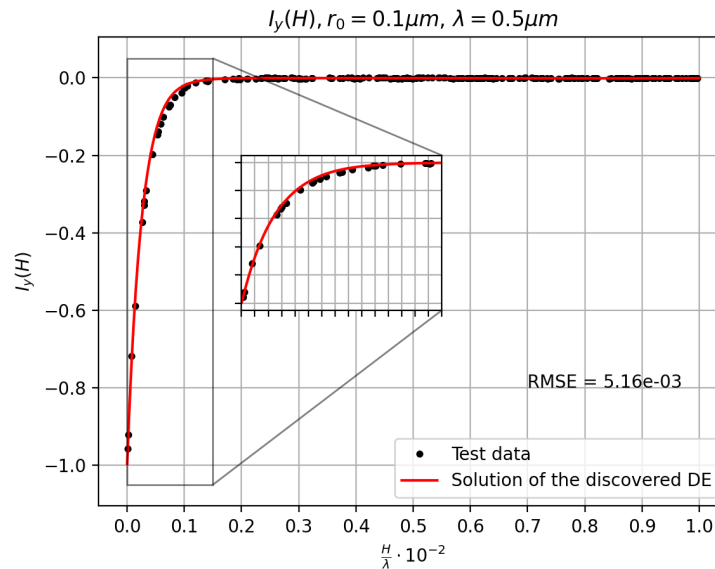


Рисунок 9 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоникой Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ вида (47), красная линия – численное решение ДУ, точки – данные, полученные с использованием ФММ,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 0,2$

На рисунке 10 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,264 - 298,977 \cdot I - 266,903 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,2$  мкм.



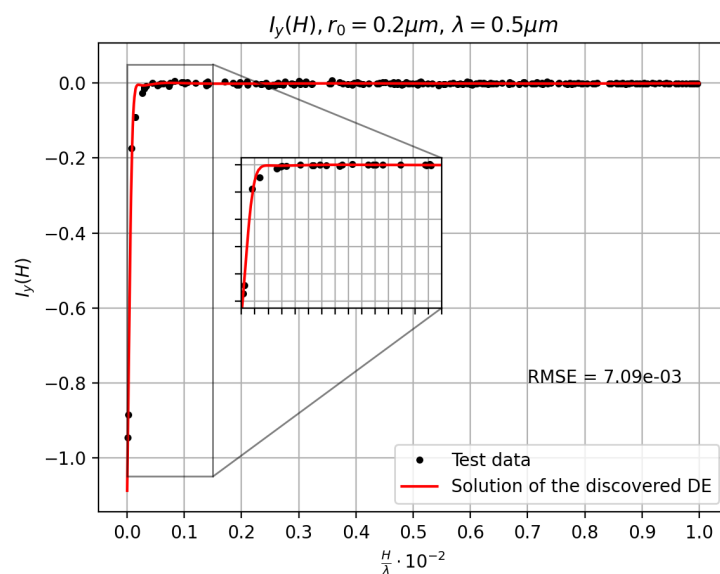


Рисунок 10 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 0,4$

На рисунке 11 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,033 - 48,654 \cdot I + 77,228 \cdot I^2 - 647,788 \cdot I^3 - 792,371 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,3$  мкм.

