

光学多层薄膜反向工程中局部优化算法的性能分析

吴素勇 龙兴武 杨开勇 黄 云

(国防科学技术大学光电科学与工程学院光电工程系, 湖南 长沙 410073)

摘要 以锗基红外宽带增透膜(AR)为例,基于 Matlab 最优化工具箱,研究了多种局部优化算法在多层膜设计中的性能和反向工程算法开发中的可行性,并就数值实验中出现多解性问题的成因、分析及解决方案进行了探讨。结果表明,Matlab 最优化工具箱中的导数算法在多层膜局部优化设计上具有更好的局部极值搜索性能和收敛速度;非导数算法性能较差且收敛时间较长,但具有更多的搜索路径,较适用于设计初期开拓搜索方向。在多层膜反演中,导数算法中的非线性最小二乘估计指令 lsqnonlin 和非线性方程求解指令 fsolve 的性能出色,建议作为多层膜反向工程问题的主要算法。无约束优化指令 fminunc 性能次之,约束优化指令 fmincon 再次之,可作为备用反演算法。而多目标优化指令 fminimax 和其余非导数算法由于算法的性能不足和自身内在多解性的原因,不利于多层膜的反演,容易得到错误的结果,不建议作为反演算法使用,仅可作为可选算法以供对比参考。

关键词 薄膜光学;反向工程;局部优化算法;多解性;多层膜系设计

中图分类号 O484.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0631001

Performance Analysis of Local Optimization Algorithm in Reverse Engineering of Multilayer Optical Coatings

Wu Suyong Long Xingwu Yang Kaiyong Huang Yun

(Department of Optoelectronic Engineering, College of Optoelectronic Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China)

Abstract An infrared antireflection (AR) coating for germanium is taken as an example to numerically analyze the performance of the local optimization algorithm which is based on Matlab optimization toolbox in the local optimal design of multilayer optical coatings and their application feasibility in the algorithm development of reverse engineering of multilayer optical coatings. The reasons and the solutions of the multiple solutions in numerical experiments are discussed. The numerical optimization results show that the derivative algorithms of Matlab optimization toolbox have better local optimum point search ability and converging speed than reference methods. While the performance of non-derivative algorithms is poor but might be applicable in the initial local design stage to explore more search directions. In the reverse engineering of multilayer optical coatings, the algorithm lsqnonlin and fsolve are excellent in inversion which determines the quality of optical structural parameters. They are recommended to be the main reverse engineering algorithms. The fminunc and fmincon algorithms can be chosen as supplementary reverse engineering algorithms for their acceptable reverse determination effectiveness. The fminimax and other non-derivative algorithms are poor in effectiveness and stochastic in final solutions, which can easily converge to wrong structural parameters and could not be used as reverse engineering algorithms.

Key words thin film optics; reverse engineering; local optimization algorithm; multiple solutions; multilayer optical coating design

OCIS codes 310.5956; 310.1210; 310.6805; 310.6805

1 引 言

自从采用数值优化方法进行光学薄膜设计的第

一个计算机程序开发出来^[1],已经过去了半个多世纪。伴随着商业膜系设计优化软件在过去几十年的

收稿日期: 2010-12-20; **收到修改稿日期**: 2011-01-25

作者简介: 吴素勇(1984—),男,博士研究生,主要从事光学薄膜方面的研究。E-mail: sywu2001@163.com

导师简介: 龙兴武(1958—),男,教授,博士生导师,主要从事激光与光电子技术等方面的研究。

E-mail: xwlong110@sina.com

巨大发展,近年来薄膜设计团体的研究主要集中在反向工程算法和虚拟镀膜模拟的开发上^[2~6]。不论是反向工程还是虚拟镀膜,其核心问题都可归结为已知初始膜系(即理论设计膜系)下偏差函数的最优化问题,其中局部优化方法的性能和实施效果对最终结果的质量起了关键作用。然而,由于表征多层膜测量光谱与理论计算光谱差别的偏差函数的多元多峰性,加上不同局部优化方法的搜索方式上的差异,实际反演中常会出现多解的情形,这对分析和选择最终的真实膜层参数带来了困难。为了能更清楚地认识镀膜过程中膜层参数误差分布的规律,指导镀膜工艺的改善,必须寻找到效果良好的反演结果,因此有必要深入分析局部优化方法在解决给定初始膜系下的最优化问题时的性能,如搜索能力、多解性、跳出局部极值的可能性,约束条件的影响及其施加策略等。本文以一个锗基红外宽带增透膜^[7,8]的设计实验为研究对象,横向研究比较基于 Matlab 最优化工具箱的多种局部优化算法其他算法在指定初始膜系下的局部优化能力,并就数值实验中出现的多解性问题的原因及解决办法进行了探讨,最后以人为扰动后膜系的理论计算光谱作为薄膜的真实光谱数据进行反演计算来分析和验证不同局部优化算法的能力。

