

光学薄膜自动设计的多目标优化方法

王文梁^{1,2} 熊胜明¹

(¹ 中国科学院 光电技术研究所, 四川 成都 610209; ² 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

摘要 光学薄膜中已使用的优化方法都是单目标寻优的,通过分析光学薄膜优化设计的原理,将薄膜设计的物理问题归结为混合离散变量的多目标优化设计的数学模型,并认为这是薄膜设计的一般性模型,现行的单目标优化算法只是这个模型的简化。基于这一新思路,并结合多目标优化算法的研究现状,采用了一种基于免疫应答原理的智能型多目标优化算法。该算法隐含并行处理能力,原理上是具备全局搜索能力的自适应随机性算法。将此算法运用到光学薄膜设计中,给出了一些优化的设计实例。结果表明,将多目标优化算法引入薄膜设计的新思路是可行的,将来会有较好的发展前景。

关键词 光学设计; 光学薄膜; 多目标优化; 免疫应答

中图分类号 O484 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20082810.2026

Multiobjective Optimization Approach of Optical Thin Film Design

Wang Wenliang^{1,2} Xiong Shengming¹

(¹ Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, Sichuan 610209, China)
(² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract All optimization methods used in optical thin film design can seek only one object. After the analysis of the theory of optical thin film optimization design, it is proposed that multiobjective optimization with mixed discrete variable is the essential mathematical model and can reflect the physical essence of optical thin film design. The optimization algorithm for single objective problem which has been widely used in the fields of optical thin film design is only a simplification. Based on this new consideration and the status of multiobjective optimization research, an immune response-based multiobjective optimization algorithm is adopted to design optical thin film. This algorithm can implement parallel treatment, and is a self-adaptive random algorithm with overall search capability in principle. The algorithm is used in optical thin film design, and some examples are presented. According to the results of experiments, the idea of applying multiobjective optimization approach to designing optical thin film can be realized in theory and have a bright future.

Key words optical design; optical thin film; multiobjective optimization; response of the immune system

1 引 言

光学薄膜^[1~4]的计算机辅助优化设计方法^[5]可以分为两类:一类从一初始结构出发,不改变膜系层数,应用各种优化设计方法,仅对厚度和折射率进行优化,从而找到最优解(Refinement);另一类是不需要初始解而通过不断增加层数来进行膜系的自动合成来达到应用要求(Synthesis)。几乎每一种优化方法都可以应用到薄膜设计问题中来。松弛法、最小二乘法、模式搜索法,阻尼最小二乘法、单纯形法、

Powell 共轭方法、变尺度法等多种局部优化方法都被广泛地应用到膜系设计中来。随着全局优化方法的发展,有统计试验法、模拟退火、遗传算法、进化算法、Latin Squire、全面搜索法、求总极值法等各种方法也在膜系设计中取得了一定的效果。特别是近些年发展起来的 Needle 法^[6~8],加拿大 Dobrowolski 提出的多级优化设计光学薄膜概念^[9],使优化设计方法能够成功地解决薄膜设计中的大部分问题。一些特殊膜系,如消偏振膜系、分离波段上有不同光谱

收稿日期: 2007-09-10; 收到修改稿日期: 2008-04-22

作者简介: 王文梁(1978—),男,博士,主要从事光学薄膜方面的研究。E-mail: w.l.wang@163.com

导师简介: 熊胜明(1964—),男,研究员,博士生导师,主要从事薄膜光学与技术方面的研究。E-mail: xsm@ioe.ac.cn

要求的膜系等,现有的优化设计方法仍不能得到比较好的结果。这是因为已在光学薄膜设计中应用的优化方法都是单目标寻优的,不能将不同偏振光,或不同波段上的光谱要求反映在优化设计过程中。

本文通过光学薄膜优化设计原理的分析,将光学薄膜优化设计的物理问题,归结为混合离散变量的多目标优化的数学模型。结合多目标优化方法的研究现状,采用了一种基于免疫应答原理的智能型多目标优化方法,将多目标优化的思路运用到光学薄膜设计中,给出了优化设计的实例。

