

基于聚类全局优化算法的薄膜设计优化技术的研究

李资政^{1,2} 杨海贵¹ 王笑夷¹ 王彤彤¹ 申振峰¹ 高劲松¹

¹中国科学院长春光学精密机械与物理研究所光学技术中心中国科学院光学系统先进制造技术重点实验室, 吉林 长春 130033

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 基于聚类全局优化算法提出了一种新的薄膜设计优化方法,它可以迭代地改变初始膜系结构,相比传统的局域优化技术,能够计算得更加全面、彻底。即使初始膜系和设计目标差距非常大,这种聚类全局优化方法依然能够优化出很好的结果,克服了传统局域优化方法的缺点。利用可见到红外宽波段增透膜的实例证实了聚类全局优化方法在处理薄膜设计问题上的能力与优势。

关键词 薄膜;膜系设计优化;聚类算法;全局优化算法

中图分类号 O484

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0931001

Investigations of Thin Film Design and Optimization Based on Clustering and Global Optimization Algorithm

Li Zizheng^{1,2} Yang Haigui¹ Wang Xiaoyi¹ Wang Tongtong¹ Shen Zhenfeng¹ Gao Jinsong¹

¹Key Laboratory of Optical System Advanced Manufacturing Technology, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract A new thin film design and optimization method based on clustering and global optimization algorithms is presented, which can iteratively change the initial structure. The design solution is calculated more thoroughly by this new design method than the traditional local optimization technique. When initial film structure is far from the design target, this kind of clustering global optimization method has the unique advantage that a satisfied consequence can still be obtained. A practical thin film design task which is a broadband antireflection coating from the visible light to short-wave infrared is used to testify the ability and superiority of the clustering global optimization method.

Key words thin films; thin film design and optimization; clustering algorithm; global optimization algorithm

OCIS codes 310.1210; 310.4165; 310.5696; 310.6805

1 引言

1958年, Baumeister^[1]首先提出了利用计算机解决薄膜优化问题,自此人们在薄膜设计工作中开发出了许多优化技术。这些技术主要可以分作两类,即提纯方法和合成方法^[2]。提纯方法需要一个初始设计作为最开始的解决方法,并将预期得到的设计目标和那些已完成优化的设计之间的差距定义为一个价值函数,最后尽可能令这个价值函数最小化来不断完善设计方案。通常初始设计膜层的光学厚度和最后优化完的结果都相关地近似,所以选择一个正确有效的初始设计膜系至关重要。并且薄膜设计问题是高度非线性的,所以需要慎重地选择优化技术,针对不同的薄膜问题有时选择的优化技术也各不相同^[3]。

收稿日期: 2015-04-09; 收到修改稿日期: 2015-05-12

基金项目: 国家自然科学基金(61306125)、吉林省科技发展计划(Y3453UM130, Y4703UJ140)、吉林省留学人员科技创新创业项目(Y3293UM130)、长春光机所领域前沿创新项目(Y3CX1SS143)

作者简介: 李资政(1987—),男,博士研究生,主要从事光学薄膜技术和薄膜理论计算方面的研究。

E-mail: lizizheng87@163.com

导师简介: 高劲松(1968—),男,博士,研究员,主要从事光学薄膜技术和隐身材料方面的研究。E-mail: gaojs@ciomp.ac.cn

1990年,Dobrowolski等^[4]详细阐明了当前主流优化技术的潜力,并通过3个薄膜优化问题来对比分析了10种不同提纯近似方法的效率和能力。薄膜系统自动合成的基本原则最先也是由Dobrowolski等^[5]提出的。他利用该类型的提纯近似方法,在不需要初始设计的前提下,成功得到了一个多层膜优化设计的解决方案。目前,一种最常用的优化技术,即“针法”优化技术^[6-7],它对初始膜系的依赖也并不强烈,可以通过添加膜层和优化结构来得到需要的设计目标,但对于很多设计要求较高的薄膜问题,其计算结果并不彻底。此外,还有一些新颖的薄膜优化技术如flip-flop膜层合并方法^[8]、step方法^[9]和傅里叶变换技术^[10],它们可以统称为交替合并优化方法。但是,当优化目标是使价值函数达到绝对最小值或者设计要求更加复杂严格时,操作者的判断影响和干涉将不可避免,操作者选择的初始膜系结构将严重影响设计优化结果。