2 数值实验

为了比较评价不同局部优化方法在膜系设计中的性能,P. Baumeister 于 1988 年邀请 9 位光学薄膜专家一同参加一项设计竞赛实验^[7],其设计目标为设计锗基上 7.7~12.3 μm 红外波段的宽带增透膜,可用膜材料为锗($n=4.2$)和硫化锌($n=2.2$),不考虑色散和吸收,从空气中正入射。为了统一,评价函数 F 采用均方根容差型函数形式:

$$F = \left\{ \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left[\frac{R(\lambda_i) - \hat{R}(\lambda_i)}{\Delta R_i} \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

式中 $R(\lambda_i)$, $\hat{R}(\lambda_i)$ 和 ΔR_i 分别为波点 λ_i 处的理论计算反射率、目标反射率和精度要求, L 为总波点数。在实验中,采用均匀投点划分波段,波点间隔为 0.1 μm ,波点数为 47,目标反射率为 0,精度为 1%。在该实验中,设计者被邀请进行 3 种不同的计算。1) 采用给定的标准初始膜系来测试不同优化程序的能力;2) 可自主选择初始膜系来测试最终解对初始膜系的依赖关系;3) 建议设计者采用全局优化方法或其他技术设计出尽可能最好的数值解,膜层数不限,厚度为正即可。前 2 种计算要求结果具有实际

意义,亦即膜层数不应太大且超薄膜应予以删除。将该实验为实验 1,其思路由 J. A. Dobrowolski 等^[8]进行推广,并对膜系设计中使用的主要局部优化方法做出了相当优秀的评述和比较。

基于文献^[7,8]中比较局部优化方法性能的成功思路,仿照设计实验,在相同设计目标和标准初始膜系下进行优化设计,所用的局部优化方法是 Matlab 最优化工具箱中的各种算法,包括无约束优化指令中的 `fminunc` (quasi-Newton methods), `fminsearch` (Nelder-Mead simplex algorithm), 非线性方程求解指令 `fsolve` (Levenberg-Marquardt algorithm) 以及非线性最小二乘估计指令 `lsqnonlin` (trust-region-reflective or LM algorithm), 约束优化指令中的 `fmincon` (active-set algorithm or interior-point approach), 多目标优化指令 `fminimax`, 模式搜索指令 `patternsearch` (generalized pattern search or mesh adaptive search algorithm), 模拟退火算法指令 `simulannealbnd` 等指令,以探索其在解决这一类问题的性能及其与采用其他方法得到结果的优劣程度进行比较,并对由此应用于多层膜反演算法开发的可行性进行评价。

一般地,在优化过程中可能会出现负厚度层或超薄膜的情况,为了确保所得结果具有实际意义,采用的解决方法是删除负厚度层或超薄膜,同时将折射率相同(或极相近)的膜层进行人为合并。这种情况本质上是一种弱约束条件,并不要求优化过程中所有维的变量同时为正,而允许在优化中降维,同时从镀膜的角度来看,更少层数的膜系更有利于批量生产和降低成本。另一方面,从解的数学最优性上考虑,如果最优解趋向于降维解,那么对所有膜层施加非负的强约束时得到的解必定在那些降维处非常接近于零值。

实验 2 是为前述实验得到的一个 12 层的理论设计红外增透膜的膜层结构参数的反演实验。从数学上看,多层膜的结构参数反演是已知初始值(理论设计)的偏差函数的最小化问题,这与膜系设计非常相似,区别在于设计目标变为得到膜系的实测光谱数据。但从物理的角度来看,反演问题还涉及到不同工艺下多层膜的微结构,膜系光谱计算理论模型修正以及实测光谱数据的误差处理等。

假设按所给的理论设计膜系实际镀膜,镀完膜用分光光度计(或光谱仪等)扫描其光谱曲线,实测光谱可能是宽带光谱,也可能是单波长宽角度光谱。分光光度计(或光谱仪等)得到的扫描光谱除了实际

薄膜的真实光谱外,还包括分光光度计(或光谱仪等)的本底噪声和光谱测量过程中的随机误差。1)实际薄膜的真实光谱,与用实际薄膜结构参数理论计算的光谱可能存在差异。其原因是,实际薄膜可能不完全符合膜系光谱理论计算模型的前提假设,即各项同性均匀膜系统假设,这主要是由镀膜工艺造成的。其中最重要的3个影响因素是折射率不均匀性^[9,10](体多孔性)、表面粗糙度^[11,12]和折射率色散模型。不恰当地选择光谱理论计算模型,往往会造成膜系反演结果较大地偏离实际情况,甚至不具物理意义。2)扫描光谱中的典型本底噪声来自光源和光谱记录设备的不稳定性,典型的随机误差来自测量系统的噪声和环境中的杂散光影响。一般地,扫描光谱中的本底噪声可以通过仪器校准和标定等硬件操作减小^[13],也可能通过选择恰当的光谱范围或入射角范围进行数据筛选,将扫描光谱系统误差对膜系反演的影响降低^[14]。而扫描光谱中的光谱测量随机误差对膜系反演的影响,也可通过数据处理予以降低,一种可行的方法是人为注入随机噪声以抵消其影响,再利用统计平均将影响大幅降低^[14]。

