

膜系自动设计的优化技术研究

宋玲玲, 何晓雄

(合肥工业大学 理学院, 安徽 合肥 230009)

摘要:文章概述了国内外光学薄膜系自动设计方法的研究进展,对各类光学薄膜的优化设计方法进行了阐述,重点比较了阻尼最小二乘法、遗传算法和 needle 法;提出未来的膜系设计必将是多种优化技术相结合,在局部寻优中引入全局寻优,在全局寻优中加强局部寻优。

关键词:膜系自动设计;遗传算法;needle 法

中图分类号: O484.41

文献标识码: A

文章编号: 1003-5060(2006)08-1045-04

Optimization technologies of auto-design of coatings

SONG Ling-ling, HE Xiao-xiong

(School of Sciences, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: Three kinds of optimization methods of auto-design of optical coatings, which are commonly used, are introduced, including the damped least squares (DLS) method, the genetic evolution method and the needle optimization method. A comparison among these methods is made with an example. It is thought that coatings design in the future must be the result of combination of many optimization methods in which the global search is incorporated by the local search and the local search is strengthened in the global search.

Key words: auto-design of coatings; genetic algorithm (GA); needle optimization

0 引言

光学薄膜在工业上有着广泛的应用,因此有必要对其作进一步的研究。关于它的设计理论和方法经历了三大类型的变化:矢量作图法、解析法和数值法^[1]。矢量法除了对膜层厚度和折射率有限制外,它仅是一种近似计算和设计;解析法利用矩阵光学理论计算膜系的反射率,过程复杂,最终公式也不便于用设计参量来直接分析,通常适用于膜层数较少的膜系设计;随着计算机技术的发展与数学优化技术的进步,人们开始研究结合两者的优势,开发计算机辅助设计的专用设计程序,

这就是数值法,即光学薄膜的自动设计方法。

1 理论基础

评价函数是以结构参数作为变量的多元函数,表示期望的响应特性和特定多层膜结构的响应特性之间的拟合程度,通过选取结构参数使其极小,得到最优的膜系结构。构造评价函数,需计算膜系的反射率。根据矩阵光学理论, m 层膜的反射率是入射介质的折射率 n_0 、基片的折射率 n_g 、各层薄膜的折射率 n_i ($i = 1, 2, 3, \dots, m$) 和各层膜厚 d_i ($i = 1, 2, 3, \dots, m$) 的函数,它又与入射角 θ 和所在波长 λ 有关。膜层的位相厚度为^[2]

收稿日期:2005-09-27;修改日期:2005-10-26

基金项目:安徽省自然科学基金资助项目(03044703);安徽省教育厅科技基金资助项目(2001kj188)

作者简介:宋玲玲(1980-),女,安徽安庆人,合肥工业大学硕士生;

何晓雄(1956-),男,安徽宿松人,合肥工业大学教授,博士生导师。

$$\delta_i = \frac{2\pi n_i d_i \cos \theta_i}{\lambda} \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (1)$$

$$\eta_i = \begin{cases} n_i \cos \theta_i & s \text{ 偏振光} \\ n_i / \cos \theta_i & p \text{ 偏振光} \end{cases} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, m) \quad (2)$$

其中, η_0 为入射导纳; $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m$ 为膜层导纳; η_{m+1} 为基片的光学导纳。将基片和薄膜组合的等效导纳定义为

$$Y = C/B \quad (3)$$

其中

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{i=1}^m \begin{pmatrix} \cos \delta_i & \frac{j}{\eta_i} \sin \delta_i \\ j \eta_i \sin \delta_i & \cos \delta_i \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{m+1} \end{pmatrix} \quad (4)$$

则 m 层薄膜的反射率为

$$R(\lambda) = \left| \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right|^2 \quad (5)$$

一旦给定各层薄膜材料的折射率 n_i 和 $n_i d_i$, 由上述公式, 可得波长 λ 处的反射率 $R_s(\lambda)$ (s 偏振光的反射率) 和 $R_p(\lambda)$ (p 偏振光的反射率), 则有

$$R(\lambda) = (R_s(\lambda) + R_p(\lambda)) / 2 \quad (6)$$

调节 n_i, d_i , 使 $R(\lambda)$ 拟合目标反射率 $RD(\lambda)$, 评价函数趋于极小。

2 常用的优化设计方法

2.1 阻尼最小二乘法(DLS)