本文中提到的非线性聚类优化方法最初在1982年由Boender等^[11]提出,之后Csendes等^[12-13]逐渐将其完善。这种随机方法被证实为解决黑盒子优化问题^[14]最有效的方法之一;它在解决很多领域的实际问题方面具有极高效率,如工业应用问题^[15]、气候控制问题^[16]和废水处理过程设计问题^[17]等。但是迄今为止尚没有人将此方法应用于薄膜领域。

本文详细描述了一种在薄膜优化中使用的基于聚类全局优化算法的薄膜设计优化技术。聚类全局优化方法是一种特殊类型的变量随机搜索方法^[18]。从一个可能和最后结果差距特别大的初始膜系开始或者仅给出合理膜厚范围内的任意初始组合,应用拟牛顿算法在许多与初始膜系临近的相异的设计中进行筛选,对其膜系参数不断改进。不断重复这个过程直到价值函数的值达到最小,进而得到相应的最终结果。接着分析了聚类全局优化算法在薄膜优化设计上的应用,最后利用了一个实际薄膜设计问题,即可见到近红外宽波段增透膜的设计和制备,验证了聚类全局优化方法的特点和优势。

2 利用聚类全局优化算法处理薄膜设计优化问题

全局优化近似主要用于解决 N 维问题,可以分为两类:确定性的和随机性的。前者会在整个解空间进行彻底搜索。但是随着问题维度 N 的增长计算时间会以指数趋势上升,使其对几乎所有的普通薄膜设计问题难以适用。后者随机性方法会从几个随机点开始,开始点的个数越多找到全局最小值的可能性就更大,同时计算时间也会增长。

本文设计的优化算法的目标是找到获得所有局部的最小值和全局最小值时的价值函数。为实现上述目的,先要选择恰当的初始点,再进行一个局域搜索过程,即基于DFP修正公式的二次拟牛顿算法过程^[19]。拟牛顿算法可以给出海赛逆矩阵的最佳近似,被广泛认为是解决非束缚性问题的首选。DFP修正公式在构造海赛逆矩阵的同时,能够得到集合中数值梯度结合的趋势。这种方法的一个重要优势是可以正确地选择初始点。该算法的目标是识别在局域优化过程进行时所有点的集合中具有相同最小值定义的需要特别关注的区域,这个步骤就叫做聚类过程。1982年,Boender等^[11]详细阐述了集群的结构和原理,集群就是聚类算法最显著的特征。集群的建立过程中,随着样品变大,得到一个未发现的局域最小值的概率逐渐趋于零。如果一个开始点被识别其属于一个集群,该处的优化过程将立刻停止。

聚类全局优化算法可以被概括为如图1中的全部流程。因为局域搜索后在之前计算的局域最小值附近选择了新的初始点开始一个新的进程,所以局域过程得到的解决方案可能超出开始的范围。尽管算法没有达到彻底的全局优化,但由于这个特点其仍可以归为全局优化过程。

该算法的应用需要仔细调整一些参数:

- 1) 网格密度即 m/p 经常调整在 $10^2 \sim 10^4$ 之间;
- 2) N 维空间边界距离取决于优化问题的复杂程度。如果初始间距比较小,通常很难得到另一个极小值。对于一个给定的网格密度(m/p),初始边界间距会导致考察点之间的距离变大,在这样的条件下,算法可能无法得到精确的极小值。当使用者对于程序具有一定程度的经验时会做出一些折中的改动。当变量数目非常大的时候(通常大于15)必须这么做。而当变量小于15个的时候怎样都会得到所有的极小值。通常初始膜系的最薄和最厚膜层的光学厚度设置在 $\lambda/10 \sim \lambda/2$ 内,具体取决于设计要求的复杂性。