2 光学薄膜多目标优化设计的原理

决定膜系的反射率 R 或透射率 T 的因素很多,大至可以分成三类。首先是入射介质 n_0 和基板 n_s ,一般是由薄膜使用时考虑的众多因素所决定的;再是膜系的工作波段范围 λ ,入射角范围 θ ,光波偏振分量 ν ,这些因素由设计需要指定;最后还有每层膜的折射率 n_i 、厚度 d_i 和膜系的总层数 m ,这些才是设计者能够改变的,称为薄膜设计的结构参量。用简单的数学式来表示薄膜反射率和所有因素的关系如下:

$$R = F(n_0, n_s; \lambda, \theta, \nu; n_i, d_i, m), \quad (1)$$

光学薄膜设计就是调整参量 $x_i = n_i d_i (i = 1, 2, \dots, m)$,在给定的波段范围 $\lambda_a \leq \lambda_j \leq \lambda_b (j = 1, 2, \dots, M)$,角度范围 $\theta_c \leq \theta_k \leq \theta_d (k = 1, 2, \dots, N)$ 内,以及对于特定的偏振分量 $\nu_\sigma (s, p_T) (\sigma = 1 \text{ 或 } 2)$,按预先给定的精度 $\epsilon_l (l = 1, 2, \dots, MN\sigma)$ (允差),找到一组参量组合 $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*)^T$,使设计得到的反射率值 R^D 与目标反射率值 R^M 满足条件

$$|R^D - R^M| < \epsilon_l, (l = 1, 2, \dots, MN\sigma), \quad (2)$$

则 X^* 就是最优设计方案。 $f_l = R^D - R^M (l = 1, 2, \dots, MN\sigma)$ 就是膜系在特定波长和入射角的某个偏振分量的反射率残差。其中 M 和 N 是所取的格点数, σ 代表偏振分量。

优化设计的基本过程,就是从一组初始参数 $X^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_k^0)^T$ 出发,根据一定的数学优化方法使计算机自动修改参数,第一次得到 $X^1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_k^1)^T$,再计算 R_1^D 。看是否能够足够的接近设计所要求的目标 R^M ,若不满足,重复修改参数,直到满足为止。由于不同偏振分量在不同格点处的反射率残差都是不一样的,所以优化设计还需要建立一个函数 $F(n_i, d_i, m)$ 来综合评价膜系的质量,这个函数就是光学薄膜优化设计的评价函数。所以,基于上述思想的薄膜优化设计的数学模型可以写为

$$\min F(n_i, d_i, m), \quad (3)$$

这是一个单目标的优化问题。评价函数 $F(n_i, d_i, m)$ 有很多种构建方式^[6],具有一般性特点的形式是

$$F(n_i, d_i, m) = \sum \omega_l (R^D - R^M)^2,$$

实际上是把不同偏振分量在不同格点处的反射率残差按一定的权重进行了叠加。

上面的分析是现行的光学薄膜优化设计的过程和原理。可以看到薄膜优化设计问题参量众多,而且不同偏振分量在不同格点处的反射率残差一般不同。优化得到的最优方案,实际应该是一个折中的方案,综合评价所有的反射率残差来满足精度要求,这本质上是符合多目标优化的思想的。而且结构参数中,折射率 n_i 由于实际材料的限制只能取一些离散值;厚度 d_i 可取连续值,但有非负的自然要求,由于工艺的限制, d_i 不能取得太大。所以,符合光学薄膜设计物理本质的一般性数学模型是混合离散变量的多目标优化。

将所有的反射率残差加权叠加的过程,实际上是把多目标优化问题简化为单目标问题,这只是多目标优化问题最初步的解法。显然,简单的加权叠加不能很好的反映多目标优化的本质,追求总体目标,不能具体的反映各个具体目标的差别。光学薄膜设计中,常有消偏振的要求,以及多个分离波段上有不同光谱要求的问题。对于这些情况,除总体目标外,各偏振分量或不同波段上的要求显然比较重要。以消偏振要求的膜系为例来构建光学薄膜设计多目标优化设计的数学模型,如下式:

$$\min F(n_i, d_i, m) = \min [F_s(n_i, d_i, m), F_p(n_i, d_i, m)]^T, \quad (4)$$

可以看到,多目标优化实际上是向量函数的极值问题,将两个偏振分量的评价函数变成了向量函数的两个分量函数。显然,结构参数 n_i 和 d_i 的限制和上面说明的一样,但为简化设计,材料一般事先指定,而只对厚度优化,简化为一般多目标优化问题。两个偏振分量的评价函数形式也完全可以参考现有的单目标优化方案的构建方式。

3 基于免疫应答原理的多目标优化方法

多目标优化^[10]与单目标优化的一个最重要的不同是:一般不存在唯一的全局最优解,而是存在多个最优解的集合,其元素就其全体目标而言是不可比较的。这个最优解的集合称为 Pareto 最优解集,或非劣解集、有效解集。这一概念构成了多目标优