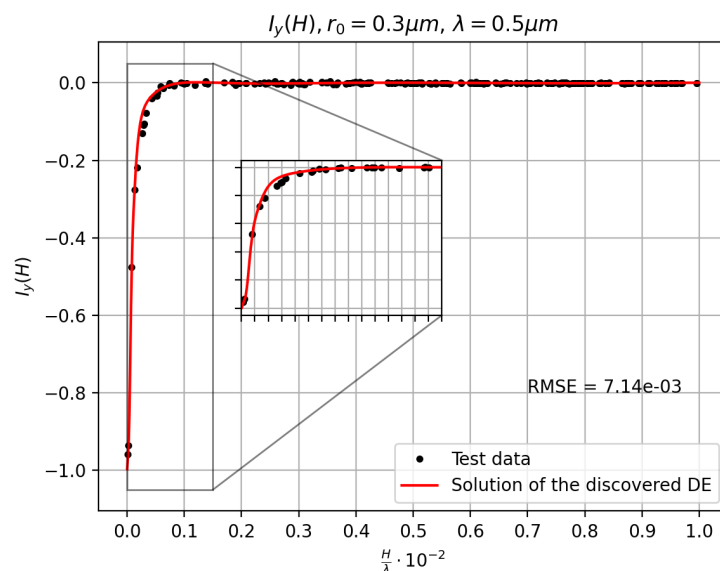


Рисунок 11 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 0,6$

На рисунке 12 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,265 - 154,711 \cdot I - 121,977 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,4$  мкм.

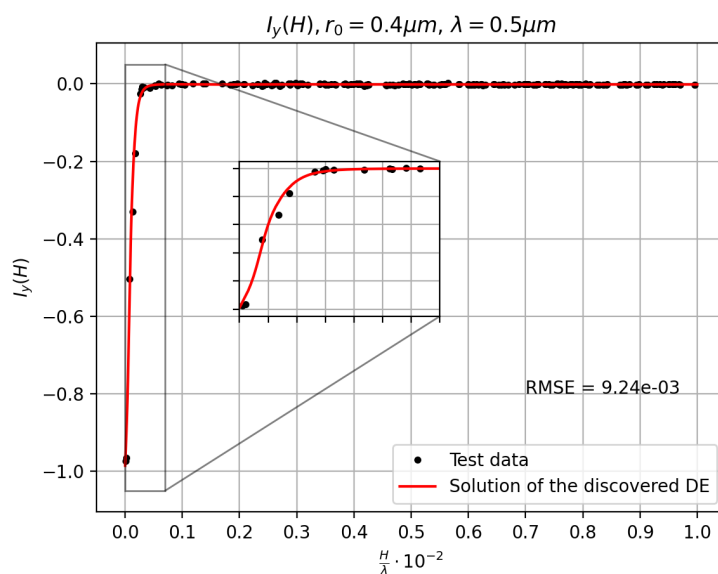


Рисунок 12 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 0,8$

На рисунке 13 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,029 - 22,563 \cdot I + 118,183 \cdot I^2 - 120,698 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,5$  мкм.

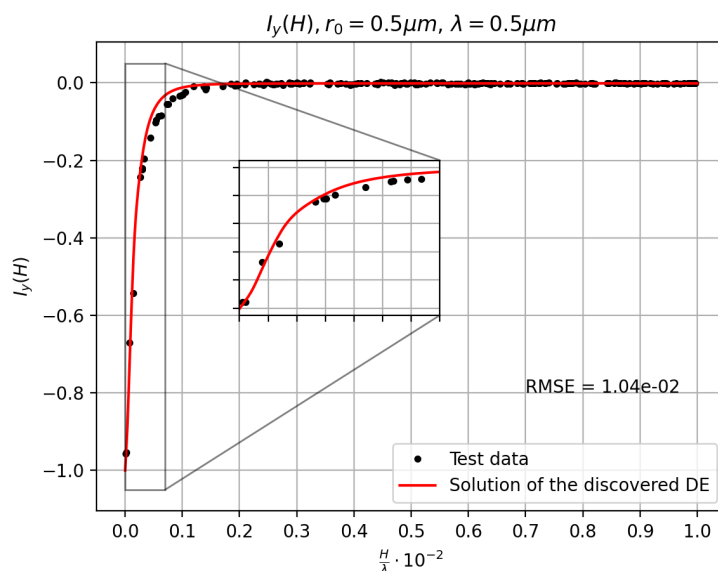


Рисунок 13 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 1$

На рисунке 14 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,143 - 67,331 \cdot I - 33,340 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,6$  мкм.