由于镀膜过程中膜层厚度监控会产生误差,实际镀制的薄膜厚度往往会偏离理论设计值,且由于可能存在的色散效应和镀膜工艺的差异,膜层材料的实际折射率也可能偏离理论值。设理论设计膜系的几何厚度及折射率向量(从基底起至入射介质)分别为 $\mathbf{d}_0, \mathbf{n}_0$,镀膜过程中各膜层结构参数的误差向量分别为 $\Delta\mathbf{d}, \Delta\mathbf{n}$,则薄膜镀完后真实的几何厚度和折射率向量分别为 $\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}_0 + \Delta\mathbf{d}, \mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_0 + \Delta\mathbf{n}$ 。薄膜反向工程,就是根据分光光度计(或光谱仪等)得到的扫描光谱,通过降低其本底噪声和随机误差的影响,剥离出薄膜的真实光谱,然后选择合理的膜系计算物理模型,以理论设计膜系结构 $\mathbf{d}_0, \mathbf{n}_0$ 为初值,运用基于偏差函数最小化的最优化方法,反向确定已镀薄膜的实际结构参数 $\mathbf{d}_1, \mathbf{n}_1$,进而得到镀膜过程中的误差分布情况 $\Delta\mathbf{d} = \mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_0, \Delta\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_0$,以用于调整监控信号或改进镀膜工艺。实验的重点是局部优化算法在理想条件下的极限性能,因此作以下简化处理 1)不考虑体不均匀性和表面粗糙度,即各项均匀膜系假设成立;2)实测光谱不存在误差,即用扰动后的膜系理论计算值做实际膜系的真实光谱;3)折射率不存在误差,也不考虑色散,只考虑膜层几何厚度误差。

具体实施时,需要在 Matlab 中编写专门的光谱

系数理论计算和评价函数程序^[15]。优化过程中,部分算法还可能会需要光谱系数的导数及二阶 Hesse 矩阵的信息,这可以用有限差分近似或采用梯度和 Hesse 矩阵的解析计算模型来实现严格计算^[16,17]。以自制的基于 Matlab 的膜系设计和分析软件为基础,运用 Matlab 最化工具箱,对上述实验进行了大量数值计算。

3 结果及讨论

表 1 给出了实验 1 中所给锗基红外宽带增透膜在标准初始膜系 I 下不同局部优化方法(A~L3)最终优化解的膜层结构参数,其中 nt 为各层的光学厚度,对应的反射率及其折射率轮廓图由图 1 和 2 给出。其中,标准初始膜系 I 取自文献[7],膜系 F,G 和 H 是文献[7]中最好的前三个代表性设计,列此以作横向比较。从图 1 和表 1 数据可以看出,最化工具箱中基于导数的算法 fminunc、fsolve、lsqnonlin、fmincon 和 fminimax 都搜索到同一个 12 层最优解,解的质量优于文献[7]中 F. Goldstein 用单纯形法,P. Baumeister 用梯度法和 D. Custafson 用阻尼最小二乘法(DLS)所得的膜系,而彼此折射率轮廓具有较明显的相似度,且最外 5 层几乎一样。这一方面验证 Matlab 中的上述导数算法的有效性,且对比之下其性能更甚一筹,搜索到更好的极小值点。另一方面,Matlab 中的上述不同导数算法都收敛到同一个局部极小值点,从侧面说明该极小值点是给定标准初始膜系附近的最小值点。

从图 2 和表 1 数据可以看出,最化工具箱中非导数算法 fminsearch、patternsearch 和 simulannealbnd 都出现了明显的多解性,解的质量较导数算法有优有劣,单纯形指令 fminsearch 和模式搜索指令 patternsearch 搜索能力较优,模拟退火较差,而其共性是搜索在后期变得很慢导致优化至收敛的时间较长。这种多解性的出现,一方面侧面反映了膜系评价函数的多峰性,另一方面也说明了非导数算法具有一定程度的随机性和跳出局部极值的能力,有可能在参数空间发生了大的变化导致搜索朝更多的方向进行。从膜系设计的角度来讲,这种算法本身的多重搜索特性导致的多解性是较有利的,可以为镀膜工程师挑选更适合实际的可用镀膜环境的理论设计进行生产。考虑到该类算法后期搜索效率低的特性,该类算法适合于设计初期进行优化,以开拓更多搜索方向,末期还是应辅以导数算法来加速收敛过程,节省设计总时间。而从反向工程

的角度来看,这种算法本身的随机性或多解性是较有害的,会给真实膜系结构参数的确定带来更多的困扰和疑惑。

在数值实验的初期,假定将另一种膜厚约束处理方式自动引入优化程序中,即允许算法优化过程中出现非正厚度,直至一定代数再进行非正厚度膜层删除合并处理。这时出现了一个令人意外的情况,即导数算法也产生了可以重复出现的多种设计结果,解的质量也不优于非正厚度膜层即时删除处

理的理解。经过对优化过程中删除合并操作前后膜系结构的仔细对比发现,这种多解性正是膜系非正厚度膜层删除位置不同造成的,这种删除操作在参数空间中发生了大的跳跃,从而导致算法收敛点呈现较明显的区别,往往同时删除临近的非正厚度膜层会产生更差的解。因此,即时删除非正厚度膜层的约束处理方式,对导数算法优化得到的设计膜系的唯一性和质量都是更有利、更可取的。