化各种算法的基础。为了从 Pareto 最优解集中选出特定的解或子集, 还须引入决策者的选好或偏好信息。这个概念的实质是决策者在对各备选方案的选评中, 对所依据原评选准则之间赋予的协调关系或折中由自己显式或隐式给出。这个由决策者应用其偏好信息在 Pareto 解集中最终选择的解称为偏好解。

多目标优化算法最基本的方法是通过分量加权组合^[11,12], 将多目标函数 $F(x)$ 各分量函数 $F_i(x)$ 按一定规则加权后, 再依某种方式求和, 做出评价函数, 然后对此函数进行单目标最优求解。免疫系统是一种高度并行的分布式、自适应信息处理学习系统。免疫应答是指抗原进入机体后, 刺激免疫系统所发生的一系列复杂变化。虽然这一机制的复杂性仍处于逐步探索中, 但它已表现的某些性质可以融入到人工智能系统中。基于免疫机制发展起来的人工免疫系统, 具有高度分布式, 高度并行的特点, 具备处理复杂信息的能力, 被认为是多目标优化领域最有前途的思想。本文所采用的一种基于免疫应答原理而构建的多目标优化算法正是这一领域的新研究成果^[13]。这一算法主要由进化链: 抗体群→克隆选择→细胞克隆及记忆细胞演化→亲和突变→免疫

选择→募集新成员→新抗体群的简单数学模拟来构建的, 其详细运行机制如图 1 所示。

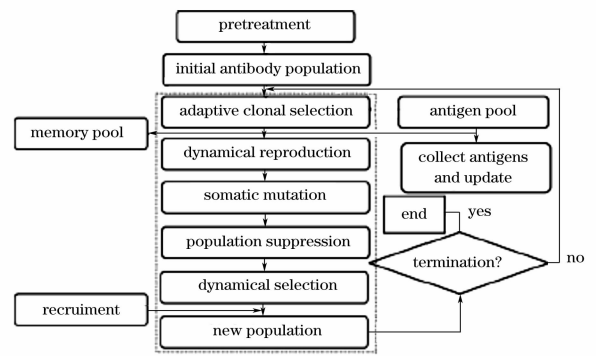


图 1 基于免疫应答原理的多目标优化算法流程图
Fig. 1 Flow chart of immune response-based algorithm for multiobjective optimization

4 优化设计实例

根据第 3 部分的原理, 采用 Visual C++ 编写了程序, 就有消偏振要求的膜系为例子, 说明多目标优化算法在光学薄膜设计中的应用。其优化模型已在 (4) 式给出, 材料事先给定, 高低折射率材料分别是 Ta_2O_5 (2.15) 和 MgF_2 (1.38), 而厚度 $d_i \in [0, 500]$, 运算中两个偏振分量的评价函数的具体形式为

$$\begin{cases} F_s = r_1 \left\{ \sum_{i,j} [R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; s) - M_s]^2 \right\}^{1/2} + r_2 \left\{ \sum_{i,j} [R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; s) - R^M(X^M; \lambda_i, \theta_j; s)]^2 \right\}^{1/2}, \\ F_p = r_1 \left\{ \sum_{i,j} [R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; p) - M_p]^2 \right\}^{1/2} + r_2 \left\{ \sum_{i,j} [R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; p) - R^M(X^M; \lambda_i, \theta_j; p)]^2 \right\}^{1/2}, \end{cases} \quad (5)$$

式中 r_1 和 r_2 分别是权重,

$$M_s = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{i,j} R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; s),$$

$$M_p = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{i,j} R^D(X^D; \lambda_i, \theta_j; p),$$

分别是 s 分量和 p 分量的反射率在各波点的平均值。上式中两分量的评价函数的构建实际上是平坦型的评价函数和平方型的评价函数的组合, 可以保证各分量的设计值与目标值尽可能的接近, 而且使设计反射率曲线在各波点的相对偏差比较小。

优化过程中, 初始抗体群规模为 50, 初始抗原群规模为 20; 克隆选择半径 0.3, 抗体群抑制半径 0.4, 抗原群抑制半径 0.5, 记忆群抑制半径 0.4, 进化代数 1000。

如图 2 所示是四层的可见光波段消偏振减反膜优化设计结果, 波长范围为 450~650 nm; 入射角 45° ; $n_0 = 1$, $n_s = 1.52$ 。是多目标优化所得到的

