Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Н. Беляев, Матричный метод расчёта перерасеяния волн в периодической структуре, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2011, выпуск 2(), 142–148

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu854>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 13:20:26

УДК 512.64+534.2+535.3

МАТРИЧНЫЙ МЕТОД РАСЧЁТА ПЕРЕРАССЕЯНИЯ ВОЛН В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

Ю. Н. Беляев

Сыктывкарский государственный университет,
167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55.

E-mail: ybelyayev@mail.ru

Развит метод рекуррентного расчёта характеристической матрицы слоистой структуры. Получены аналитические решения для матриц второго–четвёртого порядков, описывающих распространение волн в периодических структурах.

Ключевые слова: матрица, периодическая структура, волна, рекуррентные формулы, полиномы.

Введение. Один из матричных подходов к теории распространения волн в слоистых средах — метод характеристической матрицы был предложен в середине XX века Ф. Абеле [1] для расчёта оптических и В. Томсоном [2] и Н. Хаскелом [3] — упругих свойств слоистых сред с плоскопараллельными границами. Позднее этот метод был развит применительно к рентгеновской дифракции в слоистых кристаллах, в частности, в совершенном кристалле с нарушенным поверхностным слоем [4].

Согласно методу характеристической матрицы i -тый слой рассматриваемой структуры характеризуется матрицей M_i , которая связывает тангенциальные компоненты векторов волнового поля на противоположных границах слоя. Система из N слоёв описывается матрицей $M = \prod_{i=1}^N M_i$, получающейся при перемножении в определённом порядке характеристических матриц всех слоёв системы. Данный метод позволяет при рассмотрении интерференционных решений обойти сложную процедуру удовлетворения всех граничных условий на межслойных границах структуры и облегчает учёт многократного перерасеяния волн между слоями. Метод характеристической матрицы позволяет с единых позиций рассматривать рассеяние акустических, электромагнитных и упругих волн в слоистых средах.

Как известно, распространение плоской световой волны в диэлектрической (или металлической) плёнке можно описать с помощью характеристической матрицы второго порядка; преобразование компонент вектора смещения и напряжения в упругом однородном слое осуществляется характеристическими матрицами 4–6 порядков, а n -лучевая дифракция излучения рентгеновского диапазона частот в совершенном кристалле может быть описана с помощью матрицы n -ного порядка. Периодическая структура, сформированная из k одинаковых слоёв, описывается k -той степенью матрицы (соответствующего порядка) одного слоя.

В данной работе развивается метод рекуррентного расчёта степеней матрицы применительно к одномерно периодическим структурам.

Юрий Николаевич Беляев (к.ф.-м.н., доц.), декан, физико-технический факультет.

1. Матрицы кратных линейных операций. По теореме Гамильтона—Кэли каждая матрица M n -ного порядка удовлетворяет своему характеристическому уравнению

$$(-1)^n M^n + (-1)^{n-1} \sigma_1 M^{n-1} + \dots - \sigma_{n-1} M + \sigma_n I = 0, \quad (1)$$

где $I \equiv M^0$ — единичная матрица, а σ_i — сумма всех C_n^i главных миноров i -того ($i = 1, 2, \dots, n$) порядка определителя матрицы M (в частности, $\sigma_1 = \text{tr } M$ — след, а $\sigma_n = \det M$ — определитель матрицы M). Из формулы (1) нетрудно заметить, что целые степени квадратной матрицы n -ного порядка могут быть выражены через первые n степеней: $M^0 \equiv I, M, \dots, M^{n-1}$. Справедлива

ТЕОРЕМА. Пусть M — квадратная матрица n -ного порядка. Тогда

$$M^k = M^{n-1}(p_1 B_{k-1} + \dots + p_n B_{k-n}) + M^{n-2}(p_2 B_{k-1} + \dots + p_n B_{k+1-n}) + \dots + M(p_{n-1} B_{k-1} + p_n B_{k-2}) + I p_n B_{k-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

где $p_i = (-1)^{i-1} \sigma_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, а многочлены B_k определяются рекуррентными формулами

$$B_k = p_1 B_{k-1} + \dots + p_n B_{k-n}; \quad B_0 = \dots = B_{n-3} = B_{n-2} = 0, \quad B_{n-1} = 1. \quad (3)$$

Непосредственной проверкой легко убедиться в справедливости соотношения (2) при $k = 0, 1, \dots, n-1$. Для других k равенство (2) доказывается (см. [5, стр. 63]) по индукции.