表 1 标准初始膜系下不同局部优化方法所得红外增透膜解的结构参数

Table 1 Structural parameters of infrared AR solutions by different methods from the standard design initial

Optimization algorithm		I starting design	A fminunc	B fsolve	C lsqnonlin	D fmincon	E fminimax	F simplex	G gradient	H DLS
Layer	<i>n</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>
air	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
1	2.2	2.7975	2.8423	2.8421	2.8423	2.8423	2.8423	2.8327	2.8500	2.8525
2	4.2	1.3875	1.1905	1.1906	1.1905	1.1905	1.1905	1.1704	1.1825	1.1775
3	2.2	6.0125	5.7162	5.7157	5.7162	5.7162	5.7162	5.7109	5.7250	5.7500
4	4.2	0.5825	0.9131	0.9131	0.9131	0.9131	0.9131	0.8829	0.9025	0.8950
5	2.2	4.3250	5.3586	5.3575	5.3586	5.3586	5.3586	5.4334	5.3450	5.5000
6	4.2	0.1450	2.7182	2.7141	2.7182	2.7182	2.7182	1.6761	2.8675	2.1200
7	2.2	1.1000	0.4813	0.4807	0.4813	0.4813	0.4813	0.6342	0.4275	0.6650
8	4.2	0.3050	1.1293	1.1241	1.1293	1.1293	1.1293	0.8723	1.0925	1.1275
9	2.2	1.6450	2.8044	2.8374	2.8045	2.8045	2.8045	4.1323	3.1150	3.1900
10	4.2	0.3050	0.6937	0.6893	0.6937	0.6937	0.6937	5.0790	0.6125	0.6275
11	2.2	1.1000	0.7783	0.7740	0.7783	0.7783	0.7783	1.2174	0.8250	0.8225
12	4.2	0.1450	3.8767	3.8630	3.8766	3.8766	3.8766	1.1320		
13	2.2	1.1000						0.7831		
14	4.2	0.7675								
15	2.2	0.7150								
16	4.2	0.7675								
17	2.2	0.7300								
18	4.2	0.7825								
19	2.2	0.7300								
20	4.2	0.7675								
21	2.2	0.7150								
Substrate	4	—	—	—	—	—	—	—	—	—
$\sum(nt) / \mu\text{m}$		26.9250	28.5025	28.5017	28.5025	28.5025	28.5025	31.5567	24.9450	24.7275
<i>F</i>		10.631	1.346	1.346	1.346	1.346	1.346	1.3498	1.3592	1.3764
Optimization algorithm		J1	J2	J3	K1	K2	K3	L1	L2	L3
		fminsearch			patternsearch			simulannealbnd		
Layer	<i>n</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>
air	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
1	2.2	2.8423	2.7989	2.8504	2.8002	2.8201	2.8479	2.9032	2.8580	2.9059
2	4.2	1.1905	1.2757	1.1812	1.2674	1.2444	1.1865	1.1117	1.1594	1.1121
3	2.2	5.7162	5.6289	5.7346	5.6311	5.6718	5.7297	5.8638	5.8065	5.9481
4	4.2	0.9131	1.0096	0.9037	1.0075	0.9705	0.9085	0.8003	0.8303	0.7440
5	2.2	5.3586	5.2480	5.3992	5.2978	5.2719	5.3774	5.8895	5.7816	6.0856

Optimization algorithm	J1	J2	J3	K1	K2	K3	L1	L2	L3	
	fminsearch			patternsearch			simulannealbnd			
6	4.2	2.7182	2.6804	2.6499	2.6486	2.6334	2.7447	1.2940	1.4048	1.0277
7	2.2	0.4813	0.5597	0.4939	0.7389	0.4491	0.4648	1.3372	1.1578	1.5446
8	4.2	1.1293	0.7131	1.1983	0.8401	0.8286	1.1627	0.7416	0.7223	0.5208
9	2.2	2.8045	3.5144	2.7329	2.6297	3.7659	2.8843	2.8860	3.4217	4.3287
10	4.2	0.6937	5.0428	0.7274	1.6860	4.7287	0.6389	0.8151	0.6650	0.5043
11	2.2	0.7783	1.3942	0.8355	0.1756	5.3543	0.8711	0.7343	0.7779	1.6166
12	4.2	3.8766	1.0411	9.7559	2.5755	1.0514			1.1961	1.2267
13	2.2		0.8504		4.5717	0.5733			0.2899	0.67345
14	4.2				0.7418				1.8908	
15	2.2				0.4242				0.2101	
Substrate	4	—	—	—	—	—	—	—	—	—
$\Sigma(nt) / \mu\text{m}$		28.5025	31.7571	34.4630	33.0360	35.3634	24.8165	24.3766	28.1720	28.2396
F		1.346	1.1277	1.3193	1.1075	1.1821	1.3562	1.5325	1.5017	1.7504

