

文章编号 :1007-7383(2005)04-0413-03

红外多层增透膜系的模拟退火算法

张晓娟,张英堂,翟学军,于长丰

(西安工程科技学院理学院,陕西 西安 710048)

摘要:构造了光学薄膜优化设计的评价函数,利用评价函数,用模拟退火算法设计了红外和远红外光区多层增透膜系,并与遗传算法的设计结果进行了比较。

关键词:模拟退火算法;光学薄膜;遗传算法

中图分类号:O59 文献标识码:A

多层光学薄膜的优化设计方法一直是薄膜光学研究的重要课题。传统数值算法的结果强烈依赖初始解,只能收敛到局部极值。以后为克服这些缺点而提出的蒙特卡洛法^[1]在薄膜优化设计中得到了应用,但这些方法计算不稳定,效率相当低。遗传算法^[2]借用了生物遗传学的观点,通过自然选择、遗传、变异等作用机制,容易得到全局最优解,是目前可行的一种全局优化算法。模拟退火算法^[2]随机产生初始解,在接受优化解的同时,以一定的概率分布接受部分比较差的解,所以容易从局部最优的陷阱中跳出来,得到全局最优解。本文构造了光学薄膜的模拟退火算法,并应用此算法设计了远红外光区的多层增透膜系。

1 模拟退火算法

退火是一种物理过程,一种金属物体在加热到一定的温度后,它的所有分子在状态空间 D 中自由运动。随着温度的下降,这些分子逐渐停留在不同的状态。在温度最低时,分子重新以一定的结构排列。统计力学的研究表明,在温度 T ,分子停留在状态 r 满足玻尔兹曼概率分布

$$\Pr\{\bar{E} = E(r)\} = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right), \quad (1)$$

其中, $E(r)$ 为状态 r 的能量, $k_B > 0$ 为玻尔兹曼常数,为分子能量的一个随机变量。 $Z(T)$ 为概率分布的标准化因子,

$$Z(T) = \sum_{s \in D} \exp\left(-\frac{E(s)}{k_B T}\right).$$

选定 2 个能量 $E_1 > E_2$, 在同一个温度 T , 有 $\Pr\{\bar{E} = E_1\}$

$$- \Pr\{\bar{E} = E_2\} = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right)\right]$$

因为 $\exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right) < 1, \forall T > 0$, 所以

$$\Pr\{\bar{E} = E_1\} - \Pr\{\bar{E} = E_2\} > 0, \forall T > 0, \quad (2)$$

式(2)表示,在同一个温度下,分子停留在能量最小状态的概率比停留在能量大状态的概率要大。而且,在温度趋向于 0 时,分子停留在最低能量状态的概率趋向于 1。

将组合优化问题和金属退火过程进行类比,组合优化问题 \rightarrow 金属物体,解 \rightarrow 状态,最优解 \rightarrow 能量最低状态,目标函数 \rightarrow 能量,由以上的类比及式(1),组合优化问题的最优解可以类比为退火过程中的最低能量,也就是温度达到最低点时,式(1)中具有最大概率的状态。于是组合优化问题求解过程类比为退火过程。我们假设模拟退火算法用以解决如下的组合优化问题:

$$\min f(x) \text{ s.t. } g(x), x \in D.$$

上式中, $f(x)$ 为目标函数, $g(x)$ 为约束方程, D 为定义域。

则简单的模拟退火算法可以写为:

STEP1: 任选一个初始解 x_0 ; $x_i := x_0$; $k := 0$; $t := t_{\max}$ (初始温度)。

STEP2: 若在该温度达到内循环停止条件,则到 STEP3,否则,从领域中随机选区一 x_j , 计算 $\Delta f_{ij} = f(x_j) - f(x_i)$, 若 $\Delta f \leq 0$, 则 $x_i := x_j$, 否则若 $\exp(1 -$

$\Delta f_{ij}/t_k \text{ random}(0,1)$ 时, 则 $x_i := x_j$, 重复 STEP2。

STEP3 : $t_{k+1} := d(t_k)$; $k := k + 1$ 若满足停止条件, 终止计算, 否则, 回到 STEP2 ;

2 光学薄膜优化设计的数学模型

根据薄膜的光学理论, 在光线入射角、入射介质折射率、衬底折射率、镀膜材料的折射率给定的情况下, 在一定的波长上, 膜系的能量反射率 R 就是各层光学薄膜厚度的函数, 即

$R = R(\vec{x}) = R(x_1, x_2, \dots, x_m)$, 其中 x_1, x_2, \dots, x_m 是各层光学薄膜的厚度。构造如下形式的评价函数:

$F(\vec{x}) = \sum_{k=1}^m \mu_k (R_k(\vec{x}) - R_k^{(0)})^2$, 此式中 μ_k 是权重因子, 通常先不加权, 即令 $\mu_k = 1$, 经过计算之后, 根据需要再加具体的权重。 $R_k^{(0)}$ 是理想的光谱特性, 对于增透膜系, $R_k^{(0)} = 0$ 。则我们的膜系设计就是寻求使 $F(\vec{x}) = \sum_{k=1}^m \mu_k (R_k(\vec{x}))^2 = \min$ 的一组结构参数 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$