2. Метод рекуррентного расчёта степеней матрицы. Вычисление M^k удобно проводить по формуле (2), используя рекуррентную процедуру нахождения многочленов B_k , согласно следующей последовательности действий [6]:

- 1) перемножением матрицы M самой на себя $n-1$ раз вычисляются степени матрицы M со второй по n -ую включительно и параллельно находится след s_i для каждой из матриц M^i ($i = 1, 2, \dots, n$);
- 2) последовательное вычисление коэффициентов p_i выполняется по формуле Ньютона

$$i p_i = s_i - p_1 s_{i-1} - \dots - p_{i-1} s_1, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

- 3) значения многочленов B_j ($j = 1, 2, \dots, n$) определяются по рекуррентным формулам (3).

Несложно оценить трудоёмкость данной процедуры по сравнению с обычным перемножением матриц. Число операций сложения и умножения, необходимое для возведения матрицы порядка n в k -тую степень ($k > n$) по предлагаемому в данной работе методу не превышает $N_1 = n[(n-1)(2n+k-3) + 2n+1]$. Если же вычислять M^k как $k-1$ произведение матриц M , то это потребует $N_2 = n^2(2n-1)(k-1)$ операций сложения и умножения.

Уже для структур с 25 слоями, описываемых характеристическими матрицами 4–6 порядков, $N_2/N_1 > 3$, т. е. метод рекуррентного расчёта характеристической матрицы не менее чем в три раза эффективнее (по числу операций и, следовательно, по точности счёта), чем обычное перемножение. А для

структуры, состоящей из 250 слоёв, $N_2/N_1 > 8, 9, 10$ соответственно для матриц 4, 5 и 6 порядков.

Для характеристических уравнений матриц 2–4 порядков имеются аналитические решения. Рассмотрим ряд случаев, в которых элементы характеристической матрицы периодической структуры допускают аналитическое представление через элементы матрицы одного периода.

3. Матрицы второго порядка. При $n = 2$ из формул (2) и (3) находим

$$M^k = B_k M - \sigma_2 B_{k-1} I,$$

где

$$B_k = \sigma_1 B_{k-1} - \sigma_2 B_{k-2}, \quad B_0 = 0, \quad B_1 = 1. \quad (4)$$

Коэффициенты σ_i характеристического уравнения связаны с собственными числами λ_1, λ_2 матрицы M :

$$\sigma_1 = \lambda_1 + \lambda_2, \quad \sigma_2 = \lambda_1 \lambda_2 \iff \lambda_{1,2} = \frac{\sigma_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma_1}{2}\right)^2 - \sigma_2}.$$

Решением уравнений (4) являются

$$B_k = \frac{\lambda_2^k - \lambda_1^k}{\lambda_2 - \lambda_1} = \frac{\left(\frac{\sigma_1}{2} + \sqrt{\left(\frac{\sigma_1}{2}\right)^2 - \sigma_2}\right)^k - \left(\frac{\sigma_1}{2} - \sqrt{\left(\frac{\sigma_1}{2}\right)^2 - \sigma_2}\right)^k}{2\sqrt{\left(\frac{\sigma_1}{2}\right)^2 - \sigma_2}}. \quad (5)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Численный расчёт собственных многочленов B_k более точно и менее трудоёмко (по числу операций сложения и умножения) выполняется по рекуррентным соотношениям (4), чем по соответствующей формуле (5), явно выражающей многочлены B_k через собственные значения матрицы. Аналогичные утверждения справедливы и для матриц больших порядков.

Если матрица M не вырожденная ($\sigma_2 \neq 0$), её степени допускают следующее представление:

$$M^k = \|m_{ij}\|^k = \sigma_2^{\frac{k}{2}} \left\| \begin{array}{cc} \frac{m_{11}}{\sqrt{\sigma_2}} U_{k-1}(b) - U_{k-2}(b) & \frac{m_{12}}{\sqrt{\sigma_2}} U_{k-1}(b) \\ \frac{m_{21}}{\sqrt{\sigma_2}} U_{k-1}(b) & \frac{m_{22}}{\sqrt{\sigma_2}} U_{k-1}(b) - U_{k-2}(b) \end{array} \right\|, \quad (6)$$