当使用聚类全局优化方法处理薄膜优化问题时,必须给定初始膜系设计包括固定的层数和使用薄膜材料的折射率。每一层需要给出初始光学厚度,在之后的优化过程中会逐渐改进。

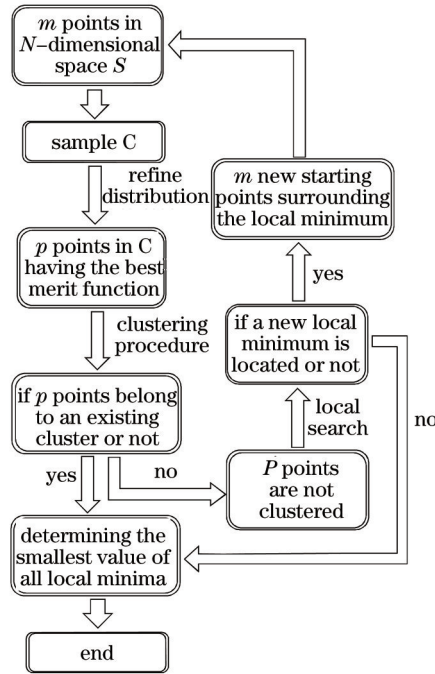


图 1 聚类全局优化算法流程图

Fig.1 Clustering and global optimization algorithm flow diagram

给定的初始膜系的光谱特性由一个 2×2 的特征矩阵 M 计算^[20]

$$M = \prod_{j=1}^{N_{\text{layers}}} V_j = \begin{pmatrix} M_{11} & iM_{12} \\ iM_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

式中每个膜层都可有其特征矩阵表征

$$V = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \frac{i}{n_j} \sin \varphi \\ in_j \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (2)$$

式中 n_j 为第 j 层的折射率, 相应的物理厚度为 $\varphi = 2\pi n_j t_j / \lambda$ 。若已知矩阵 M 即可计算出反射率 R

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & iM_{12} \\ iM_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ n_{\text{sub}} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$r = (n_{\text{inc}} B - C) / (n_{\text{inc}} B + C), \quad (4)$$

$$R = r^* r. \quad (5)$$

在不考虑材料吸收的条件下, 透射率和反射率存在关系

$$T + R = 1. \quad (6)$$

在膜系优化过程中, 通常用价值函数来衡量优化的程度。价值函数指多种光学特征(OP, x , 通常为一系列给定入射角和波长范围的反射率 R 或透射率 T) 的计算值与目标值的差距, 即

$$M_F(d_1, \dots, d_n) = \left[\frac{1}{N_{\text{data}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{data}}} \left[\frac{x_i^{\text{tar}} - x_i^{\text{cal}}}{\Delta_i} \right]^2 \right]^{1/2}, \quad (7)$$

式中 M_F 为价值函数, N_{data} 为需要考虑的因素数量, Δ_i 为第 i 个参数的允差, x_i^{tar} 为第 i 个光学特征的目标值, x_i^{cal} 为第 i 个光学特征的计算值, d_j 为 n 层膜堆中第 j 层的膜厚。(7)式中定义的 M_F 为非约束的薄膜优化问题较为简洁的数学表达。但是如果设计者想要将一些膜层厚度约束在一个固定范围内, M_F 需要加入该限定条件。

在薄膜优化问题中, 初始膜系的选择起着决定性的作用。膜系优化问题中会有许多局部极小值, 局部解决办法的效率强烈依赖于初始膜系的能力。相反, 聚类全局优化方法能够通过反复改进局部优化的作用

范围来修改整体初始膜系。如果没有明确的初始设计,将膜层的初始光学厚度设置在零到半波长之间,后者必须位于设计目标光谱范围内。

3 实验结果与讨论

利用自行编辑的基于 Matlab 的聚类全局优化方法计算程序,计算设计了一个正常入射角度下可见到近红外(500~3000 nm)的宽波段增透膜。这种宽波段增透膜在太阳能电池、高能激光窗口、滤光器件等方面具有极高的应用价值。设计目标是在波长 500 nm~3 μm 计算出满意光谱的增透膜。准备采用的基底和膜系材料的折射率为: $n_s = 1.52$ 、 $n_1 = 1.4$ 和 $n_h = 2.2$ 。这里 M_F 可以定义为百分比透射率的均方根值

$$M_F(d_1, \dots, d_n) = 100 \left[\frac{1}{N_{\text{data}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{data}}} (1 - T_i)^2(\lambda_i) \right]^{1/2}, \quad (8)$$