阻尼最小二乘法是介于梯度法和最小二乘法之间。采用该法设计光学薄膜时, 通常使用折射率高的 H 和折射率低的 L 2 种膜料。其中减反膜系的结构为 $G|H L H L \cdots H L|A$ (G 表示基片, A 表示入射媒质), 需要优化的变量仅为膜层的厚度 $d = (d_1, d_2, \dots, d_m)$ (m 为层数)。阻尼最小二乘法的步骤如下:

(1) 给出初始结构 d_0 , 并在指定光谱区间内, 取 n 个参考波长 λ_i ($i = 1, 2, \dots, n$), 并计算相应的反射率。采用的评价函数 $F(d) = \sum_{i=1}^n (R^i(d_0) - RD(\lambda_i))^2$, 其中, $R^i(d_0)$ 为第 i 个波长处的待优化膜系的反射率。

(2) 计算 $A_0 = \left[\frac{\partial R^i}{\partial d^j} \right]_{d_0}$ ($i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, m$) 及 $R_0^i = R^i(d_0)$ ($i = 1, 2, \dots, n$)。

(3) 选取阻尼因子 ρ 。

(4) $d_1 = d_0 - (A_0^T A_0 + \rho I)^{-1} A_0^T R_0$ 。

(5) $\|\nabla R(d_1)\| < \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$, 为预先给出的精度), 则计算结束; 否则, 令 $d_0 = d_1$, 转到第 2 步。

2.2 遗传算法(GA)

遗传算法是一种通用的全局寻优智能计算方法, 它是从一组初始值出发进行优化, 且这些初始值好比一个生物群体, 优化的过程就是这个群体繁衍、竞争、遗传和变异的过程, 是一个有指导性的搜索过程, 可以保证搜索过程向优化的方向发展^[3]。近年来, 遗传算法已被引入到光学薄膜的设计。用若干位二进制串对膜系的结构参数进行染色体编码, 用交叉、变异 2 种遗传算子作为搜索工具, 用适应度函数对搜索到的解的质量进行评价, 并用选择算子根据评价结果来引导以后的搜索方向。它特别适合于复杂问题的优化, 当采用其他优化数值方法难以得到满足要求的膜系结构时, 调用 GA 法, 可以得到令人满意的结果。

相比其他方法, GA 法不需要初始设计, 其初始个体群是随机产生的。群中的个体数目和遗传代数越大, 解的质量越高, 但优化速度越慢。另外, 在标准的 GA 中, 经选择、交叉和变异后的群体, 竞争是依照固定比例进行的, 一般情况下, 仅具有竞争力的能够参与竞争, 这样有可能造成算法的“过早收敛”, 陷入局部极值。

目前国内外很多学者已针对提高解的质量和加快收敛速度对遗传算法进行一些有益的改进, 如家族竞争遗传算法(FCEA)^[4]、整体退火遗传算法(GASA)^[5]和基于实数编码自适应的遗传算法^[6]。其中, FCEA 采用 3 种不同的变异算子加强局部和全局的搜索能力, 算法稳定, 灵活性强, 并且优化结果严谨。GASA 在标准 GA 中的生存策略中引入 Boltzmann 生存机制, 引入时变选择——整体退火选择, 构成整体退火遗传算法, 从而使该算法比 GA 有快得多的收敛速度及更强的脱离局部极值和避免“过早收敛”的全局能力。

2.3 Needle 法

Needle 法是一种新的膜系设计方法。Needle 法的原理是对任意给定的膜系计算其 P 函数(Permissible Function), 算出最佳插入位置, 然后在这一位置插入极薄的膜层, 插入以后将导致评价函数的大幅度降低。持续这一过程, 可使膜系层数不断增多, 从而获得评价函数不断降低的膜系结构, 而最终得到满意的结果^[7]。这时膜系的

层数可能较多,且含有较多的薄层,通过调用其他的优化方法进一步降低评价函数,同时加入关于膜层厚度的约束条件,合并那些较薄的膜层。Needle 法的突出优点是评价函数下降迅速,优化速度快,既能优化折射率和膜层厚度,又能优化整个膜系的层数,它从单层膜开始优化,降低了膜系设计的专业性和难度。