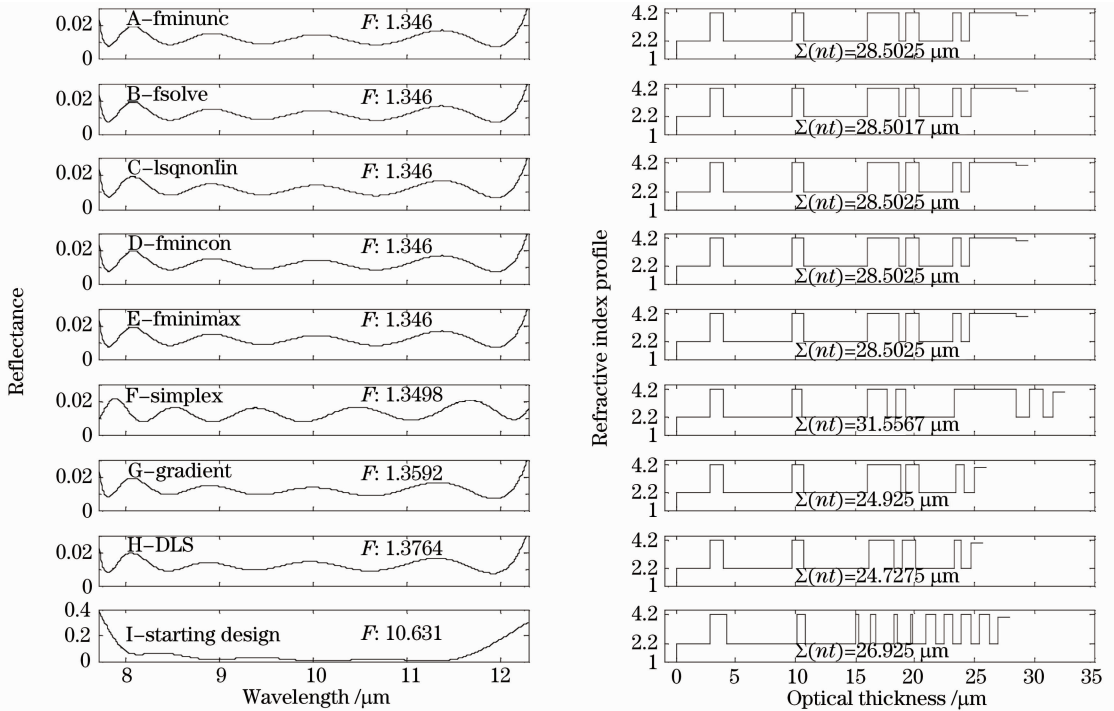


图 1 标准初始膜系下导数优化方法得到的红外-增透膜光谱反射率和折射率轮廓

Fig. 1 Spectral reflectance and refractive index profiles of infrared antireflection coatings obtained with derivative-optimization algorithms from the standard initial design

实验 2 以实验 1 导数算法收敛到的 12 层结构为对象来调查不同局部优化方法在膜系反向工程中的性能。为了突出局部优化方法在膜系反演中的性能,假设镀膜过程中所有膜层厚度镀制后都增厚了 5%,即真实膜层厚度向量为理论设计的 1.05 倍,且设该增透膜的实测反射率光谱不存在误差,即用真实膜系结构参数下的理论计算光谱作为待反演增透膜的真实反射率光谱来进行反演计算。通过比较不同局部优化方法所得的膜系结构与扰动后的理论设

计接近程度的差别,可以比较其有效性。衡量算法有效性的另一个间接指标是偏差评价函数值,其中精度 ΔR_i 反映了光谱记录设备的反射率测量水平,统一设为 0.1%。当偏差评价函数值小于 1 时,其物理意义为反演得到的膜系的光谱均方根反射率与膜系的真实光谱的偏差小于光谱测量仪器的极限水平。由于光谱测量设备误差的影响,如果实测光谱数据直接用作反演计算中的目标光谱,那偏差评价函数值小于 1 以下的反演优化就变得缺乏物理实际