式中 n 为膜层层数, T_i 为波长 λ_i 处计算出的透射率, λ_i 在 500 nm~3 μm 内线性分布, $N_{\text{data}} = 251$, d_j 为 n 层膜系中第 j 层的厚度。

迄今为止,研究者们还没有报道过可见到近红外宽波段增透膜较为有效的成型膜系,所以当利用聚类全局优化算法处理该问题时,首先的工作就是定义初始膜层层数和膜层厚度。膜厚的选择可以不是很严格,由于聚类全局优化可以不断地改进初始空间 S , 因此即使预期的最终设计结果与初始膜系差异较大,其仍具有找到合理的足够小的峰值。根据实际镀膜经验和工艺条件,将每层膜厚范围设定在 10~500 nm。扫描点的数量 m 设定为 10000, 选择点的数量 p 设定为 50。

利用自行编辑的基于 Matlab 的聚类全局优化算法薄膜设计优化程序,计算了 500~3000 nm 波段增透膜。将膜层层数逐渐增加到 16 层时,程序得到膜系结果如图 2 所示,其 $M_F = 2.2$, 膜系物理总厚度为 992.46 nm。当膜层层数为 18 层时,得到图 3 中这个令人满意的结果,其 $M_F = 1.41$, 膜系物理总厚度为 1104.13 nm。随着膜系厚度的增加,聚类全局优化程序计算的膜系 M_F 越小,膜系光谱特性也更好,但是膜层层数的增加,膜厚的增大都会给镀膜工艺带来更多的不稳定因素和难度。在这个实际膜系设计过程中,在没有给定明确的初始膜系结构的条件下,聚类全局优化方法可以得到不同膜层层数的多个结果,研究者可以针对不同的实验条件和镀膜工艺手段,从中选择一个厚度合适,膜系结构恰当的结果作为最终选择。不仅如此,对于一个给定膜层层数,聚类全局优化方法还可以给出 M_F 不同的多种方案,这也是其提高设计结果选择性的优势和特点。由此也可以证明,聚类全局优化的一个最显著的能力就是从一个局域最小值跳跃到另一个,进而得到比一个普通优化程

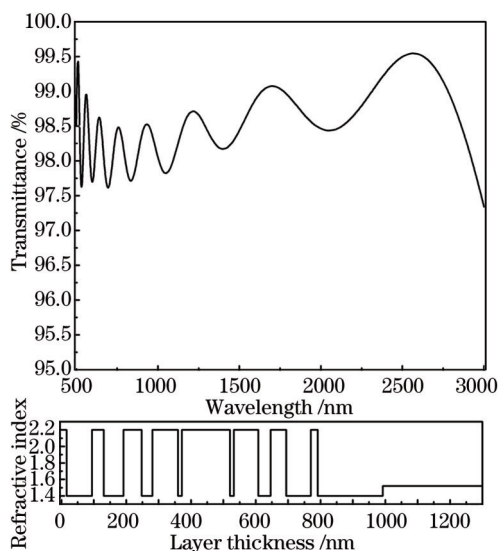


图2 利用自行编辑的聚类全局优化算法薄膜计算程序得到的 16 层宽波段增透膜膜系与光谱

Fig.2 Coating of 16 layers and its spectrum calculated by the clustering and global optimization calculation program

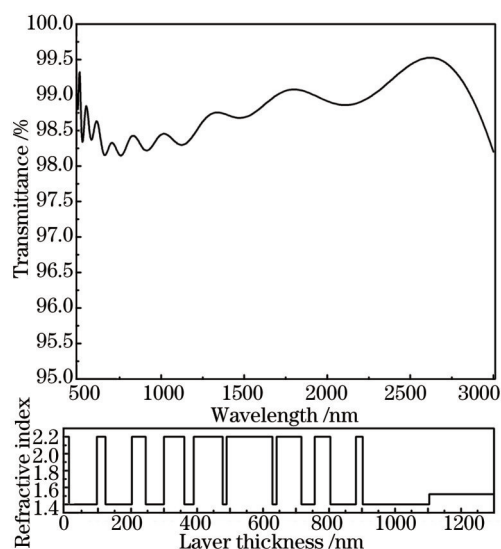


图3 利用自行编辑的聚类全局优化算法薄膜计算程序得到的 18 层宽波段增透膜膜系与光谱

Fig.3 Coating of 18 layers and its spectrum calculated by the clustering and global optimization calculation program

