

文章编号: 0253-2239(2010)09-2646-06

极紫外光谱仪光学系统的优化设计

徐 挺 吕丽军

(上海大学精密机械系, 上海 200072)

摘要 将平面对称光学系统的像差理论应用于极紫外(XUV)光栅仪器的评价函数,可以得到评价函数关于光学参数的解析表达式。应用合作型协同进化遗传算法来解决多参量评价函数的优化问题,建立了优化程序。应用该程序对 XUV 摄谱仪系统进行优化设计,并运用光线追迹程序 Shadow 对该光学系统进行数值成像计算和比较,研究表明发展的评价函数在 XUV 多元件光栅光学系统优化设计中是十分有效的。

关键词 光学设计;评价函数;像差;优化设计

中图分类号 TH744.1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20103009.2646

Optimization of Optical System of Extreme Ultra-Violet Spectrometer

Xu Ting Lü Lijun

(Department of Precision Mechanism, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

Abstract The aberration theory of plane-symmetric optical systems recently developed is applied to the merit function of extreme ultra-violet (XUV) grating instrument defined; consequently the merit function can be expressed as a function of optical parameters. This merit function of multiple parameters is optimized with the cooperative co-evolutionary genetic algorithms. The optimization program is set up, which is then used to optimize a XUV flat-field spectrograph system; the ray tracing calculations to the optical system are made with the program Shadow. The imaging calculations show that the merit function is a very useful means to optimize the XUV multi-element grating instruments.

Key words optical design; merit function; aberration; design optimization

1 引 言

在软 X 射线、真空极紫外(XUV)光谱仪系统中,通常采用反射镜和光栅元件;光学系统一般是具有平面对称的。目前,利用评价函数对此类系统开展优化设计的工作很少。其主要原因:1)在 XUV 波段光学元件的传输效率一般比较低,且装置比较复杂、昂贵,这对光学元件数目的限制使得它很难实现像常规透镜系统那样自动化设计;2)人们大多应用基于光程函数发展的像差理论^[1],这个理论本质上仅适用于单元件系统,而且它的像差表达式仅仅在光线的衍射角等于零、且像平面位于系统的子午、

弧矢的重合焦平面上才是精确的。另一种像差分析途径是光线追迹解析法^[2],虽然它的像差表达式是精确的,但表达式太过复杂,特别是对于多元件系统更是如此。

M. Koike 在关于 XUV 光栅仪器优化设计^[3]中,定义了基于像差均方差的评价函数。但无法得到像差解析表达式,特别是对于多元件系统^[4]。因此,他只能先应用光线追迹,计算 9 条光线的光瞳坐标和像坐标,通过解两组 9 个线性联立方程求出 18 个像差系数,并将像差系数代入评价函数,计算其值。利用阻尼最小二乘法,优化光学参量使评价函

收稿日期: 2009-09-24; **收到修改稿日期**: 2010-01-07

基金项目: 国家自然科学基金(10775095)和上海市教委创新基金(08YZ14)资助课题。

作者简介: 徐 挺(1984—),男,硕士研究生,主要从事 XUV 光学仪器的优化设计等方面的研究。

E-mail: pinpin@shu.edu.cn

导师简介: 吕丽军(1963—),男,教授,博士生导师,主要从事 XUV 光学及仪器技术等方面的研究。

E-mail: lulijun@shu.edu.cn(通信联系人)

数值达到最小。

最近,吕丽军基于波像差的方法发展了一般的平面对称光学系统的像差理论^[5~7]。其中的一套像差表达式是精确的,而且比光线追迹解析法简洁得多,适用于多元件光学系统的像差计算。本文的主要思想就是将该像差理论应用到 M. Koike 定义的光栅仪器评价函数,它的一个突出优点是可以直接得到评价函数关于光学系统参量的解析表达式,无疑这对优化过程和结果都更为有利。应用合作型协同进化遗传算法发展了优化设计程序。并利用该程序对 XUV 摄谱仪系统的 6 个光学系统参量进行优化设计,应用光线追迹程序 Shadow^[8]对光学系统进行成像计算,并和文献[9]中的设计相比较。

