

文章编号: 0253-2239(2010)12-3660-05

多层光学薄膜模拟退火算法的研究

张晓娟^{1,2} 乔冠军¹ 刘汉臣²

(¹ 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 陕西 西安 710049)
² 西安工程大学理学院, 陕西 西安 710048)

摘要 多层光学薄膜系统的评价函数是复杂的非线性多峰函数,传统数值计算方法在不知评价函数性态的情况下,计算全局极值很困难,且计算不稳定,效率比较低。模拟退火算法运行效率高,较少受初始解的限制,在接受优化解的同时接受部分较差的解,容易得到全局极值。对一般模拟退火算法进行了改进,增加了加温和记忆模块,使算法能够更加合理地选择控制参数的初始值和记住搜索过程中遇到过的最好结果,提高了算法跳出局部最优“陷阱”的能力。采用改进后的模拟退火算法设计的红外增透膜、中性分光镜和 10.4 μm 长波通滤光片,目标函数值分别降低了 77.6%, 31.9% 和 96.2%,膜系具有良好的光谱特性和更加平坦的透射率曲线。

关键词 薄膜;优化设计;模拟退火算法;优化算法

中图分类号 O439 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20103012.3660

Simulated Annealing Algorithm for Multi-Layer Optical Thin Films

Zhang Xiaojuan^{1,2} Qiao Guanjun¹ Liu Hanchen²

(¹ State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University,
Xi'an, Shaanxi 710049, China
² School of Science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an, Shaanxi 710048, China)

Abstract The evaluation function of multi-layer optical thin film systems is a complex nonlinear multi-modal function. Traditional numerical methods could hardly obtain global extreme when the properties of evaluation function are unknown, with calculation of instability and low efficiency. Simulated annealing algorithm (SAA) exhibits some advantages such as high efficiency, less restricted by the initial solution and ability of obtaining global extreme. This is because SAA accepts the optimized solution and part of the poor solution at the same time. General simulated annealing algorithm is improved by adding heating and memory module. Improved algorithm could select the initial value of control parameters more reasonably and memorize the optimal solution ever encountered in search process. Thus the ability to jump out of local optimum “trap” is improved accordingly. Antireflective film, neutral spectroscopy and 10.4 μm long-wave pass filter designed by improved algorithm, the value of evaluation function is decreased by 77.6%, 31.9%, 96.2% respectively. Film system has good spectral characteristic and more flat transmittance curves.

Key words thin films; optimized design; simulated annealing algorithm; optimization algorithm

1 引 言

一个光学薄膜系统的光谱特性如透射率、反射率或吸收率与薄膜厚度、折射率和波长的关系相当复杂,实际上它们构成的是一个高度非线性多峰函数。利用已知的光学薄膜参数去计算这种函数比较

容易,但是根据已知的光谱特性利用此多峰函数求解光学薄膜参数则比较困难。经过半个多世纪,发展了三类光学薄膜的设计方法即图解法^[1]、分析法^[2]和数值优化法^[3]。前两种方法统称解析法,并在光学薄膜设计中已经得到了成功应用。伴随着计

收稿日期: 2010-03-29; 收到修改稿日期: 2010-05-28

基金项目: 国家自然科学基金(50835007)资助课题。

作者简介: 张晓娟(1976—),女,博士研究生,讲师,主要从事应用光学方面的研究。E-mail: zhxj-168@163.com

计算机技术的高速发展以及任意膜厚监控技术的成功应用,非规整薄膜的膜系自动设计方法获得了发展^[4,5],改进数值优化方法和综合设计法如 Monte Carlo^[6]法、遗传算法^[7]、模拟退火算法(SAA)^[8,9]和针法^[10~12]等先后应用到光学薄膜设计领域。模拟退火算法是近年来提出的一种适合解大规模组合优化问题的有效近似算法。它与以往的算法相比,具有描述简单、使用灵活、运用广泛、运行效率高和较少受初始解限制等优点,且不易陷入局部最优的“陷阱”。本文对传统模拟退火算法进行了改进,增加了加温和记忆装置,使算法能够更加合理地选择控制参数的初始值和记住搜索过程中遇到过的最好结果,提高了算法跳出局部最优“陷阱”的能力。采用改进后的算法设计的光学膜系,目标函数值降低、光谱性能稳定,达到了理想的效果。