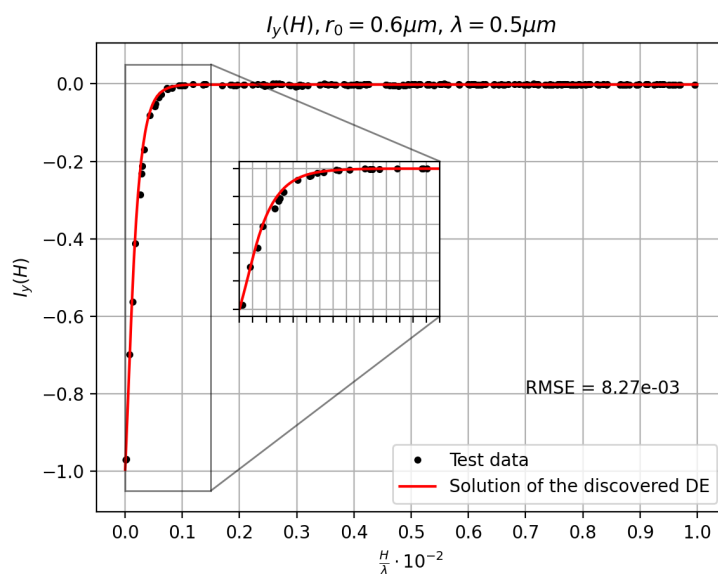


Рисунок 14 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 1,2$

На рисунке 15 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,206 - 57,413 \cdot I - 30,530 \cdot I^4 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,7$  мкм.

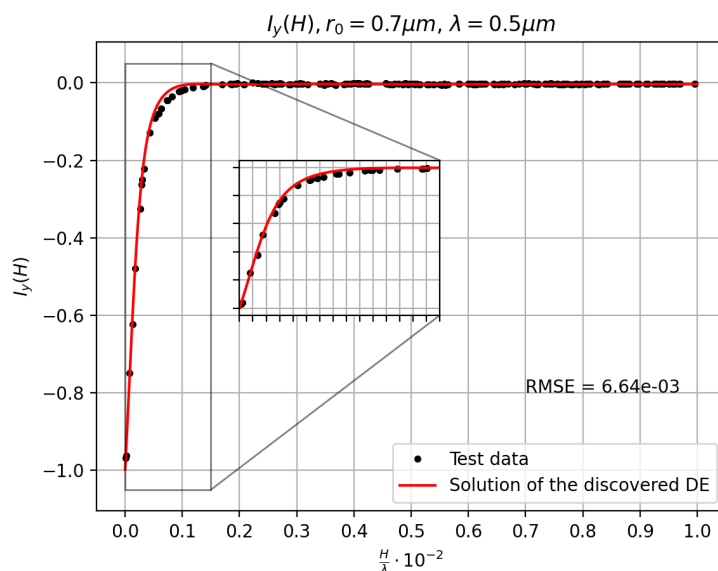


Рисунок 15 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 1,4$

На рисунке 16 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0,100 - 31,375 \cdot I + 6,632 \cdot I^2 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,8$  мкм.