где $b = \sigma_1/(2\sqrt{\sigma_2})$, а U_k — полиномы, удовлетворяющие рекуррентным формулам:

$$U_0 = 1, \quad U_1 = 2b, \quad U_k(b) = 2bU_{k-1}(b) - U_{k-2}(b). \quad (7)$$

Если $-1 \leq b \leq 1$, функции, определяемые соотношениями (7), являются ортогональными полиномами Чебышёва второго рода:

$$U_k(b) = \frac{\sin[(k+1)\varphi]}{\sin \varphi}, \quad b = \cos \varphi. \quad (8)$$

ПРИМЕР 1. При нормальном падении видимого света длиной волны λ_0 на многослойную оптическую систему, образованную чередованием однородных плёнок, система характеризуется матрицей (6), в которой

$$\sigma_2 = 1, \quad b = \cos \beta_2 \cos \beta_3, \quad \beta_2 = (2\pi/\lambda_0)n_2h_2, \quad \beta_3 = (2\pi/\lambda_0)n_3h_3,$$

где n_2, n_3 — показатели преломления, а h_2, h_3 — толщины слоёв.

ПРИМЕР 2. Для симметричного брэгговского отражения рентгеновской монохроматической волны от тонкой кристаллической плёнки характеристическая матрица также будет унимодулярной ($\sigma_2 = 1$), а аргумент полиномов Чебышёва выражается через отстройку $\Delta\theta$ угла падения от точного угла Брэгга θ_0 и расстояние a между атомными плоскостями, находящимися в отражающем положении: $b = \cos((2\pi/\lambda_0)a \cos \theta_0 \Delta\theta)$.

4. Матрицы третьего порядка. Для этого случая из формул (2)–(3) получаем

$$M^k = M^2 B_k + M(-\sigma_2 B_{k-1} + \sigma_3 B_{k-2}) + I \sigma_3 B_{k-1},$$

где

$$B_k = \sigma_1 B_{k-1} - \sigma_2 B_{k-2} + \sigma_3 B_{k-3}, \quad B_0 = B_1 = 0, \quad B_2 = 1. \quad (9)$$

Решением уравнений (9) являются многочлены

$$B_k \equiv \frac{\lambda_1^k \lambda_3 - \lambda_1^k \lambda_2 + \lambda_2^k \lambda_1 - \lambda_2^k \lambda_3 + \lambda_3^k \lambda_2 - \lambda_3^k \lambda_1}{\lambda_1^2 \lambda_3 - \lambda_1^2 \lambda_2 + \lambda_2^2 \lambda_1 - \lambda_2^2 \lambda_3 + \lambda_3^2 \lambda_2 - \lambda_3^2 \lambda_1}, \quad (10)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ — корни характеристического уравнения, соответствующего матрице третьего порядка.

Аналитические выражения для степеней матриц третьего порядка с помощью ортогональных полиномов возможны при специальном виде этих матриц. В частности, не представляет труда получение соответствующих выражений для вырожденных матриц. Другая возможность, которая может реализоваться не только для матриц третьего, но и более высоких порядков, возникает, когда вторая степень матрицы (любого порядка) является линейной комбинацией самой матрицы и единичной матрицы (см. [5, стр. 46]).

5. Матрицы четвёртого порядка. Собственные многочлены B_k матрицы M четвёртого порядка в общем случае удовлетворяют рекуррентным формулам

$$B_0 = B_1 = B_2 = 0, \quad B_3 = 1, \quad B_k = \sigma_1 B_{k-1} - \sigma_2 B_{k-2} + \sigma_3 B_{k-3} - \sigma_4 B_{k-4},$$

а степени матрицы —

$$\begin{aligned} M^k = & M^3(\sigma_1 B_{k-1} - \sigma_2 B_{k-2} + \sigma_3 B_{k-3} - \sigma_4 B_{k-4}) - \\ & - M^2(\sigma_2 B_{k-1} - \sigma_3 B_{k-2} + \sigma_4 B_{k-3}) + \\ & + M(\sigma_3 B_{k-1} - \sigma_4 B_{k-2}) - I \sigma_4 B_{k-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Рассмотрим частный случай. Пусть

$$\sigma_1 = \sigma_3 = 0, \quad \sigma_2 \neq 0, \quad \sigma_4 \neq 0. \quad (12)$$