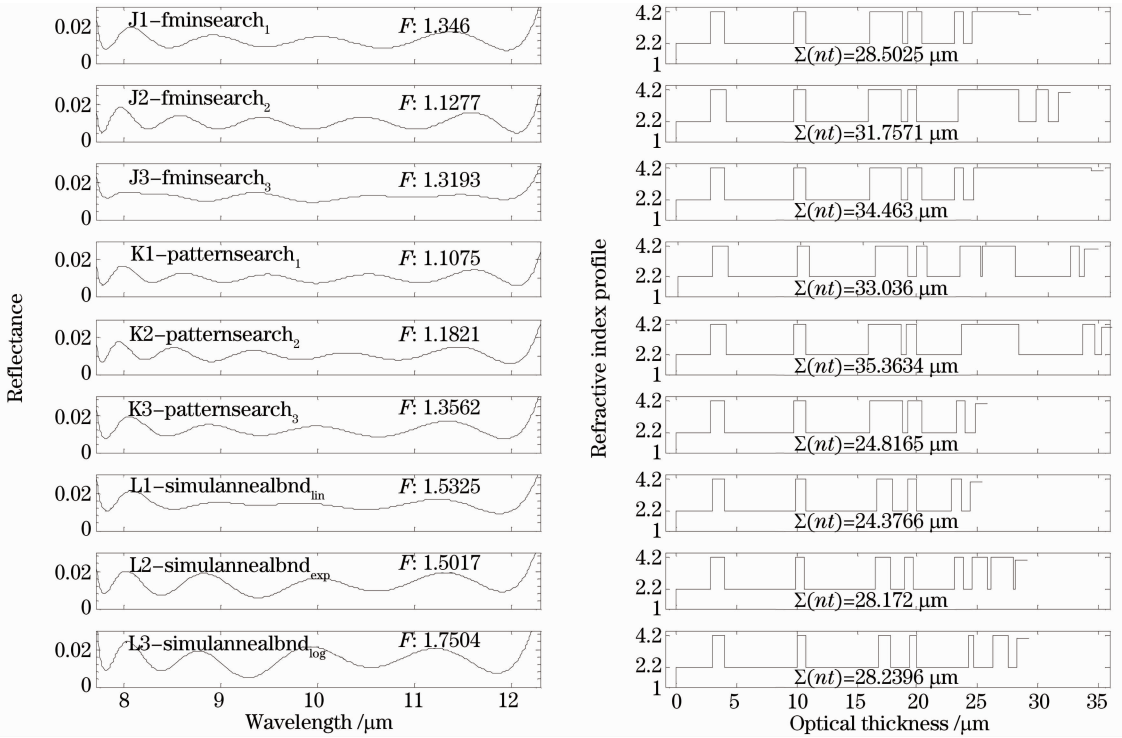


图 2 标准初始膜系下非导数优化方法得到的红外增透膜的光谱反射率和折射率轮廓

Fig. 2 Spectral reflectance and refractive-index profiles of infrared antireflection coatings obtained with non-derivative-optimization algorithms from the standard initial design

表 2 不同局部优化方法反演所得红外增透膜解的结构参数

Table 2 Structural parameters of infrared AR solutions reverse-determined by different local optimization algorithms

Optimization algorithm	I design	J real	A fminunc	B fsolve	C lsq-nonlin	D fmin-con	E fmini-max	F fmin-search	G pattern-search	H simulannealrnd	
Layer	<i>n</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	<i>nt</i>	
air	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
1	2.2	2.8423	2.9844	2.9844	2.9844	2.9844	2.8881	2.9862	2.9844	2.8031	
2	4.2	1.1905	1.2500	1.2500	1.2500	1.2499	1.2535	1.2452	1.2500	1.3789	
3	2.2	5.7162	6.0020	6.0020	6.0020	6.0018	5.8746	6.0102	6.0020	5.7511	
4	4.2	0.9131	0.9587	0.9587	0.9587	0.9583	1.0265	0.9480	0.9589	1.0750	
5	2.2	5.3586	5.6265	5.6261	5.6265	5.6174	5.5526	5.6374	5.6281	5.5261	
6	4.2	2.7182	2.8541	2.8573	2.8541	2.8541	2.9325	3.0085	2.7604	2.8343	
7	2.2	0.4813	0.5053	0.5048	0.5053	0.4938	0.5625	0.4619	0.5077	0.7121	
8	4.2	1.1293	1.1858	1.1856	1.1858	1.1817	0.9792	1.1969	1.1857	0.9572	
9	2.2	2.8044	2.9446	2.9416	2.9446	2.8622	3.3390	3.6541	2.9628	2.8813	
10	4.2	0.6937	0.7284	0.7289	0.7284	0.7422	0.8482	0.6540	0.7259	0.9420	
11	2.2	0.7783	0.8172	0.8174	0.8172	0.8222	0.6721	0.8370	0.8154	0.5987	
12	4.2	3.8767	4.0705	4.0707	4.0705	4.0773	3.2280	0.8135	4.0656	3.7905	
Substrate	4	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
$\Sigma(nt) / \mu\text{m}$		28.5025	29.9276	29.9275	29.9276	29.9276	29.9235	29.2328	27.2049	29.9259	29.2502
<i>F</i>		106.71	0	0.0002	0	0	0.0035	0.7349	0.2297	0.0039	4.8273