2 评价函数

图 1 为平面对称光学系统的成像示意图。 O 是光学元件的顶点, $\chi\eta z'$ 是其顶点坐标系; $xy z$ 表示光线孔径坐标系,其原点在 \bar{P} 处。 $O_0 O O_1$ 位于对称平面 $\chi O z'$ 内,它是系统的基光线; $S_0 \bar{P} S_1$ 是点光源 S_0 发出的主光线; u, u' 分别表示物方和像方的视场角;入射角 α 和衍射角 β 在对称平面内定义。

具有平面对称的面形方程一般可用如下方程表示

$$z = c_{2,0}x^2 + c_{0,2}y^2 + c_{3,0}x^3 + c_{1,2}xy^2 + c_{4,0}x^4 + c_{0,4}y^4 + c_{2,2}x^2y^2, \quad (1)$$

式中 $c_{i,j}$ 是光学元件的面形系数。

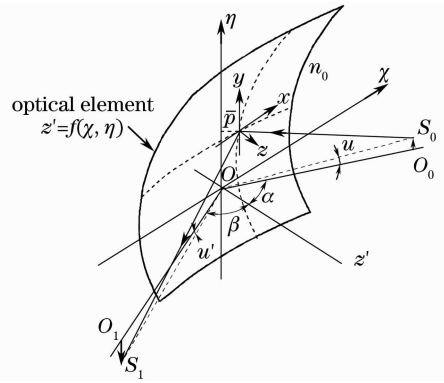


图 1 平面对称光学系统光线示意图

Fig. 1 Optical scheme of a plane-symmetric optical system

图 2 是主光线和孔径光线在弧矢平面内的示意图, O'_0 和 O'_1 分别是入、出射光瞳的中心,在关于折射光学的参考文献和书籍中,一般用 γ, t 表示物方视场角和入瞳位置。对于平面对称光学系统,用 u 表示物方视场角更方便,并且定义一个非物理参量 l 来表示入瞳的位置:

$$\overline{OP} = \gamma t = ul. \quad (2)$$

由图 2 可知, γ, t 和 u, l (带撇表示对应的像方空间参量)之间的关系为

$$\gamma = \left(\frac{l}{r_s} - 1\right)u = -\Lambda_1 u, \quad l = \frac{r_s t}{t - r_s}, \quad (3)$$

$$\gamma' = \left(\frac{l'}{r'_s} - 1\right)u' = \left(1 - \frac{l'}{r'_s}\right)u = \Lambda'_1 u, \quad l' = \frac{r'_s t'}{t' - r'_s}. \quad (4)$$

式中 $\Lambda'_1 = 1 - l'/r'_s, \Lambda_1 = 1 - l/r_s$ 。

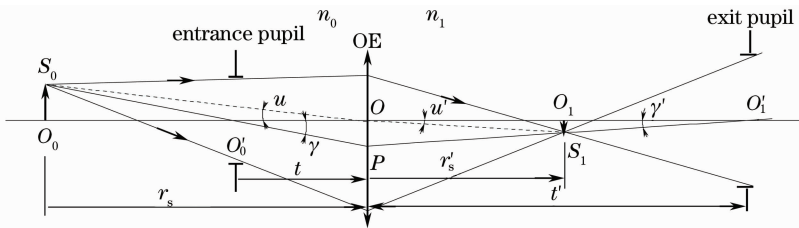


图 2 主光线和孔径光线在弧矢平面内的示意图

Fig. 2 Optical scheme of main light and aperture light on sagittal plane

光学系统的波像差表达式^[5]为

$$W = \sum_{ijk} w_{ijk} x^i y^j u^k, \quad (i + j + k \leq 4), \quad (5)$$

式中

$$w_{ijk} = M_{ijk}(\alpha, r_m, r_s, l) + (-1)^k M_{ijk}(\beta, r'_m, r'_s, l') + \Lambda N_{ijk}. \quad (6)$$

式中 $\Lambda = (m\lambda/\sigma)\Gamma$, m 为光栅级次, σ 为光栅常量, λ 为工作波长。 N_{ijk} 是与光栅刻槽系数 n_{ij} 相关的系数, M_{ijk} 是物方光束的波像差系数,它们分别由文献

[5]中的表 1 及(78)~(93)式给出。 M_{ijk} 中 r_m, r_s, r'_m, r'_s 分别为物方和像方空间的子午和弧矢焦距; $l' = -l$ 。对于变线距机刻光栅与全息光栅, Γ 和 n_{ijk} 由参考文献[2]中的(20)~(22)式给出。