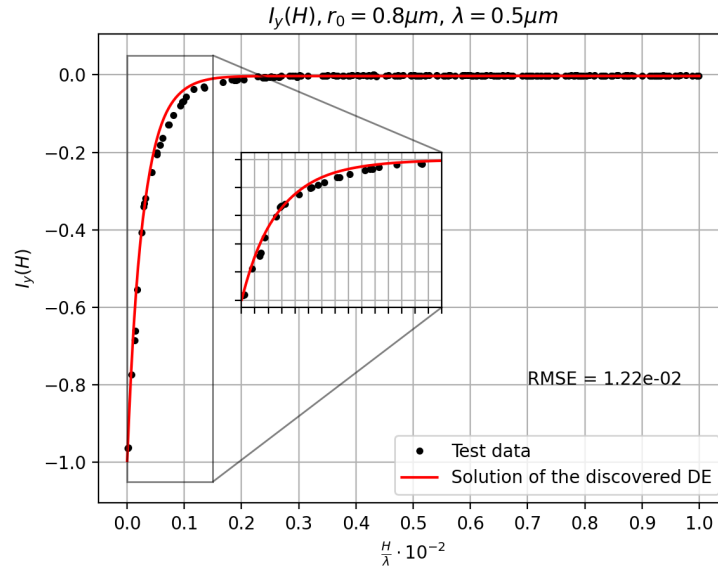


Рисунок 16 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 1,6$

На рисунке 17 представлены данные для восстановленного уравнения  $-0.179 - 54.001 \cdot I + 37.467 \cdot I^3 = \frac{dI}{dH}$  для  $r_0 = 0,9$  мкм.

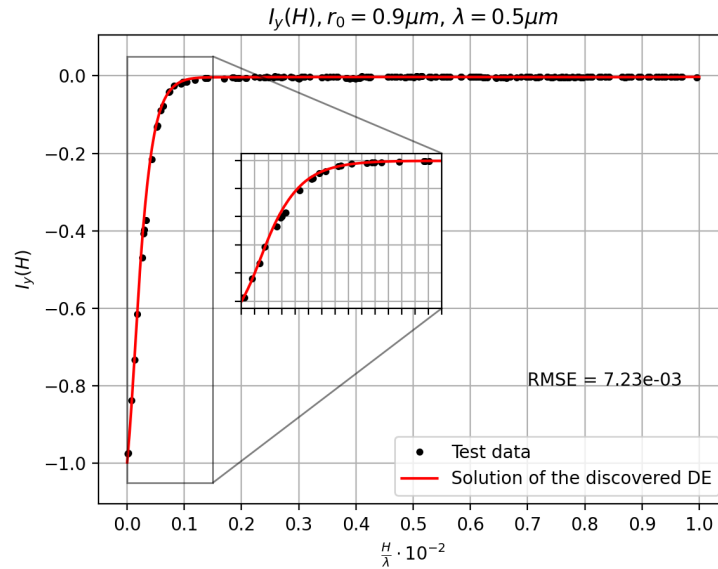


Рисунок 17 – График зависимости проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на вертикальную ось от толщины подложки и численное решение ДУ, обозначения аналогично рисунку 9,  $\varepsilon_{\text{cyl}} = 4$ ,  $r_0/\lambda = 1,8$

Уравнения, численные решения которых наилучшим образом аппроксимируют данные, полученные с помощью точных численных решений уравнений Максвелла, для всех значений радиусов цилиндрических диэлектри-

ческих включений являются дифференциальными уравнениями первого порядка, левая часть уравнения является полиномом не выше 4 степени от проекции вектора Пойнтинга на вертикальную ось, в правой части присутствует только производная исследуемой величины по вертикальной координате. Решения таких уравнений можно получить аналитически путем интегрирования рациональной дроби вида (48)

$$\int \frac{dI}{C_0 + C_1 I + C_2 I^2 + C_3 I^3 + C_4 I^4}. \quad (48)$$

В простейшем случае линейного уравнения можно получить аналитическое решение вида (49)

$$C_0 + C_1 I = \frac{dI}{dy} \implies I(y) = -\frac{1}{C_1} \exp(C_1 y) - \frac{C_0}{C_1} + \tilde{C}, \quad (49)$$

где  $\tilde{C}$  – произвольная константа, определяемая граничными условиями.

В случае, когда полином в левой части уравнения имеет степень 2, аналитическое решение также можно записать в достаточно простом виде. Рассмотрим случай  $\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 > 0$ . Решение в таком случае может быть записано в виде (50)

$$C_0 + C_1 I + C_2 I^2 = \frac{dI}{dy} \implies I(y) = \alpha \tan(\beta y + \gamma) + \psi, \quad (50)$$

где  $\alpha = \sqrt{\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2}$ ,  $\beta = C_2 \sqrt{\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2}$ ,  $\gamma$  – произвольная константа, определяемая граничными условиями,  $\psi = -\frac{C_1}{2C_2}$ .