2 算法描述

2.1 Metropolis 算法

模拟退火算法的最早思想由 Metropolis^[13]在 1953 年提出, Kirkpatrick^[14]在 1983 年成功地应用在组合优化问题中。Metropolis 算法可以写为

- 1) 给定一粒子相对位置表征的初始状态 i , 能量 E_i ;
- 2) 粒子位移随机产生一微小变化, 得到新状态 j , 能量为 E_j 。如果 $E_j > E_i$, 则 $i = j$, 否则计算

$$r = \exp\left(\frac{E_i - E_j}{kT}\right). \quad (1)$$

式中 k 为玻尔兹曼常数, T 为温度。

若 $r > \text{random}(0, 1)$, 则 $i = j$, 否则舍弃, 重复 2)。

经过固体状态的大量变换后, 系统趋于能量较低的平衡状态, 固体状态的概率分布趋于吉布斯正则分布。

2.2 一般模拟退火算法

设组合优化问题的一个解 x_i 及其目标函数 $f(x_i)$ 分别与固体的一个微观状态 i 及其能量 E_i 等价, 令控制参数 t 担当固体退火过程中温度 T 的角色, 对于控制参数 t 的每一个取值, 算法进行产生“新解-判断-接受/舍弃”的过程, 即执行了一次 Metropolis 算法。减小控制参数 t 的值, 重复执行 Metropolis 算法, 就可以在控制参数 t 趋于 0 时, 最终求得组合优化问题的整体最优解。因此模拟退火算法可以视为递减控制参数值时 Metropolis 算法

的迭代。

2.3 加温模拟退火算法

为了得到适当的控制参数 t 的初始值 t_0 , 对组合优化问题的任给的初始解 x_0 , 先令 $t_0 = 0$, 然后进行若干次实验, 当且仅当评价函数值增大时接受其转移, 同时令 t_0 按增量函数 $h(t) = t + h$ 值增加, 当实验结束时, 以所得的 t_0 作为控制参数 t 的初始值, 并以此时的当前解 x_i 作为初始解 x_0 开始退火^[15]。

2.4 有记忆的模拟退火算法

为了使算法能够记住搜索过程中遇到的最好结果, 给算法增加一个记忆器。记忆装置可以设置为变量 x^* 和 f^* , 其中 x^* 用于记忆当前遇到的最优解, f^* 为其评价函数。开始令 x^* 和 f^* 分别等于初始解及其评价函数, 以后每接受一个新解时就将新当前解的目标函数 f 与 f^* 比较, 若 f 优于 f^* , 则将 x_i 和 f 分别存入 x^* 和 f^* , 最后算法结束时, 再从最后当前解 x_i 及 x^* 选取较优者作为最终解^[15]。

图 1 是改进后具有加温和记忆模块的 SAA 算法流程图。

3 光学薄膜优化设计的评价函数

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

$$R = R(\mathbf{x}) = R(x_1, x_2, \dots, x_m), \quad (2)$$

式中 x_1, x_2, \dots, x_m 为各层光学薄膜的厚度。

构造平方和形式的评价函数

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^m \mu_k [R_k(\mathbf{x}) - R_k^{(0)}]^2, \quad (3)$$

式中 μ_k 为权重因子, $R_k^{(0)}$ 为理想的光谱特性, 则膜系设计就是寻求使目标函数值最小即 $F(\mathbf{x})$ 最小的一组结构参数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ 。