对于与光学元件顶点 O 相距 r'_0 、并垂直于基光线 OO_1 的像平面,三阶像差表达式^[5,6]为

$$\begin{aligned} x' &= d_{100}x + d_{200}x^2 + d_{020}y^2 + d_{300}x^3 + d_{120}xy^2 + \\ &\quad d_{002}u^2 + d_{011}yu + d_{111}xyu + d_{102}xu^2, \quad (7) \\ y' &= h_{010}y + h_{110}xy + h_{210}x^2y + h_{030}y^3 + h_{003}u^3 + \end{aligned}$$

$$h_{001}u + h_{101}xu + h_{201}x^2u + h_{021}y^2u + h_{012}yu^2, \quad (8)$$

式中 d_{ijk} 和 h_{ijk} 为像差系数, 具体表达式由参考文献[5]中的(95)~(113)式给出。

对于 g 个光学成像面的光学系统, 系统总的波像差是各成像面的波像差之和^[5]。在孔径光线线性近似条件下,

$$W = \sum_{ijk} W_{ijk}^T x_g^i y_g^j u_g^k, \\ W_{ijk}^T = \sum_{n=1}^{g-1} W_{ijk(n)} A_{n|g}^i B_{n|g}^j + W_{ijk(g)}, \quad (9)$$

式中 $W_{ijk(n)}$, W_{ijk}^T 分别是第 n 个成像面和系统总的波像差系数, 系数 $A_{n|g}$, $B_{n|g}$ 由下式给出,

$$A_{n|g} = \frac{r'_{m(n)} r'_{m(n+1)} \cdots r'_{m(g-1)}}{r_{m(n+1)} r_{m(n+2)} \cdots r_{m(g)}} \frac{\cos \alpha_{n+1} \cos \alpha_{n+2} \cdots \cos \alpha_g}{\cos \beta_n \cos \beta_{n+1} \cdots \cos \beta_{g-1}}, \\ B_{n|g} = \frac{r'_{s(n)} r'_{s(n+1)} \cdots r'_{s(g-1)}}{r_{s(n+1)} r_{s(n+2)} \cdots r_{s(g)}}. \quad (10)$$

在计算像差系数的公式中, W_{ijk} 用 W_{ijk}^T 代替, 其它

相关的光学系统参数是指最后一个成像面的参数。

M. Koike 定义光栅仪器的评价函数^[3]为

$$Q(\lambda_i) = Q_x(\lambda_i) + \mu Q_y(\lambda_i), \quad (11)$$

$$Q_x(\lambda_i) = \frac{1}{DLU} \int_{-D/2-L/2-U/2}^{D/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-U/2}^{U/2} (x' - \bar{x}')^2 dx dy du, \quad (12)$$

$$Q_y(\lambda_i) = \frac{1}{DLU} \int_{-D/2-L/2-U/2}^{D/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-U/2}^{U/2} y'^2 dx dy du, \quad (13)$$

式中 λ_i 为仪器的某个工作波长, D 和 L 分别是入瞳在光学元件坐标系 x 和 y 方向上的宽度, U 为物方视场全角。 $-D/2 \leq x \leq D/2$, $-L/2 \leq y \leq L/2$, $-U/2 \leq u \leq U/2$ 。 μ 为 x 和 y 方向成像质量的相对权重因子。在(12)式中

$$\bar{x}' = \frac{1}{DLU} \int_{-D/2-L/2-U/2}^{D/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-U/2}^{U/2} x' dx dy du. \quad (14)$$

将(7)式、(8)式和(14)式代入(12)式、(13)式, $Q_x(\lambda_i)$ 和 $Q_y(\lambda_i)$ 的表达式为

$$Q_x(\lambda_i) = \frac{D^2 d_{100}^2}{12} + \frac{D^2 d_{100} (L^2 d_{120} + U^2 d_{102})}{72} + \frac{L^2 U^2 d_{011}^2}{144} + \frac{D^4 (2d_{200}^2 + 9d_{100} d_{300})}{360} + \\ \frac{L^4 d_{020}^2 + U^4 d_{002}^2}{180} + \frac{D^2}{960} [2D^2 d_{300} (L^2 d_{120} + U^2 d_{102}) + L^4 d_{120}^2 + U^4 d_{102}^2] + \frac{D^5 d_{300}^2}{448} + \frac{D^2 L^2 U^2 (d_{111}^2 + 2d_{120}^2)}{1728}, \quad (15)$$