但它也存在着陷入局部极小值的问题。表现为插入新层以后评价函数并没有得到改善;或者插入新层以后,在随后的局部优化中,又因为优化得太薄而不得不将其删去,得到的新结构和原来的完全一样,从而陷入了死循环。同时,数学算法十分复杂,即使是数值计算中很小的不准确或者是应用基本分析公式时的一个微扰,都将严重影响 needle 的有效性。

近年来,一些学者对 needle 法进行研究和改进,首先在其基础上发展了隧行法 (Tunneling)^[8]。

隧行法在如下 3 个方面改进了 needle 法:

(1) needle 法优化设计中,对不同的膜系设计,存在不同的最佳初始膜厚度和最佳评价函数值,修改初始膜的厚度,可以得到最佳膜系/。

(2) needle 法优化无法继续时,适当增加不敏感的膜层的厚度,可以让 needle 法优化摆脱局部极值的影响,得到更好的膜系。

(3) 在 needle 设计中串置膜系,加快计算速度。其次,提出了模糊函数输入法,使评价函数的构造更加科学合理^[9],引入可以摆脱局部极值,实现全局优化的逃逸函数 (escape function)^[10]。

最近,国外有学者提出采用非均匀膜系的优化技术和微扰计算中的二级近似来改进 needle 算法,可同时优化折射率和膜厚,而且提高了优化速度,得到了令人满意的结果^[11]。

3 方法比较

分别采用上述 3 种方法设计从 400 ~800 波长范围的宽带减反膜。基片选用折射率为 1.52 的 K₉ 玻璃,入射媒质为空气,它的折射率为 1.0, L 膜料选用折射率为 1.38 的 MgF₂, 4 层膜中 H 膜料选取折射率为 2.0 为 Nd₂O₃, 8 层减反膜中 H 膜料取用折射率为 2.35 的 TiO₂。中心波长 λ_0 为 550。现仅考虑光线垂直入射的情况。3 种减反膜的结构见表 1 所列,表中 H、L 所对应的数字代表膜层光学厚度是 $\lambda_0/4$ 的倍数。

表 1 优化后的减反膜的结构参数

	G	H	L	H	L	H	L	H	L	A
1-DLS	1.52	0.227 6	0.310 5	1.992 0	0.935 3	-	-	-	-	1.0
2-GA	1.52	0.120 9	0.078 7	0.137 3	0.283 1	0.293 9	0.308 4	0.312 0	1.128 1	1.0
3-Needle	1.52	0.128 6	0.483 0	0.448 6	0.247 8	1.310 6	0.152 4	0.516 7	1.065 0	1.0

如图 1 所示,使用 DLS 法优化后的 4 层膜系的光谱反射率曲线在波长 420~650 nm 范围内平坦,消色差性好。剩余反射率在可见光区内达到 0.25 %以下。调用 GA 法优化后的 8 层膜系的光谱反射率曲线内存在一个明显的波动,消色差性一般,整个可见光区内的剩余反射率达到 0.8 %以下,但最低反射率接近于零,明显低于其他 2 种方法。

相较之下,Needle 法优化后的膜系的反射率曲线除了在波长范围内有个微小的波纹外,无论在消色差性方面还是在剩余反射率方面,它都优于其他 2 种方法。

到目前为止,阻尼最小二乘法是一个发展比较成熟的算法。在优化层数较少的膜系时,有自

己独特的优势。但是当优化的层数超过 6 层时,结果常常陷入局部极小值,无法取得全局最优。

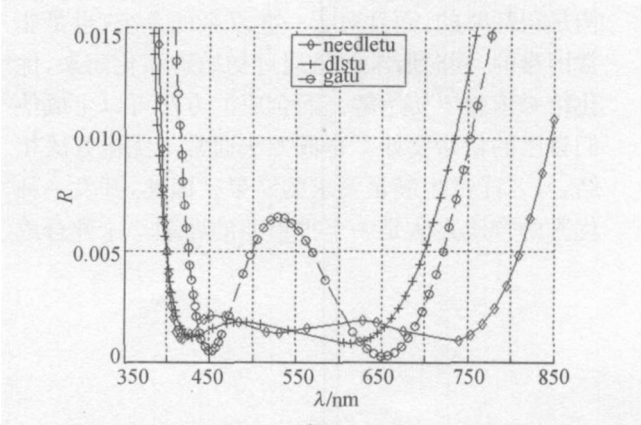


图 1 3 种不同结构的减反膜的光谱反射率与波长的关系

同时它强烈依赖于初始结构。初始结构选的好,算法收敛快,结果令人满意;初始结构选的不好,优化结果无法达到设计要求。使用这些优化方法需要设计者有丰富的薄膜光学知识和设计经验,加大了设计的难度。