意义。只有对实测光谱数据进行数据筛选或误差处理后,反演偏差评价函数值越小,才表示反演得到的膜系越接近真实的膜层结构。

表 2 和图 3 给出了用 Matlab 最优化工具箱中各局部优化算法反演得到的膜系结构数据和光谱反射率及折射率轮廓与真实解对比情况。其中,I 为

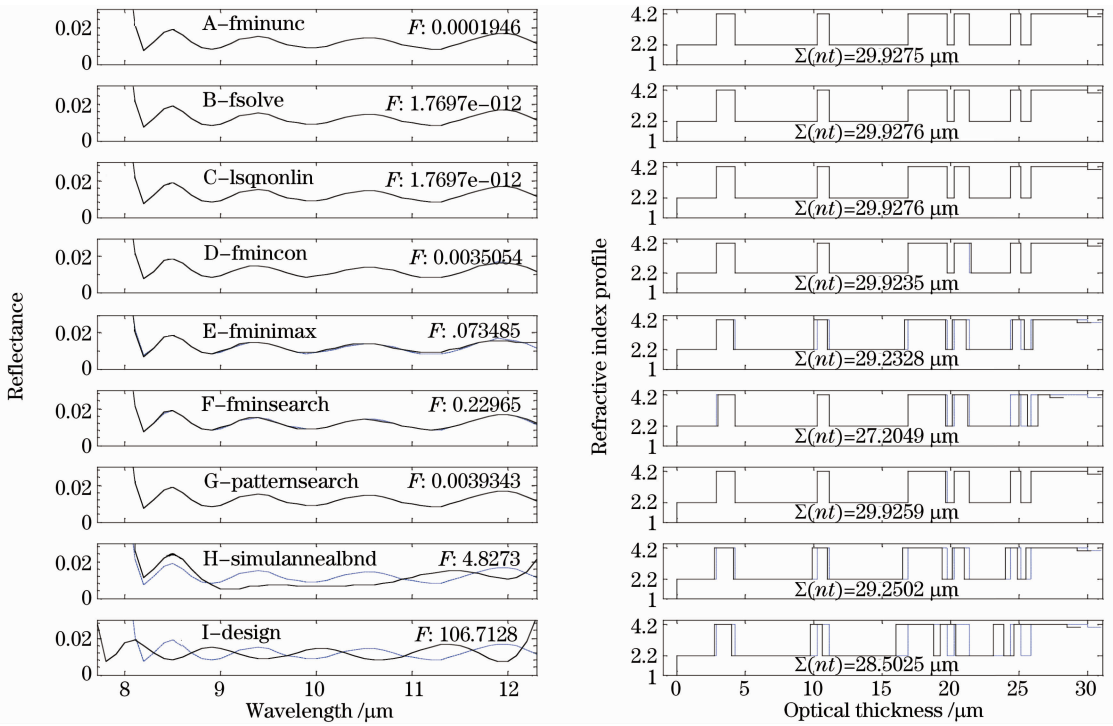


图3 不同局部优化方法反演所得红外增透膜与真实解(点线)的光谱反射率及其折射率轮廓的比较
 Fig. 3 Comparisons of spectral reflectance and refractive-index profile of the real infrared antireflection coating (dotted line) with the reverse-determined solutions by different local optimization algorithms

实验1得到的最优理论设计解, J为按理论设计镀制的膜的数值模拟真实结构, 其厚度向量值为I结构的1.05倍, A~H分别为最优化工具箱中上述各局部优化算法以理论设计I为初值, 以模拟真实膜J的理论光谱为反演逼近光谱得到的数值解, F~H为非导数算法多个解中的最优情况。从表2的数据和图3的对比图可以看出, Matlab最优化工具箱中各局部优化算法在多层膜结构反演中性能开始出现明显差别, 其中以非线性方程求解指令fsolve和非线性最小二乘估计指令lsqnonlin的性能最佳, 得到与模拟真实膜一样的反演解, 无约束优化指令fminunc也以很高的精度非常接近真实解, 约束优化指令fmincon和模式搜索指令patternsearch的最优解稍次之, 但都可接受。而多目标优化指令fminimax、无约束优化指令fminsearch和模拟退火指令simulannealbnd的反演解与真实解相比出现显著偏差, 特别是在靠近基底的膜层偏差已超出误差范围, 可认为反演失效。

除了折射率轮廓图的直观比较, 为了确保所得反演解能较好地接近真实解, 间接判据偏差评价函数F必须足够小, 而不仅仅小于单位1就可以, 这主要是多层膜偏差评价函数的极多峰性造成反演算法容易过早收敛到其他局部极值点。这一多层膜反

演数值计算上的特性, 使得当光谱测量数据中的误差存在时, 挑选反演结果时要注意满足偏差评价数值足够小这一内在约束要求。一般地, 偏差函数值应低于单位1至少1个数量级。尽管上面提到的偏差评价函数小于单位1的优化缺乏实际的物理意义, 但偏差评价函数数学上的多元多峰性内在要求其值足够小, 这对于确保反演解的可靠性和数学上的唯一性十分重要。不理解这一点, 极有可能挑选一个错误的反演解作为多层膜的真实结构, 夸大了镀膜过程中的误差, 而不符合实际镀膜过程。

从实验1和2可以看出, Matlab最优化工具箱在处理多层膜设计局部优化和反向工程两类问题上的确很有效。比较已发表的其他结果^[7,8], 其中的导数算法在设计上具有更好的局部极值搜索性能, 非导数算法具有更多的搜索路径, 有利于得到一系列设计解, 供镀膜工程师挑选最符合自身镀膜环境的实际最优解进行镀膜。在多层膜反演中, 导数算法中以非线性最小二乘估计指令lsqnonlin和非线性方程求解指令fsolve的性能最佳, 建议作为多层膜反向工程问题的主要算法。无约束优化指令fminunc性能次之, 约束优化指令fmincon再次之, 可作为备用反演算法。而多目标优化指令fminimax和其余非导数算法由于算法的性能和多