$$Q_y(\lambda_i) = \frac{h_{003}^2 U^6 + h_{030}^2 L^6}{448} + \frac{U^4 D^2 h_{003} h_{201} + U^4 L^2 h_{003} h_{021} + U^2 L^4 h_{012} h_{030} + L^4 D^2 h_{030} h_{210}}{480} + \\ \frac{U^4 L^2 h_{012}^2 + U^2 L^4 h_{021}^2 + U^2 D^4 h_{201}^2 + D^4 L^2 h_{210}^2}{960} + \frac{U^4 h_{003} h_{001} + L^4 h_{010} h_{030}}{40} + \\ \frac{U^2 L^2 h_{001} h_{021} + U^2 L^2 h_{010} h_{012} + U^2 D^2 h_{001} h_{201} + D^2 L^2 h_{010} h_{210}}{72} + \frac{U^2 h_{001}^2 + L^2 h_{010}^2}{12} + \\ \frac{D^2 U^2 L^2 h_{012} h_{210} + D^2 U^2 L^2 h_{201} h_{021}}{864} + \frac{U^2 D^2 h_{101}^2 + L^2 D^2 h_{110}^2}{144}. \quad (16)$$

假如要优化在某个工作波段内光谱仪的成像性能, 一般要选该波段范围内的几个波长同时进行优化, 评价函数的最终表达式为

$$Q = \sum_i \varepsilon(\lambda_i) Q(\lambda_i), \quad (17)$$

式中 $\varepsilon(\lambda_i)$ 为各波长处成像质量的权重因子。

3 多变量函数的优化算法

由于(17)式给出的评价函数是关于多个光学系统参量组成的复杂函数, 利用遗传算法来解决它的优化问题。针对传统遗传算法在处理多极值复杂函数优化时易出现过早收敛的问题, 采用合作型协同

进化遗传算法^[10,11]。

一般优化问题都应该有目标函数 $y = Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 其解向量为 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 。本文的目标函数就是(17)式, 解向量就是需要优化的光学参量的集合。在光学系统设计中, 精度要求一般较高, 特别是对相关的角度参量。如果想保持较大的搜索范围, 将参量精度一次性设为所要求的精度, 会使搜索运算次数过大, 导致很长的计算时间。所以提出分阶段搜索, 逐步缩小参量的搜索范围和提高精度。另外, 由于算法本身在搜索最优值时存在偏差, 往往会随机收敛在最优值附近的某个值, 采取每阶段搜索 m 次以确定最优值的分布范围, 从而确

定下阶段的搜索范围。很显然 m 值越大,结果的可靠性越高。

根据上面的思想,发展了优化设计程序,其流程如图 3 所示。其中 $0 < \xi \leq 1$,一般 m 次数越大, ξ 取值可以相应越小。另外,为防止 x_i 在变化时溢出其

搜索范围, x_i 在范围内的取值个数应正好等于 2^{k_i} (k_i 为 x_i 转化成二进制编码的位数)。所以在设置 $x_{i\min}$ 和 $x_{i\max}$ 时,它们须满足