膜系评价函数是一个复杂的非线性多峰函数,随着膜层数目的增加,如几十层甚至上百层,这时它的局部极值和复杂度都大大增加,即使调用传统的优化技术和总极值法也根本无法取得全局极小值。

GA 法有强大的全局寻优的能力和灵活的通用性,非常适合此类优化问题,并且它可以同时优化膜系的折射率和膜厚,结果可靠,但是算法收敛慢,且结果的精度越高,耗时越长。

Needle 法通过不断的插入新薄层,即增加变量的维数来形成一个连续的寻优过程。它并不是以寻找全局极小值为根本目的。Needle 法是一种优秀的优化数值方法,其优越性完全体现在上述膜系实例中。但是从根本原理上讲它仍是一种局部寻优方法。

目前,除了将其发展成 Needle - Tunneling 法之外,在上述优化设计的基础上,国内外的学者提出调用全局优化法,如遗传算法,采用一种多策略搜索机制,将多种优化方法相结合进行膜系设计^[12]。另外可将全局优化法和传统的优化技术相结合,针对某些特殊的光谱区间的膜系设计提出相应的特色设计方法^[13]。

4 结束语

优化和合成是光学薄膜数字设计的 2 个方面。优化通常需要初始设计,求出适合的初始结构是很耗时的,而且对于一些复杂的系统,也是非常困难的,同时所求解是通过初始解演化而来,优化结果依赖于初始解。而合成的方法可以生成他们自己的初始设计。合成方法通常与优化方法相结合,才能产生满足要求的结果。因此,开发一种优秀的合成方法是一个很重要的课题。这种合成

技术自动化程度更高,不要求设计者有牢固的理论基础和丰富的设计经验,减少设计过程中人为的干预,使设计的结果不依赖于方法和初始结构的选取。这同样也是光学薄膜设计的发展趋势与方向。

[参 考 文 献]

- [1] 林永昌,卢维强. 光学薄膜原理[M]. 北京:国防工业出版社,1990. 185 - 192.
- [2] 唐晋发,郑 权. 应用薄膜光学[M]. 上海:上海科学技术出版社,1984. 379 - 387.
- [3] 于文兵,吕 品. 基于遗传算法的窄带滤光片膜系最佳设计[J]. 武汉理工大学学报,2004,26(5):32 - 34.
- [4] Yang J-M, Kao Cheng-Yan. Efficient evolutionary algorithm for the thin-film synthesis of inhomogeneous optical coatings[J]. Applied Optics,2001,40(19):3 256 - 3 268.
- [5] 叶美盈. 基于整体退火遗传算法的膜系设计方法[J]. 光电工程,2000,27(3):12 - 15.
- [6] 王 霞,王晓东. 基于实数编码自适应遗传算法的膜系优化设计[J]. 量子电子学报,2004,21(1):51 - 55.
- [7] Tikhonravov A V, Trubetskov M K, DeBell G W. Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings[J]. Appl Opt, 1996,35:5 493 - 5 508.
- [8] 张 诚,林永昌. 膜系自动设计中的隧行方法[J]. 光子学报,1999,28(1):61 - 64.
- [9] 李 芳,张 诚,林永昌. 膜系优化设计中的模糊输入及评价函数的改进[J]. 光子学报,2000,29(1):68 - 71.
- [10] 李 芳,林永昌. 膜系优化设计中的逃逸函数法[J]. 光学仪器,2001,23(5/6):11 - 14.
- [11] Verly P G. Modified needle method with simultaneous thickness and refractive-index refinement for the synthesis of inhomogeneous and multiplayer optical thin films[J]. Applied Optics,2001,40(31):5 718 - 5 725.
- [12] 林永昌,李 芳. 增益平坦滤光片的设计[J]. 光学仪器,2004,26(2):5 - 7.
- [13] 张晓晖,丁双红. 光纤通信系统永减反膜的研究[J]. 海军工程大学学报,2003,15(3):23 - 26.

(责任编辑 张 镛)