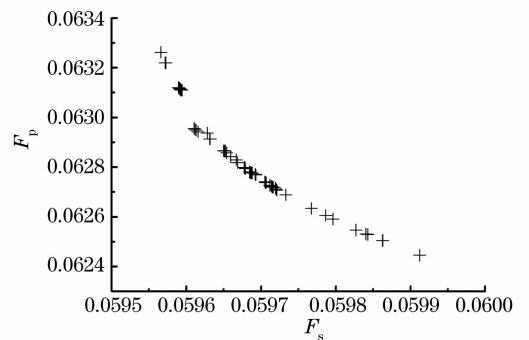


图 2 四层可见光波段减反膜的设计结果
Fig. 2 Design result of four-layer visible band de-polarizing antireflection coating

Pareto 最优解集, 每一个点联系着一组结构参数, 也就是对应一组膜系。横坐标与纵坐标分别是 s 分量和 p 分量的评价函数, 反映了两个分量的反射率计算值与各自设计目标值的偏离。消偏振膜系的要求是要 s 分量和 p 分量的设计反射率充分接近设计目

标,而且要使两个分量的偏振分离非常的小。选择两个分量的评价函数值都非常的小,而且相互差别尽可能小的点。在图 2 中选择 (0.0598627, 0.0625048)点,画出其对应的反射率曲线图如图 3 所示。可以看到,s 分量和 p 分量的剩余反射率都基本在 0.5% 以下,两分量的偏振分离也比较小。表 1 是对应的膜系具体结构,顺序是从入射介质到基板。

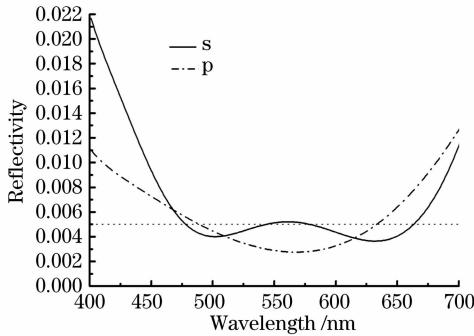


图 3 (0.0598627,0.0625048)点对应膜系的光谱曲线
Fig.3 Reflectivity curve of film corresponding to (0.0598627,0.0625048)

表 1 (0.0598627,0.0625048)点对应膜系的具体结构
Table 1 Concrete structure of multilayer corresponding to (0.0598627,0.0625048)

Layer	Material	Refractive index	Physical thickness /nm
0	Air	1.00	
1	MgF ₂	1.38	108.784
2	Ta ₂ O ₅	2.15	128.562
3	MgF ₂	1.38	30.4051
4	Ta ₂ O ₅	2.15	15.6239
Sub	Glass(K9)	1.52	

七层的双波段消偏振减反膜设计结果如图 4 所示。波长范围为 500~680 nm 和 1260~1360 nm;入射角 45°; n₀=1, n_s=1.52。

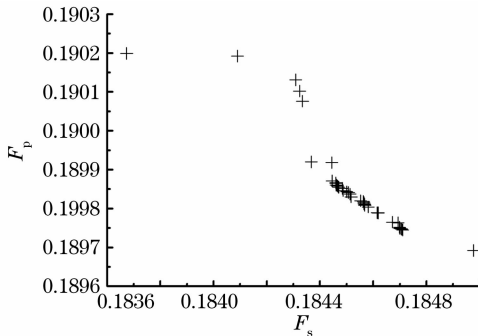


图 4 七层双波段消偏振减反膜的设计结果
Fig.4 Design result of seven-layer two-separate-waveband de-polarizing antireflection coating

解的分布相对比较分散,由于采用的基于免疫应答原理的多目标优化算法是随机搜索的,这种情况可能预示着存在更加好的解的分布,一般可以通过增加算法的进化代数来得到。根据设计目标,选择(0.184977,0.189692)点,画出其对应的反射率曲线和膜系厚度分布,分别如图 5 和表 2 所示。

表 2 (0.184977,0.189692)点对应膜系的具体结构
Table 2 Concrete structure of multilayer corresponding to (0.184977, 0.189692)

Layer	Material	Refractive index	Physical thickness /nm
0	Air	1.00	
1	MgF ₂	1.38	129.985
2	Ta ₂ O ₅	2.15	276.981
3	MgF ₂	1.38	18.2001
4	Ta ₂ O ₅	2.15	16.7009
5	MgF ₂	1.38	273.914
6	Ta ₂ O ₅	2.15	14.1182
7	MgF ₂	1.38	25.5777
Sub	Glass(K9)	1.52	