对于多层光学薄膜, 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_{m+1} , 光束入射角为 φ_0 , 基体的特征导纳为 η_{m+1} , 则任一波长 λ_j ($j = 1, 2, 3, \dots, l$ 是算法中选取的波点数) 的反射率为

$$R(\lambda_j) = \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y}\right) \left(\frac{\overline{\eta_0 - Y}}{\eta_0 + Y}\right), \quad (4)$$

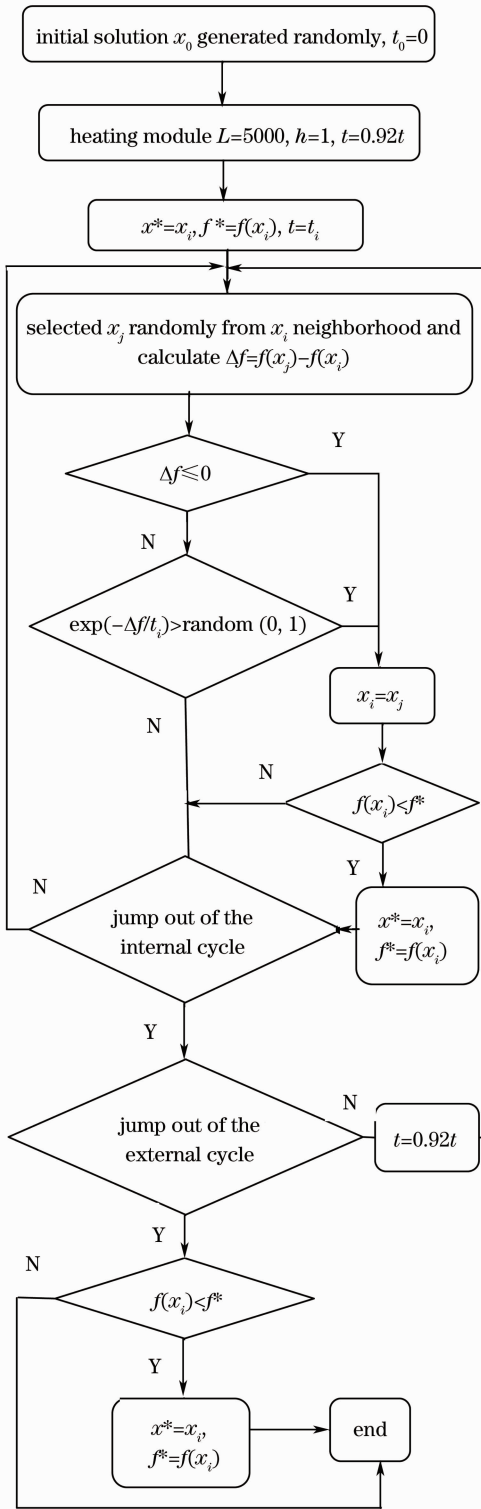


图 1 改进的 SAA 流程图

Fig. 1 Flow diagram of improved SAA

式中

$$Y = \frac{C}{B}, \quad \delta_k = \frac{2\pi x_k \cos \varphi_k}{\lambda_j}, \quad (5)$$

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \prod_{k=1}^m \begin{bmatrix} \cos \delta_k & i \sin \delta_k / n_k \\ i n_k \sin \delta_k & \cos \delta_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{m+1} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

将上述反射率的表达式代入评价函数,再结合不同设计要求时的取值,如对于增透膜, $R_k^0 = 0$; 对于中性分光镜, $R_k^0 = 50\%$, 便可以得到不同膜系的评价函数。

根据不同的设计要求,评价函数可以采用面积型、平方和型和最大偏差型等,本文的膜系设计均采用平方和型评价函数。

4 设计结果及分析

4.1 400~700 nm 波段五层增透膜设计结果与分析

由折射率为 1.38 的氟化镁和 2.0 的氧化锆交替镀制的五层增透膜系,减反射带为 400~700 nm,基底折射率 1.52,空气入射,工作角度为 0,设计结果如表 1 所示,透射率曲线如图 2 所示,其中 SAA 表示模拟退火算法。