Тогда все многочлены B_k с чётными индексами равны нулю, а многочлены с нечётными индексами определяются равенствами

$$B_1 = 0, \quad B_3 = 1, \quad B_{2k+1} = -\sigma_2 B_{2k-1} - \sigma_4 B_{2k-3}.$$

Для степеней матрицы M находим два эквивалентных представления:

$$M^k = \begin{cases} M^2 B_{k+1} - I \sigma_4 B_{k-1}, & k = 0, 2, 4, \dots, \\ M^3 B_k - M \sigma_4 B_{k-2}, & k = 1, 3, 5, \dots; \end{cases} \quad (13)$$

$$M^k = \begin{cases} M^2 \sigma_4^{\frac{j-1}{2}} U_{j-1} - I \sigma_4^{\frac{j}{2}} U_{j-2}, & k = 2j, \\ M^3 \sigma_4^{\frac{j-1}{2}} U_{j-1} - M \sigma_4^{\frac{j}{2}} U_{j-2}, & k = 2j + 1, \end{cases} \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

Здесь $U_j = U_j(b)$ — полиномы, определяемые рекуррентными формулами (7), с аргументом $b = -\sigma_2/(2\sqrt{\sigma_4})$.

ПРИМЕР 3 (ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ МАТРИЦА НЕОДНОРОДНОГО ПО ТОЛЩИНЕ СЛОЯ). Слой материала, упругие свойства которого меняются по толщине, можно аппроксимировать пачкой слоёв, каждый из которых является однородным. Соответственно характеристическая матрица такой системы будет равна произведению характеристических матриц отдельных слоёв. Характеристическая матрица однородного упругого слоя в подходе Томсона—Хаскела может быть представлена в виде [7]:

$$M = \exp(\kappa h \chi), \quad \chi = \begin{vmatrix} 0 & -1 & d & 0 \\ b & 0 & 0 & c \\ p\eta^2 + a & 0 & 0 & -b \\ 0 & p\eta^2 & 1 & 0 \end{vmatrix},$$

где

$$a = \frac{4\mu(\lambda + \mu)}{\lambda + 2\mu}, \quad b = \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu}, \quad c = \frac{1}{\lambda + 2\mu}, \quad d = \frac{1}{\mu},$$

h — толщина слоя, ρ — плотность вещества, λ и μ — коэффициенты Ламэ, κ и η — параметры интегрирования.

Матрица χ удовлетворяет условиям (12). А именно,

$$\sigma_2 = -\frac{3-4\nu}{1-\nu}x - 2, \quad \sigma_4 = \frac{2(1+\nu)^2(1-2\nu)}{\nu}x^2 + \frac{4(\nu^2-7\nu+3)(1+\nu)}{(1-\nu)^2}x + 1,$$

где $x = \rho\eta^2/E$, ν — коэффициент Пуассона, E — модуль Юнга.

Используя полученный ранее результат (13), выражение для характеристической матрицы однородного слоя можно представить в следующем виде:

$$M = \alpha I + \beta \chi + \gamma \chi^2 + \delta \chi^3,$$

где

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 1 - \sigma_4 \left[B_3 \frac{(\kappa h)^4}{4!} + B_5 \frac{(\kappa h)^6}{6!} + \dots \right], \\
 \gamma &= \frac{(\kappa h)^2}{2!} + B_5 \frac{(\kappa h)^4}{4!} + B_7 \frac{(\kappa h)^6}{6!} + \dots, \\
 \beta &= \kappa h - \sigma_4 \left[B_3 \frac{(\kappa h)^5}{5!} + B_5 \frac{(\kappa h)^7}{7!} + \dots \right], \\
 \delta &= \frac{(\kappa h)^3}{3!} + B_5 \frac{(\kappa h)^5}{5!} + B_7 \frac{(\kappa h)^7}{7!} + \dots
 \end{aligned} \tag{15}$$

Соответственно матрица неоднородного слоя есть

$$\prod_i M_i = \prod_i (\alpha_i I + \beta_i \chi_i + \gamma_i \chi_i^2 + \delta_i \chi_i^3). \tag{16}$$