Рассмотрим случай  $\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 < 0$ .

$$C_0 + C_1 I + C_2 I^2 = \frac{dI}{dy} \implies y = \int \frac{dI}{C_0 + C_1 I + C_2 I^2} \quad (51)$$

Рассмотрим интеграл в уравнении (51) с учетом  $\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 < 0$

$$y = \int \frac{dI}{C_0 + C_1 I + C_2 I^2} = \frac{1}{C_2} \int \frac{dI}{\frac{C_0}{C_2} + \frac{C_1}{C_2} I + I^2} \quad (52)$$

Введем обозначения  $p = \frac{C_1}{C_2}$ ,  $q = \frac{C_0}{C_2}$ . Тогда  $\frac{C_0}{C_2} + \frac{C_1}{C_2}I + I^2 = I^2 + pI + q = \left(I + \frac{p}{2}\right)^2 + \left(q - \frac{p^2}{4}\right)$ . Обозначая  $t = \left(I + \frac{p}{2}\right)$  и  $-a^2 = \left(q - \frac{p^2}{4}\right)$ , для интеграла из (52) получим (53)

$$\frac{1}{C_2} \int \frac{dI}{\frac{C_0}{C_2} + \frac{C_1}{C_2}I + I^2} = \frac{1}{C_2} \int \frac{dt}{t^2 - a^2} = -\frac{1}{2aC_2} \ln \left| \frac{a+t}{a-t} \right| + \tilde{C}, \quad (53)$$

где  $\tilde{C}$  – произвольная константа. Таким образом, решение уравнения (51) можно найти из соотношения (54)

$$y = -\frac{1}{2\sqrt{\left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 - \frac{C_0}{C_2}C_2}} \ln \left| \frac{\sqrt{\left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 - \frac{C_0}{C_2}} + I + \frac{C_1}{2C_2}}{\sqrt{\left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 - \frac{C_0}{C_2}} - I - \frac{C_1}{2C_2}} \right| + \tilde{C}. \quad (54)$$

Рассмотрим случай  $\left(\frac{C_0}{C_2}\right) - \left(\frac{C_1}{2C_2}\right)^2 = 0$ . В этом случае  $C_0 + C_1I + C_2I^2 = C_2\left(I + \frac{C_1}{2C_2}\right)^2$ , поэтому решение ДУ может быть найдено из уравнения (55)

$$y = \frac{1}{C_2} \int \frac{dI}{\left(I + \frac{C_1}{2C_2}\right)^2} = -\frac{1}{C_2} \cdot \frac{1}{I + \frac{C_1}{2C_2}} + \tilde{C}, \quad (55)$$

где  $\tilde{C}$  – произвольная константа. Таким образом, решение можно записать в виде (56)

$$I(y) = -\frac{1}{C_2y + \tilde{C}} - \frac{C_1}{2C_2}. \quad (56)$$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В процессе выполнения работы были проведены исследования распространения электромагнитного излучения в сильно неоднородной рассеивающей среде, в результате которых было реализовано численное моделирование процесса распространения излучения, получены данные для описания процесса переноса энергии, по полученным данным были восстановлены дифференциальные уравнения, описывающие изучаемый процесс, и получены их численные решения. Были получены следующие результаты:

- а) с использованием модели суперячейки была смоделирована сильно неоднородная рассеивающая среда,
- б) с помощью Фурье-модального метода, применяемого на тонких слоях в рамках модели суперячейки, были получены численные решения уравнений Максвелла, с использованием которых были рассчитаны значения проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье на ось, вдоль которой распространялось электромагнитное излучение,
- в) с использованием алгоритма, объединяющего генетический алгоритм и разряженную регрессию, по полученным значениям проекции вектора Пойнтинга нулевой гармоники Фурье были восстановлены дифференциальные уравнения общего вида  $C_1 \frac{dI}{dH} = C_2 I + C_3 I^2 + C_4 I^3 + C_5 I^4 + C_6$ , решения которых можно получить аналитически интегрированием рациональной дроби,

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Gibson A. P., Hebden J. C., Arridge S. R. Recent advances in diffuse optical imaging // *Physics in medicine and biology*. — 2005. — Vol. 50. — R1–43.
2. Optical diffusion tomography of the exercising human forearm / L. Arakaki [et al.] // *OSA Biomedical Topical Meetings*. — 2000.
3. Arridge S. R. Optical tomography in medical imaging // *Inverse Problems*. — 1999. — Vol. 15. — R41–R93.
4. Rough Surface and Volume Scattering of Soil Surfaces, Ocean Surfaces, Snow, and Vegetation Based on Numerical Maxwell Model of 3-D Simulations / L. Tsang [et al.] // *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*. — 2017. — Vol. 10. — P. 4703–4720.
5. Emission of rough surfaces calculated by the integral equation method with comparison to three-dimensional moment method simulations / K. S. Chen [et al.] // *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*. — 2003. — Vol. 41. — P. 90–101.
6. Johnson J. T., Zhang M. Theoretical study of the small slope approximation for ocean polarimetric thermal emission // *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*. — 1999. — Vol. 37. — P. 2305–2316.
7. Michigan microwave canopy scattering model / F. T. Ulaby [et al.] // *International Journal of Remote Sensing*. — 1990. — Vol. 11. — P. 1223–1253.
8. Kahnert M. Numerical solutions of the macroscopic Maxwell equations for scattering by non-spherical particles: A tutorial review // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2015. — Vol. 178. — P. 14–35.
9. Gallinet B., Butet J., Martin O. J. F. Numerical methods for nanophotonics: standard problems and future challenges // *Laser and Photonics Reviews*. — 2015. — Vol. 9. — P. 579–603.
10. Mishchenko M. I. Comprehensive thematic T-matrix reference database: a 2017–2019 update // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2019. — Vol. 242.



11. Pierrat R., Greffet J.-J., Carminati R. Spatial coherence in strongly scattering media // *Journal of the Optical Society of America A*. — 2005. — Vol. 22. — P. 2329–2337.
12. Kim A. D., Moscoso M. Radiative transfer computations for optical beams // *Journal of Computational Physics*. — 2003. — Vol. 185. — P. 50–60.
13. Mobley C. D. Radiative transfer in the ocean. — Elsevier, 2014.
14. Chandrasekhar S. Radiative transfer. — Dover, New York, 1960.
15. Ishimaru A. Wave Propagation and Scattering in Random Media. — IEEE Press, New York, 1978.
16. Sameti M., Kasaeian A. Numerical simulation of combined solar passive heating and radiative cooling for a building // *Building Thermal, Lighting, and Acoustics Modeling*. — 2015. — Vol. 8. — P. 239–253.
17. Xie Y., Sengupta M., Dooraghi M. Assessment of uncertainty in the numerical simulation of solar irradiance over inclined PV panels: New algorithms using measurements and modeling tools // *Solar Energy*. — 2018. — Vol. 165. — P. 55–64.
18. Поддубный А. Электродинамика сплошных сред [Электронный ресурс]. — 2017. — URL: [https://www.ioffe.ru/coherent/index.html/Coherent/Lectures\\_files/edyn-public2017.pdf](https://www.ioffe.ru/coherent/index.html/Coherent/Lectures_files/edyn-public2017.pdf).
19. Tancogne-Dejean N., Giorgetti C., Véniard V. Optical properties of surfaces with supercell ab initio calculations: Local-field effects // *Physical Review B*. — 2015. — Vol. 92.
20. Supercell approach to the optical properties of porous silicon / M. Cruz [et al.] // *Physical Review B*. — 1999. — Vol. 59.
21. Dovesi R., Orlando R. Convergence properties of the supercell approach in the study of local defects in solids // *Phase Transition*. — 1994. — Vol. 52. — P. 151–167.
22. Rigorous S-matrix approach to the modeling of the optical properties of OLEDs / A. Shcherbakov [et al.] // *Organic Electronics*. — 2011. — Vol. 12. — P. 654–659.