$$\frac{x_{i\max} - x_{i\min}}{\Delta x_i^{(t)}} + 1 = 2^{k_i}, \quad (18)$$

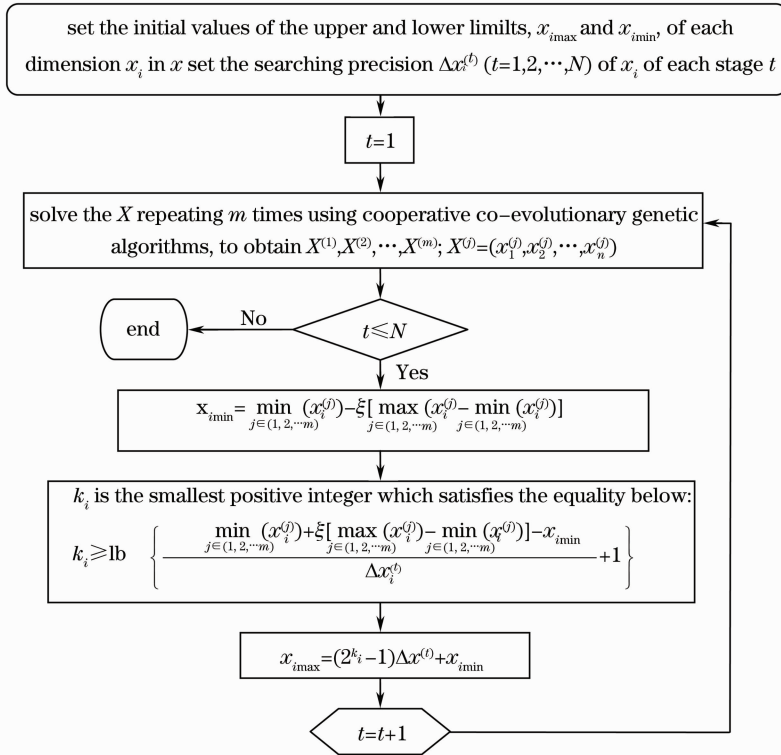


图 3 应用遗传算法优化光学评价函数的程序流程图

Fig. 3 Program flow diagram of optimizing the merit function with the genetic algorithm

4 数值验证

将(17)式给出的评价函数及上述的优化算法,对参考文献[9]中的 XUV 平场摄谱仪进行优化设计,并和该文献中原来的优化结果进行成像比较。摄谱仪光学系统如图 4 所示,由一块前置聚焦超环面镜和一块超环面全息光栅组成,摄谱仪的工作波段:3~6 nm。

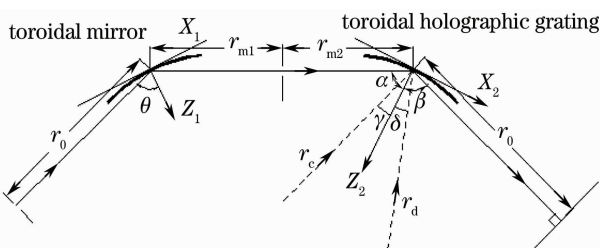


图 4 XUV 摄谱仪的光学系统示意图

Fig. 4 Optical scheme of the XUV spectrograph

优化过程中所采用的摄谱仪系统的总体参数及光源的接收等和原文献中的一样,如表 1 所示。程

序需要优化的光学参数包括超环面反射镜的弧矢半径 ρ_1 、超环面光栅的子午和弧矢曲率半径 R_2, ρ_2 , 以及光栅的全息记录参数 r_c, r_d, δ, γ 。有效光栅常数 $\sigma = 1/f$, 它和全息角度记录参数 δ, γ 之间的关系为

$$\sigma = \frac{\lambda_0}{\sin \delta - \sin \gamma}, \quad (19)$$

因此,需要优化的全息记录参数实际上就是 3 个: r_c, r_d, δ ; 整个系统共需要优化 6 个参数。

和文献[8]中一样,选择 3, 4.4, 6 nm 为评价函数(17)式中的优化波长;取 4.4 nm 处的权重因子为 2,另外两个波长处为 1,那么(17)式可表示成

$$Q = Q(\lambda_1) + 2Q(\lambda_2) + Q(\lambda_3). \quad (20)$$

根据上面的讨论,分 3 阶段搜索最优参量解,这 3 阶段的角度参量 δ 精度依次设置为 0.1, 0.01, 0.001, 其余长度参量的精度依次设置为 1, 0.1, 0.01。每一阶段搜索 $m = 10$ 次。其中取 $\xi = 0.5$ 。各优化参量搜索范围的初值如表 2 中所示,后两个阶段的参量范围按上一节中的公式确定,最终优化

结果与文献[9]的优化结果同列在表2中。由表2可知, $\delta=80.239^\circ$, 根据(19)式得到 $\gamma=45.297^\circ$ 。与表2中的两组优化结果所对应(20)式的评价函数 Q 值分别为 $Q_1=4.45 \times 10^{-3}$ (本文), $Q_2=1.596 \times 10^{-2}$ (文献[9])。