Из формул (16) и (15) несложно получить выражение для характеристической матрицы неоднородной структуры с любой заданной точностью по величинам толщин h_i отдельных слоёв. В качестве иллюстрации построим характеристическую матрицу идеальной тонкой кристаллической плёнки. Для этого воспользуемся моделью, представляющей кристалл как дискретно периодическую структуру, в которой атомная плоскость и межатомный слой представляются двумя однородными упругими средами, имеющими различные постоянные упругости. Будем отмечать все величины, относящиеся к этим средам, индексами 1 и 2. В результате для элементов C_{ij} характеристической матрицы всей структуры, содержащей N периодов, с точностью до величин первого порядка малости по толщинам h_1 и h_2 получим следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= C_{22} = C_{33} = C_{44} = 1, \quad C_{41} = C_{32} = C_{23} = C_{14} = 0, \\
 C_{13} &= N\kappa(d_1 h_1 + d_2 h_2), \quad C_{43} = -C_{12} = N\kappa(h_1 + h_2), \\
 C_{24} &= N\kappa(c_1 h_1 + c_2 h_2), \quad C_{42} = N\kappa\eta^2(\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2), \\
 C_{31} &= N\kappa\eta^2(\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2) + N\kappa(a_1 h_1 + a_2 h_2), \\
 C_{21} &= -C_{34} = N\kappa(b_1 h_1 + b_2 h_2).
 \end{aligned}$$

Заключение. Отметим существенное преимущество развиваемого в данной работе метода рекуррентного расчёта степеней матрицы по сравнению с алгоритмом вычисления степеней матрицы по формуле Лагранжа—Сильвестра [8]. Первый метод в отличие от второго не требует вычисления собственных значений матрицы M для нахождения M^k , что особенно важно для матриц, порядок которых выше 4.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (гос. контракт № 02.740.11.0618).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Abelès F.* Recherches sur la propagation des ondes électromagnétiques sinusoïdals dans les milieux stratifiés. Application aux conches minces // *Ann. Physique*, 1950. Vol. 5. Pp. 596–640.

2. Thomson W. T. Transmission of elastic wave through a stratified solid material // *J. Appl. Phys.*, 1950. Vol. 21, no. 1. Pp. 89–93.
3. Haskell N. A. The dispersion of surface waves on multi-layered media // *Bul. Seismol. Soc. Amer.*, 1953. Vol. 43, no. 1. Pp. 17–34.
4. Belyaev Yu. N., Kolpakov A. V. On the theory of X-ray diffraction in a perfect crystal with distorted surface layer // *Physica Status Solidi (a)*, 1983. Vol. 76, no. 2. Pp. 641–646.
5. Беляев Ю. Н. Алгебра тензоров. Сыктывкар: СыктГУ, 2009. 180 с. [Belyaev Yu. N. The Algebra of tensors. Syktvkar: SyktGU, 2009. 180 pp.]
6. Беляев Ю. Н. Характеристическая матрица слоисто-периодической структуры // *Вестн. Сыктывкар. ун-та. Сер. 1*, 2010. № 11. С. 86–91. [Belyaev Yu. N. Characteristic matrix of laered-periodic structure // *Vestn. Syktvkar. un-ta. Ser. 1.*, 2010. no. 11. Pp. 86–91].
7. Молотков Л. А. Матричный метод в теории распространения волн в слоистых упругих и жидких средах. Ленинград: Наука, 1984. 201 с. [Molotkov L. A. The matrix method in the theory of wave propagation in layered elastic and liquid media. Leningrad: Nauka, 1984. 201 pp.]
8. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М.: Наука, 1988. 549 с. [Gantmakher F. R. Theory of matrices. Moscow: Nauka, 1988. 549 pp.]

Поступила в редакцию 20/XII/2010;
в окончательном варианте — 9/III/2011.

MSC: 78A45; 15A16, 74J20

MATRIX METHOD OF CALCULATING THE RESCATTERING WAVE IN A PERIODIC STRUCTURE

Yu. N. Belyaev

Syktvrrar State University,
55, Oktyabrskiy pr., Syktvkar, 167001, Russia.
E-mail: ybelyaev@mail.ru

The method of recursive calculation of the characteristic matrix of the layered structure is developed. Analytical solutions for the matrix of second, third and fourth order describing the propagation of waves in periodic structures are found.

Key words: matrix, periodic structure, wave, recurrence fomula, polynomials.

Original article submitted 20/XII/2010;
revision submitted 9/III/2011.