若已知 m 层膜料的折射率和光学厚度分别是 n_k 和 x_k , 其中 $k = 1, 2, 3, \dots, m$, 入射介质折射率和衬底的折射率分别是 n_0, n_k , 光束入射角为 φ_0 , 基体的特征导纳为 η_{m+1} , 则任一波长 $\lambda_j (j = 1, 2, 3, \dots, l)$, 是算法中选取的波点数, 的反射率为:

$$R(\lambda_j) = \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \quad (3)$$

式(3)中, $Y = \frac{C}{B}$, $\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \prod_{k=1}^m \begin{bmatrix} \cos \delta_k & i \sin \delta_k / n_k \\ i n_k \sin \delta_k & \cos \delta_k \end{bmatrix}$
 $\begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{m+1} \end{bmatrix}$, $\delta_k = \frac{2\pi x_k \cos \varphi_k}{\lambda_j}$, Y 是等效导纳, $\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix}$ 是膜系的特征矩阵, δ_k 是相位厚度。

令 $\prod_{k=1}^m \begin{bmatrix} \cos \delta_k & i \sin \delta_k / n_k \\ i n_k \sin \delta_k & \cos \delta_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$, 则特征矩阵可以表示为: $\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{m+1} \end{bmatrix}$ 解特征矩阵方程, 可以得到 $B = a_{11} + a_{12} \eta_{m+1}$, $C = a_{21} + a_{22} \eta_{m+1}$, $Y = \frac{C}{B} = \frac{a_{21} + a_{22} \eta_{m+1}}{a_{11} + a_{12} \eta_{m+1}}$ 。将等效导纳 Y 代入式(3), 得 $R(\lambda_j) =$

$$\frac{(n_0 a_{11} - a_{22} \eta_{m+1})^2 + (|a_{12}| n_0 \eta_{m+1})^2 - |a_{21}|^2}{(n_0 a_{11} + a_{22} \eta_{m+1})^2 + (|a_{12}| n_0 \eta_{m+1})^2 + |a_{21}|^2}$$

目标函数为:

$$F(\vec{x}) = \sum_{j=1}^l R^2(\lambda_j) =$$

$$\sum_{k=1}^l \left[\frac{(n_0 a_{11} - a_{22} \eta_{m+1})^2 + (|a_{12}| n_0 \eta_{m+1})^2 - |a_{21}|^2}{(n_0 a_{11} + a_{22} \eta_{m+1})^2 + (|a_{12}| n_0 \eta_{m+1})^2 + |a_{21}|^2} \right]$$

将 $F(\vec{x})$ 和 $R(\lambda_j)$ 代入上述模拟退火算法, 得到在任一波长 λ_j 的能量反射率和目标函数的最优解。增加 j 的值, 则得到下一个波点 λ_{j+1} 的能量反射率和目标函数的最优解。

3 设计结果与分析

3.1 红外光区设计的结果与分析

设计 7.7 ~ 12.3 μm 波段七层红外增透膜, 选基底为锗 ($n = 4.0$), 膜系由高折射率的锗 ($n = 4.2$) 和低折射率的硫化锌 ($n = 2.2$) 交替设计而成。结果见表 1, 透射率与波长的关系见图 1, 遗传算法的设计的透射率与波长的关系见图 2^[3], 模拟退火算法的设计结果中在 9 ~ 10.5 μm 有一段平坦的透射率曲线, 理论平均透射率达到 98% 以上, 遗传算法的平均透射率低于模拟退火算法。

表 1 七层硫化锌和锗增透膜的模拟退火算法优化设计结果

| 层数 | 折射率 | 光学厚度/ μm |
|----|-----|---------------------|
| 空气 | 1.0 | |
| 1 | 2.2 | 2.4527 |
| 2 | 4.0 | 2.4646 |
| 3 | 2.2 | 0.8412 |
| 4 | 4.0 | 0.8552 |
| 5 | 2.2 | 2.6008 |
| 6 | 4.0 | 0.8466 |
| 7 | 2.2 | 0.7172 |