23. Rammal R., Douçot B. Invariant imbedding approach to localization. I. General framework and basic equations // Journal de Physique. — 1987. — Vol. 48. — P. 509–526.
24. Rammal R., Douçot B. Invariant-imbedding approach to localization. II. Non-linear random media // Journal de Physique. — 1987. — Vol. 48. — P. 527–546.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Псевдокод алгоритма восстановления дифференциальных уравнений

#### Листинг А.1 – Псевдокод алгоритма восстановления ДУ

**Input:** Набор токенов  $T$ , представляющих собой константы, искомую функцию и ее производные; множество значений исследуемой функции на узлах сетки

**Parameters:**  $M$  – количество слагаемых в каждом уравнении;  $k$  – количество элементарных операторов в каждом слагаемом;  $n_{\text{pop}}$  – количество особей в популяции; Параметры эволюционного алгоритма:  $n_{\text{epochs}}$  – количество эпох; уровень мутации  $r_{\text{mutation}}$  и уровень кроссинговера  $r_{\text{crossover}}$ ;  $a_{\text{proc}}$  – количество индивидумов, участвующих в создании потомства;  $a_{\text{elite}}$  – количество индивидумов, не участвующих в мутациях;  $\lambda$  – константа, используемая при разряженной регрессии.

**Return:** ДУ, наилучшим образом соответствующее поданным на вход данным.

Сглаживание поданных на вход данных и вычисление производных; Создание популяции  $P$  индивидов, соответствующих ДУ, размера  $n_{\text{pop}}$

**for** epoch  $\leftarrow [1; n_{\text{epochs}}]$  **do**

**for** individual in population **do**

        Применение разряженной регрессии к индивидам для расчета весов в уравнении;

        Расчет значения функции соответствия для каждого индивида.

**end for**

    Проведение турнирного отбора и кроссинговера

**for** individual in population except  $a_{\text{elite}}$  ones **do**

        Мутации индивидов.

**end for**

**end for**

Выбор индивида с наибольшим значением функции соответствия в качестве искомого ДУ;

Применение линейной регрессии для определения коэффициентов в уравнении.

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

### Расчет матрицы рассеяния составного слоя

В случае, когда необходимо рассчитать результирующую  $S$ -матрицу слоя, состоящего из двух слоев с известными матрицами рассеяния  $S^{\text{down}}$  и  $S^{\text{up}}$ , можно воспользоваться следующими соотношениями

$$\begin{aligned} S_{11} &= S_{11}^{\text{down}} + S_{12}^{\text{down}} (I - S_{11}^{\text{up}} S_{22}^{\text{down}})^{-1} S_{11}^{\text{up}} S_{21}^{\text{down}} \\ S_{12} &= S_{12}^{\text{down}} (I - S_{11}^{\text{up}} S_{22}^{\text{down}})^{-1} S_{12}^{\text{up}} \\ S_{21} &= S_{21}^{\text{down}} (I - S_{11}^{\text{up}} S_{22}^{\text{down}})^{-1} S_{21}^{\text{up}} \\ S_{22} &= S_{22}^{\text{up}} + S_{21}^{\text{up}} (I - S_{11}^{\text{up}} S_{22}^{\text{down}})^{-1} S_{22}^{\text{down}} S_{12}^{\text{up}} \end{aligned}$$