解性的原因,不利于多层膜的反演,容易得到错误的结果,不建议作为反演算法使用,仅可以作为可选算法以供对比参考。而其中多解性的产生主要有3个成因,分别是算法本身的内在随机性、膜厚约束处理的施加方式和评价函数的极多峰性。通过选择性能好的算法作为主要反演算法,采用恰当的膜厚约束施加方式,同时数学上内在要求偏差评价函数足够小以删除次峰,从而确保反演解准确地逼近待反演膜的真实结构参数。

4 结 论

以锗基红外宽带增透膜为例,基于 Matlab 最优化工具箱,研究了多种局部优化算法在多层膜设计局部优化中的性能和反向工程算法开发中的可行性,并就数值实验中出现多解性问题的成因、分析及解决方案进行了探讨。结果表明,Matlab 最优化工具箱中的导数算法在多层膜局部优化设计上具有更好的局部极值搜索性能和收敛速度,非导数算法性能较差且收敛时间较长,但具有更多的搜索路径,较适用于设计初期开拓搜索方向,有利于得到一系列设计解。在多层膜反演中,导数算法中的非线性最小二乘估计指令 `lsqnonlin` 和非线性方程求解指令 `fsolve` 的性能出色,建议作为多层膜反向工程问题的主要算法。无约束优化指令 `fminunc` 性能次之,约束优化指令 `fmincon` 再次之,可作为备用反演算法。而多目标优化指令 `fminimax` 和其余非导数算法由于算法的性能不足和自身内在多解性的原因,不利于多层膜的反演,易得到错误的结果,不建议作为反演算法使用,仅可作为可选算法以供对比参考。多层膜反向工程内部核心算法的科学开发,可望在多层膜镀制误差分析和工艺改进中发挥重要作用。

参 考 文 献

- 1 P. Baumeister. Design of multilayer filters by successive approximations[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1958, **48**(12): 955~958
- 2 N. Kaiser, C. J. Stolz. Optical Society of America's 2007 Topical Meeting on Optical Interference Coatings; overview[J]. *Appl. Opt.*, 2008, **47**(13): OIC1~OIC7
- 3 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. On-line characterization and reoptimization of optical coatings[C]. *SPIE*, 2004, **5250**: 406~413
- 4 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. Computational manufacturing as a bridge between design and production[J]. *Appl. Opt.*, 2005, **44**(32): 6877~6884
- 5 A. V. Tikhonravov. Virtual deposition plant[C]. *SPIE*, 2005, **5870**: 0D1~0D13
- 6 K. Fiedrich, S. Wilbrandt, O. Stenzel *et al.*. Computational manufacturing of optical interference coatings; method, simulation results, and comparison with experiment[J]. *Appl. Opt.*, 2010, **49**(16): 3150~3162
- 7 J. A. Aguilera, J. Aguilera, P. Baumeister *et al.*. Antireflection coatings for germanium IR optics; a comparison of numerical design methods[J]. *Appl. Opt.*, 1988, **27**(14): 2832~2840
- 8 J. A. Dobrowolski, R. A. Kemp. Refinement of optical multilayer systems with different optimization procedures[J]. *Appl. Opt.*, 1990, **29**(19): 2876~2893
- 9 J. P. Borgogno, P. Bousquet, E. Pelletier. Automatic determination of optical constants of inhomogeneous thin films[J]. *Appl. Opt.*, 1982, **21**(22): 4020~4029
- 10 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, B. T. Sullivan *et al.*. Influence of small inhomogeneities on the spectral characteristics of single thin films[J]. *Appl. Opt.*, 1997, **36**(28): 7188~7198
- 11 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, A. A. Tikhonravov *et al.*. Effects of interface roughness on the spectral properties of thin films and multilayers[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(25): 5140~5148
- 12 C. K. Carniglia, D. G. Jensen. Single-layer model for surface roughness[J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(16): 3167~3171
- 13 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, M. A. Kokarev *et al.*. Effect of systematic errors in spectral photometric data on the accuracy of determination of optical parameters of dielectric thin films[J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(13): 2555~2560
- 14 Wu Suyong, Long Xingwu, Huang Yun *et al.*. Methods for decreasing optical parameters reverse determination uncertainty of thin films caused by spectral measurement errors[J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(8): 2171~2177
吴素勇, 龙兴武, 黄云等. 减小由光谱测量数据误差造成的薄膜光学参数反演不确定度的方法[J]. *中国激光*, 2009, **36**(8): 2171~2177
- 15 Wu Suyong. Application of genetic algorithm in the design of optical coatings[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2007. 22~32
吴素勇. 遗传算法在膜系设计中的应用[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2007. 22~32
- 16 Wu Suyong, Long Xingwu, Huang Yun *et al.*. Calculation model for spectral coefficient's first and second order partial derivatives of multilayer optical coatings with respect to layer parameters[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2010, **22**(1): 83~90
吴素勇, 龙兴武, 黄云等. 膜系光谱系数对膜系数参数的一阶和二阶偏导数的计算模型[J]. *强激光与粒子束*, 2010, **22**(1): 83~90
- 17 Wu Suyong, Long Xingwu, Yang Kaiyong. Accurate calculation and Matlab based fast realization of merit function's Hesse matrix for the design of multilayer optical coating[J]. *Optoelectronics Letters*, 2009, **5**(5): 359~363