注: 评价函数值为 0.0119, 平均反射率为 1.19%, 平均透射率为 98.81%, 运行时间为 0.32h, 波点数 20。

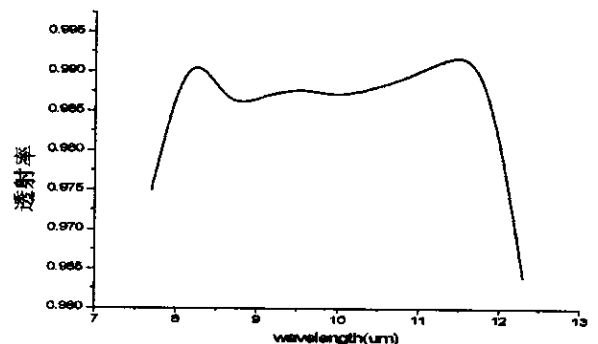


图 1 模拟退火算法设计的红外七透射率与波长的关系

3.2 远红外光区设计的结果与分析

在远红外光区, 10.4 ~ 12.5 μm 波段是空间光学系统如红外相机使用的一个重要波段, 在此设计中高折射率材料选用碲化铅 ($n = 5.5$), 低折射率材料选用硫化锌 ($n = 2.2$), 基底材料选用锗 ($n = 4.0$), 用模拟退火算法设计的多层增透膜的优化结果见表

2 透射率与波长的关系见图 3,遗传算法的设计结果中透射率与波长的关系见图 4^[3],可以看出模拟退火算法在 10.8 ~ 12 μm 有一段比较平坦的透射率曲线,理论平均透射率达到 99% 以上。

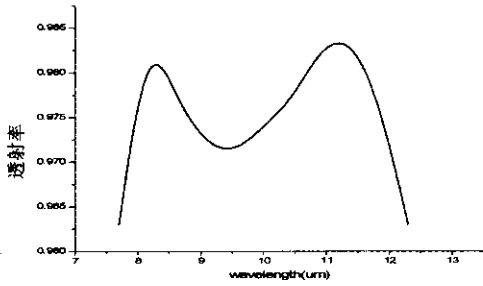


图 2 遗传算法设计的红外七层增透膜透射率与波长的关系

表 2 七层硫化锌和碲化铅的模拟退火算法优化设计结果

| 层数 | 折射率 | 光学厚度/ μm |
|----|-----|---------------------|
| 空气 | 1.0 | |
| 1 | 2.2 | 2.8036 |
| 2 | 5.5 | 2.3211 |
| 3 | 2.2 | 0.0452 |
| 4 | 5.5 | 1.7656 |
| 5 | 2.2 | 0.5430 |
| 6 | 5.5 | 1.4714 |
| 7 | 2.2 | 0.8013 |

注:评价函数值为 0.0006,平均反射率为 0.06%,平均透射率为 99.94%,运行时间为 0.46h,波点数 20。

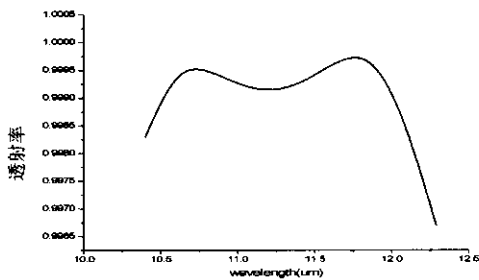


图 3 模拟退火算法设计的远红外七层增透膜的透射率与波长的关系

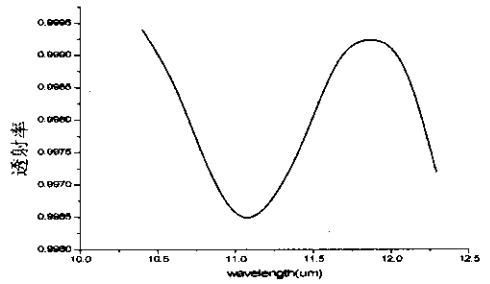


图 4 遗传算法设计的远红外七层增透膜的透射率与波长的关系

4 小结

本文构造了光学薄膜的模拟退火算法,应用此算法设计了远红外光区的多层增透膜系,并与遗传算法的设计结果进行了比较,结果表明 SA 算法适合红外光区多层增透膜系的设计。此外,传统算法都必须采用初始解,而要确定初始解,难度很大,将模拟退火算法或遗传算法的解作为传统算法的初始解,能够加快收敛速度,迅速达到全局极小值,这将是比较理想的优化手段,有望在以后的设计中得到应用。

参考文献:

[1] W J Wild, H Bukay. Thin Film Multilayers Design Optimization Using a Monte Carlo Approach [J]. Opt Lett, 1986, 745(11): 47-53.
 [2] 邢文训, 谢金星. 现代优化计算方法 [M]. 北京:清华大学出版社, 1999.
 [3] 罗崇泰. 多层光学薄膜遗传优化算法的研究 [D]. 兰州:中国空间技术研究院, 1999.

Studies on the Simulated Annealing Algorithm for Multilayer Antireflection Coatings in the Infrared Region

ZHANG Xiao-juan, ZHANG Ying-tang, ZHAI Xun-Jun, YU Chang-feng
 (College Science of Xi'an University of Engineering Science and Technology, Xi'an, Shanxi 710048, China)

Abstract: The paper constructs the cost function of the optical thin film, designs the multilayer antireflection coatings in the infrared and far infrared region. By simulated annealing algorithm, the paper compares the results of the simulated annealing algorithm with that of the genetic algorithm.

Key words: simulated annealing algorithm; optical thin film; genetic algorithm