表 1 SAA 设计的增透膜结构

Table 1 Structure of antireflection coating designed by SAA

Layer (refractive index)	Thickness with SAA /nm	Thickness with improved SAA /nm
Air(1.0)		
1(1.38)	123.43	120.52
2(2.0)	134.51	186.71
3(1.38)	16.22	19.23
4(2.0)	79.32	48.91
5(1.38)	226.63	252.43
Substrate(1.52)		
Evaluation function	8.92	1.61
Average transmittance /%	98.12	99.84

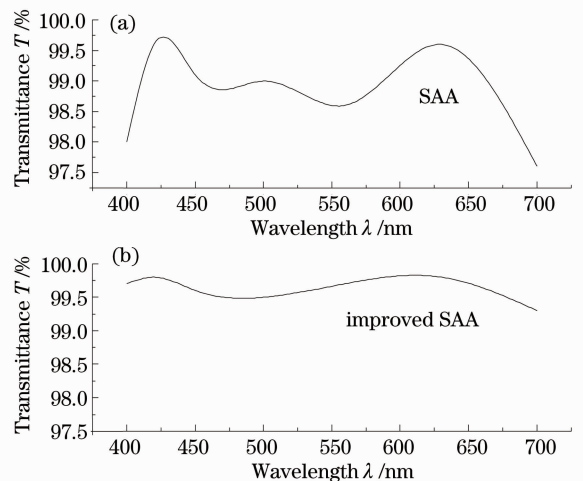


图 2 (a)SAA 和(b)改进的 SAA 设计的 5 层增透膜理论透射率曲线

Fig. 2 Theoretical transmittance curves of 5-layer AR coating with (a) SAA and (b) improved SAA

一般退火算法得到的评价函数函数值为 $F = 8.92$ ，在 $400 \sim 700 \text{ nm}$ 波段的平均透射率为 98.12% ，透射率的最大起伏约为 0.7% 。改进后的算法得到的评价函数函数值为 $F = 1.61$ ，在 $400 \sim 700 \text{ nm}$ 波段的平均透射率为 99.84% ，透射率的最大起伏约为 0.1% ，透射率曲线已经是很平坦了。

4.2 中性分光镜优化设计

分光镜是把入射光分成透射光和反射光两部分，对于不同的用途，分光镜有不同的透射率和反射率之比 (T/R)，根据这个要求，目标反射率应在某个指定的波段上取常数。

对于六层胶合棱镜中性分光镜，采用平方和形式的评价函数

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^m \mu_k [R(x_k) - R_0]^2. \quad (7)$$

在可见光区内透射率与反射率的比值为 $0.5/0.5$ ，工作角度 45° ，棱镜玻璃的折射率为 1.52 ，两种材料的折射率分别为 1.35 和 2.35 ，设计结果如表 2 所示，透射率曲线如图 3 所示，其中 SAA 表示模拟退火算法。

表 2 SAA 设计的中性分光镜结构

Table 2 Structure of neutral spectrocope designed by SAA

Layer (refractive index)	Thickness with SAA /nm	Thickness with improved SAA /nm
Glass(1.52)		
1(1.35)	114.67	90.22
2(2.35)	42.15	68.53
3(1.35)	97.63	132.61
4(2.35)	158.7	117.64
5(1.35)	183.43	215.82
6(2.35)	216.28	223.51
Substrate(1.52)		
Evaluation function	14.36	9.92
Average Transmittance /%	41.4	50.6

一般退火算法得到的评价函数值为 $F = 14.36$ ，在可见光区域内，平均透射率 41.6% ，透射率与目标透射率 50% 之间的最大偏差高达 20% 。采用改进后的退火算法，评价函数值为 $F = 9.92$ ，在可见光区域内，平均透射率 50.6% ，透射率与目标透射率 50% 之间的最大偏差约为 5% ，设计结果得到了很大的改善。