表1 XUV 摄谱仪系统的总体参数

Table 1 Parameters of XUV spectrograph layout

Parameter	Value	Parameter	Value
$\alpha / (^\circ)$	-88	areas of entrance pupil of toroidal mirror / mm^2	12.9×1.8
$\theta / (^\circ)$	-86	Optimized wavelength / nm	3, 4, 4, 6
r_0 / mm	358.39	Recording wavelength λ_0 / nm	457.93
$r'_{\text{ml}} / \text{mm}$	180	Spectrum order m	-1
$r_{\text{m}2} / \text{mm}$	34.9	Groove density $f / (\text{lp}/\text{mm})$	600
r'_0 / mm	1000	$\beta / (^\circ)$	86.0221, 85.3800, 84.7412
R_0 / mm	3430.98		

表2 XUV 摄谱仪参量优化结果

Table 2 Parameters optimized of XUV spectrograph

System parameters	ρ_1 / mm	R_2 / mm	ρ_2 / mm	r_c / mm	r_d / mm	$\delta / (^\circ)$
Initial searching range	10~137	500~8691	10~4105	0~131071	0~131071	-46~90
Results of this paper	53.23	2346.07	81.36	∞	50.53	80.239
Results of the reference [9]	42.74	2057.29	235.07	70.38	62.17	9.905

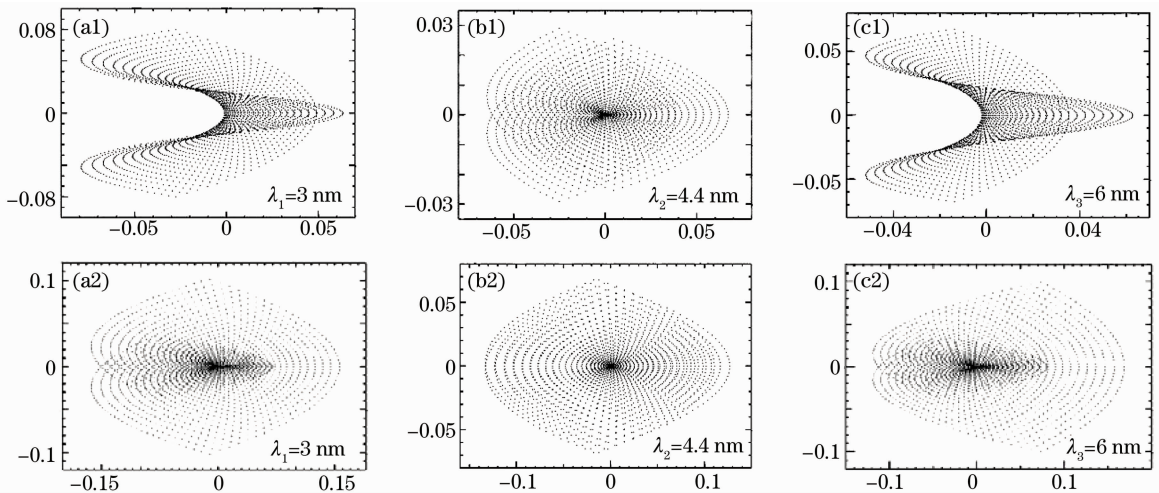


图5 XUV 摄谱仪系统的光线追迹点列图分布。(a1)、(b1)、(c1)为本文中优化结果;

(a2)、(b2)、(c2)为文献[8]中的优化结果

Fig. 5 Ray tracing results of XUV spectrograph. (a1), (b1) and (c1) are from this paper;

(a2), (b2) and (c2) are from the reference [8]

5 讨 论

1) 将吕丽军的像差理论应用于 M. Koike 定义的评价函数, 提供了一种优化 XUV 多元件光学系统的方法, 实现在基本确定光学系统结构和满足一定约束条件下, 对相关光学参量进化优化设计。根据图5中的计算结果, 应用本文发表的评价函数的优化设计, 其像面上的像差分布在子午(色散)和弧

应用光线追迹程序 Shadow, 针对两组参数的优化结果, 对摄谱仪系统做光线追迹数值模拟。计算的工作波长分别为 3, 4, 4 和 6 nm, 其它参数由表1和2给出, 其结果如图5所示。

矢方向都比文献[9]中的优化结果小了一倍, 提高了仪器的光谱分辨率和光束强度。

2) 应用遗传算法解决多参量优化问题是有效的; 但要注意其收敛问题, 常采用的判据为连续几次得到的最优参量值没有变化或变化很小^[9]。另外, 在得到结果后, 必须应用光线追迹手段, 对光学系统进行精确的成像计算。如果性能和预期的不一致或