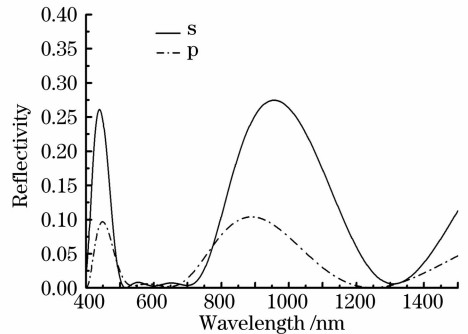


图 5 (0.184977,0.189692)点对应膜系的光谱曲线
Fig.5 Reflectivity curve of film corresponding to (0.184977,0.189692)

5 结 论

考虑多目标优化算法的研究进展,采用了一种基于免疫应答原理的智能型多目标优化算法,将其引入到光学薄膜设计中,并给出了两个设计实例。结果表明,多目标优化模型在光学薄膜优化设计中应用的原理是可行的,代表的是一类最具一般意义的情况。

然而,光学薄膜设计是一类复杂的问题,一般拥有几十上百的参量,评价函数是个高度非线性并具有多峰性特点的复杂函数。而多目标优化算法的研究还处于一个比较低的阶段,目前还难已解决优化目标太多,或者参量众多的高维多目标优化问题。但本文提出的思路是薄膜优化设计中未曾试探的,

具有较强的理论意义,期望有比较好的发展前景。

参 考 文 献

- 1 Hou Haihong, Shen Jian, Shen Zicai *et al.*. Stratified-interface scattering model for multilayer optical coatings[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(7): 1102~1106
侯海虹,沈 健,沈自才 等. 光学薄膜的分层界面散射模型[J]. 光学学报, 2006, **26**(7): 1102~1106
- 2 Ma Xiaofeng, Wang Dan, Liu Dingquan *et al.*. Design of non-polarizing broadband antireflection coating using equivalent layer [J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(3): 563~566
马小凤,王 丹,刘定权 等. 利用等效层的消偏振宽带减反膜设计[J]. 光学学报, 2007, **27**(3): 563~566
- 3 Li Bincheng, Xiong Shengming, Holger Blaschke *et al.*. Measuring weak absorbance of optical thin films with laser calorimetric technique[J]. *Chin. J. Lasers*, 2006, **33**(6): 823~826
李斌成,熊胜明, Holger Blaschke 等. 激光量热法测量光学薄膜微弱吸收[J]. 中国激光, 2006, **33**(6): 823~826
- 4 Ling Bo, Liu Shijie, Yuan Lei *et al.*. Influence of metal contamination in vacuum chamber on properties of optical thin films[J]. *Chin. J. Lasers*, 2007, **34**(7): 988~991
凌 波,刘世杰,袁 磊 等. 真空室内金属杂质污染对光学薄膜性能的影响[J]. 中国激光, 2007, **34**(7): 988~991
- 5 P. Baumeister. Design of multiplayer filters by successive approximations[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1958, **4**(8): 955~968
- 6 A. V. Tikhoravov, J. A. Dobrowlski. Quasi-optimal synthesis for antireflection coating: a new method [J]. *Appl. Opt.*, 1992, **32**(5): 4265~4275
- 7 Zhou Jian, Lin Yongchang. A new method of coatings design-needle method[J]. *Acta Optica Sinica*, 1997, **17**(10): 1445~1449
周 健,林永昌. 一种新的膜系设计方法——Needle法[J]. 光学学报, 1997, **17**(10): 1445~1449
- 8 Lin Yongchang, Zhang Cheng, Li Fang. Coatings auto design with needle and tunnel in method[J]. *Optical Instruments*, 1999, **21**(4~5): 5~11
林永昌,张 诚,李 芳. Needle-Tunneling法膜系自动设计[J]. 光学仪器, 1999, **21**(4~5): 5~11
- 9 J. A. Dobrowlski. Computer design of optical coating[J]. *Thin Solid Films*, 1988, **16**(3): 97~110
- 10 Hu Yuda. *Applied Optimization Method for Multiobjective* [M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 1990
胡毓达. 实用多目标最优化[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1990
- 11 Hwang C L, Masud A S M. *Multiple Objective Decision Making Methods and Application* [M]. Berlin: Springer verlag, 1979
- 12 Schaffer J D. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms [C]. *Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms*, Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, 1985. 93~100
- 13 Zhang Zhuhong. Immune optimization algorithm for constrained nonlinear multiobjective optimization problems[J]. *Applied Soft Computing*, 2007, **7**: 840~857