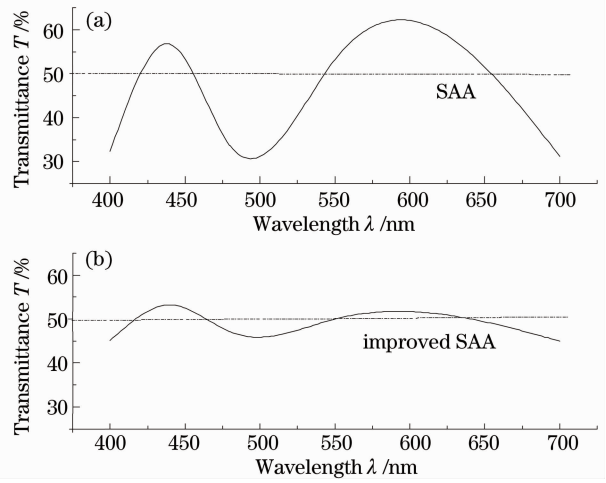


图 3 (a)SAA 和(b)改进的 SAA 设计的中性分光镜的理论透射率曲线

Fig. 3 Theoretical transmittance curves of neutral spectrocope with (a) SAA and (b) improved SAA

4.3 干涉截止滤光片自动设计

要求在某一范围内的波长高透射，而偏离这一波长的光束骤然变为高反射的干涉截止滤光片有着广泛的应用。

对于 $10.4 \mu\text{m}$ 长波通滤光片，目标反射率在 $0 < \lambda < 10.4 \mu\text{m}$ 时等于 0 ，在 $10.4 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 14 \mu\text{m}$ 波段等于 100% 。采用平方和型评价函数，选用硫化锌和碲化铅，折射率分别为 2.2 和 5.5 ，膜系单数层折射率为 2.2 ，偶数层折射率为 5.5 ，基底材料为锗，折射率 4.0 ，取 30 个波点数，设计结果如表 3 所示，透射率曲线如图 4 所示。

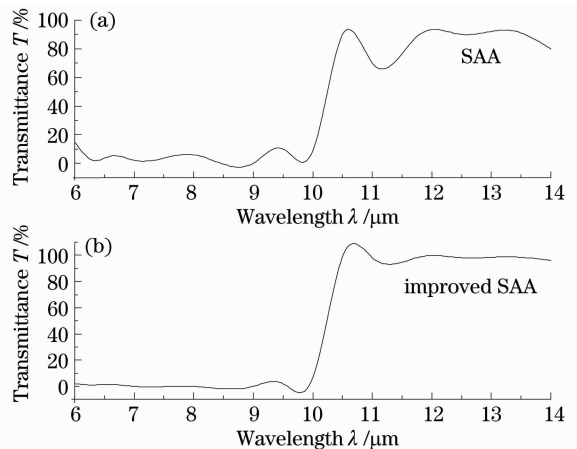


图 4 (a)SAA 和(b)改进的 SAA 设计的长波通滤光片理论透射率曲线

Fig. 4 Theoretical transmittance curves of long-wave pass filter with (a) SAA and (b) improved SAA

表3 SAA设计的15层10.4 μm 长波通滤光片结构
Table 3 Structure of 15-layer 10.4 μm long-wave pass filter designed by SAA

Layer	Thickness with SAA /nm	Thickness with improved SAA /nm
Air		
1	4587.8	3876.8
2	1267.9	1951.6
3	1489.4	1619.2
4	1734.5	1570.8
5	984.2	1245.1
6	123.4	87.6
7	935.6	1123.7
8	1145.6	1378.5
9	2976.1	2536.7
10	976.8	1243.4
11	1346.8	1617.9
12	3214.9	3709.5
13	1267.4	846.3
14	2167.2	1850.1
15	1267.4	1387.7
Substrate		
Evaluation function	2.6723	0.1008
Mean transmittance /%	85.5	98.01
Mean reflectance /%	6.25	0.11