不能满足设计要求,应该调整算法中的相关参量,进行多次优化计算。

6 结 论

研究表明,利用本文介绍的方法得到的光学系统的成像性能,比文献[9]中的结果要好。光线在 x 和 y 方向上产生的像差分别减小近 1 倍。另外,通过改变权重因子 μ 的值,评价函数能调整 x 和 y 方向成像质量的相对重要性,而后者所应用的评价函数^[9]却不能。所以,本文发展的评价函数在 XUV 多元件光栅光学系统优化设计中是十分有效。

参 考 文 献

- 1 H. Noda, T. Nomioka, M. Seya. Geometric theory of the grating [J]. *Opt. Soc. Am.*, 1974, **64**(8): 1031~1036
- 2 T. Nomioka, M. Koike, D. Content. Geometric theory of the ellipsoidal grating [J]. *Appl. Opt.*, 1994, **33**(31): 7261~7274
- 3 M. Koike, T. Namioka. Merit function for the design of grating instruments [J]. *Appl. Opt.*, 1994, **33**(10): 2048~2056
- 4 M. Koike, Y. Ueno, T. Namioka. Application of the hybrid design method to VUV double-element optical systems equipped with holographic gratings recorded with aspheric wave fronts [J]. *SPIE*, 1997, **3150**: 31~39
- 5 L. J. Lu. Aberration theory of plane-symmetric grating systems [J]. *Synchrotron Rad.*, 2008, **15**(4): 399~410
- 6 L. J. Lu, D. L. Lin. Aberrations of plane-symmetric multi-element optical systems [J]. *Opt. Int. J. Light Electron. Opt.*, 2009(in press)
- 7 L. J. Lu, Z. Y. Deng. Geometric characteristics of aberrations of plane-symmetric optical systems [J]. *Appl. Opt.*, 2009, **48**(36): 6946~6960
- 8 B. Lai, F. Cerrina. SHADOW: A synchrotron radiation tracing program [J]. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, 1986, **246**(2): 337~342
- 9 M. P. Chrisp. X-ray spectrograph designs [J]. *Appl. Opt.*, 1983, **22**(10): 1519~1529
- 10 Liu Guohua, Bao Hong, Li Wenchao. A genetic algorithm in MATLAB [J]. *Computer applied research*, 2001, **18**(08): 80~82
- 11 刘国华, 包 宏, 李文超. 用 MATLAB 实现遗传算法程序 [J]. *计算机应用研究*, 2001, **18**(08): 80~82
- 12 Gong Dunwei, Sun Xiaoyan. The theory and application of co-evolution genetic algorithm [M]. Beijing: Science Press, 2009. 6~12
- 13 巩敦卫, 孙晓燕. 协同进化遗传算法理论及应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2009, 6~12
- 14 Lü Lijun. Study of ultraviolet and soft X-ray varied-line-space plane grating monochromator [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(1): 141~144
- 15 吕丽军. 极紫外、软 X 射线变线距平面光栅单色仪的研究 [J]. *光学学报*, 2005, **25**(1): 141~144
- 16 Zhao Jinsong, Li Lifeng, Wu Zhenhua. In-Situ self-monitoring of latent image in fabrication of holographic gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(6): 851~858
- 17 赵劲松, 李立峰, 吴振华. 全息光栅制作中的实时潜像自监测技术 [J]. *光学学报*, 2004, **24**(6): 851~858
- 18 Zhao Jinsong, Li Lifeng, Wu Zhenhua. Modeling of in-situ monitoring curves during development of holographic gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(8): 1146~1150
- 19 赵劲松, 李立峰, 吴振华. 全息光栅实时显影监测曲线的理论模拟 [J]. *光学学报*, 2004, **24**(8): 1146~1150
- 20 Tang Bin, Tao Shiquan, Yan Xingchang *et al.*. Study on signal-to-noise ratio of retrieved from volume holographic memories [J]. *Chinese J. Lasers*, 1999, **A26**(3): 273~278
- 21 唐 斌, 陶世荃, 杨兴昌 等. 体全息存储图像的信噪比研究 [J]. *中国激光*, 1999, **A26**(3): 273~278
- 22 Wang Zihua. An improved Rouard's method for grating analysis [J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, **21**(5): 605~608
- 23 王子华. 计算光栅的一个改进的 Rouard 方法 [J]. *光学学报*, 2001, **21**(5): 605~608