一般退火算法得到的评价函数值为 $F = 3.6723$, 其高反区和透射区都有凹谷和凸峰, 峰值约为 20%, 采用改进后的退火算法, 评价函数值为 $F = 0.1008$, 高反带中的凹凸已经减小, 通带次峰也降到了约 10%。

5 结 论

本文对模拟退火算法进行了改进, 增加了加温和记忆模块, 提高了算法所得解的质量。采用改进的模拟退火算法设计的红外增透膜系、中性分光镜和长波通滤光片, 目标函数值降低, 膜系具有良好的光谱性能且透射率曲线更加平坦。对于任何优化算法, 不断提高算法效率和全局搜索能力是研究的重点内容, 对于模拟退火算法也不例外。除了对模拟退火算法本身进行改进, 选择适当的参数提高算法质量外, 也可以将模拟退火算法和传统算法如单纯形法, 梯度法等结合起来, 有可能是更好的方法, 将

是今后研究的一项内容。

参 考 文 献

- R. J. Pegis. An exact design method for multilayer dielectric film [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1961, **51**(11): 1255~1264
- S. D. Smith. Design of multilayer filters by considering two effective interfaces[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1958, **48**(1): 43~49
- C. Holm. Optical thin film production with continuous reoptimization of layer thicknesses [J]. *Appl. Opt.*, 1979, **18**(12): 1978~1982
- He Caimei, Fu Xiuhua, Zhang Jiabin *et al.*. Study and fabrication of visible and IR dual-band broadband antireflection coating[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(10): 2929~2933
- 贺才美, 付秀华, 张家斌等. 可见与红外双波段宽带增透膜的研制[J]. *光学学报*, 2009, **29**(10): 2929~2933
- Peng Donggong, Wu Yonggang, Jiao Hongfei *et al.*. Desing of narrowband high-reflection filter coating with wide stop band[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(5): 1001~1006
- 彭东功, 吴永刚, 焦宏飞等. 宽截止窄带高反射滤光膜设计[J]. *光学学报*, 2008, **28**(5): 1001~1006
- M. P. Hobson, J. E. Baldwin. Markov-chain Monte Carlo approach to the design of multilayer thin-film optical coatings[J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(13): 2651~2660
- S. Martin, J. Rivory, M. Schoenauer. Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms [J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(13): 2247~2254
- T. Boudet, P. Chaton, L. Herault *et al.*. Thin-film designs by simulated annealing[J]. *Appl. Opt.*, 1996, **35**(31): 6219~6226
- Duan Yuhua, Jing Xili, Song Chaoqun. Optimized design of 3-skip-1 filter for 100 GHz used in optical add-drop multiplexing [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(11): 2243~2244
- 段玉华, 井西利, 宋超群. 光分插复用 32-skip-1 100 GHz 滤波器的最优化设计[J]. *光学学报*, 2008, **28**(11): 2243~2244
- A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, G. W. DeBell. Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings [J]. *Appl. Opt.*, 1996, **35**(28): 5493~5508
- Chen Naibo, Wu Yonggang, Lin Leijie *et al.*. Thin-film polarizers designed by the needle method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(2): 590~596
- 陈乃波, 吴永刚, 凌磊婕等. 基于针法的平板偏振膜设计[J]. *光学学报*, 2010, **30**(2): 590~596
- Wang Wenliang, Xiong Shengming. Multiobjective optimization approach of optical thin film design [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(10): 2026~2030
- 王文梁, 熊胜明. 光学薄膜自动设计的多目标优化方法[J]. *光学学报*, 2008, **28**(10): 2026~2030
- N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth *et al.*. Equation of state calculations by fast computing machines[J]. *J. Chem. Phys.*, 1953, **21**(6): 1087~1092
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr, M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing[J]. *Science*, 1983, **220**(4598): 671~680
- Kang Lishan, Xie Yun, You Shiyong *et al.*. Simulated Annealing Algorithm[M]. Beijing: Science Press, 2000. 169~178
- 康立山, 谢云, 尤矢勇等. 模拟退火算法[M]. 北京: 科学出版社, 2000. 169~178