序更多的解决方案。

最后,采用离子辅助电子束沉积技术在透明玻璃基底的单面蒸镀了18层增透膜。利用PerkinElmer公司的Lambda1100型分光光度计测量了所镀膜系波长500~3000 nm的光谱曲线,如图4所示,设计曲线没有将实际基底吸收计算进去,但能看出基片单面镀膜的测量结果与设计膜系结果的光谱大致吻合,测量结果满足设计目标和实际需要。

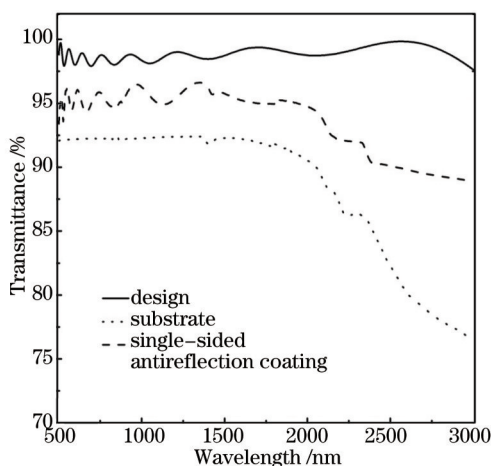


图4 制备的18层增透膜、设计膜系、基片的光谱曲线

Fig.4 Spectra curve of the prepared coating of 18 layers, the design coating and substrate.

4 结 论

聚类全局优化不仅仅是一种优化方法,它还利用了一个可以改变初始膜系结构的随机性过程来寻找薄膜设计问题的解决方案,使得最后计算的膜系结构和厚度分布与初始设计有很大的差别。聚类全局优化方法最大的优势就在于它能使膜系优化不再受初始膜系结构的局限,这也是传统的薄膜设计优化技术用于解决薄膜问题尤其是较复杂的薄膜结构设计的最大的限制。在整个聚类全局优化过程中,迭代计算次数越多,程序运算时间也相应增大,但是得到的优化结果会更令人满意。当给定膜系层数和折射率,聚类全局优化方法通常会给出不只一个解决方案,可以通过衡量膜厚、光谱指标、工艺因素、镀膜成本、实用环境因素等从中选择一个合适的最终膜系优化结果。在未来工作中,将在尽量缩减计算时间、优化过程可以增添新材料膜层等方面继续改进聚类全局优化方法。

参 考 文 献

- 1 Baumeister P. Design of multilayer filters by successive approximations[J]. J Opt Soc Am, 1958, 48(12): 955-957.
- 2 Dobrowolski J A. Numerical methods for optical thin films[J]. Opt Photon News, 1997, 8(6): 24-33.
- 3 Frankena H J. Fast computation method for derivatives of multilayer stack reflectance[J]. Appl Opt, 1978, 17(4): 538-541.
- 4 Dobrowolski J A, Kemp R A. Refinement of optical multilayer systems with different optimization procedures[J]. Appl Opt, 1990, 29(19): 2876-2893.
- 5 Dobrowolski J A. Automatic refinement of optical multilayer assemblies[J]. J Opt Soc Am, 1961, 51: 1475.
- 6 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(28): 5493-5508.
- 7 Tikhonravov A V, Trubetskov M K. Modern design tools and a new paradigm in optical coating design[J]. Appl Opt, 2012, 51(30): 7319-7332.
- 8 Southwell W H. Flip-flop coating synthesis revisited[J]. Appl Opt, 2014, 53(4): 179-185.
- 9 Larouche S, Martinu L. Step method: A new synthesis method for the design of optical filters with intermediate refractive indices[J]. Appl Opt, 2008, 47(24): 4321-4330.
- 10 Verly P G. Fourier transform technique with refinement in the frequency domain for the synthesis of optical thin films[J]. Appl Opt, 1996, 35(25): 5148-5154.

- 11 Boender C G E, Rinnooy K A H G, Timmer G T, *et al.*. A stochastic method for global optimization[J]. Math Program, 1982, 22(1): 125–140.
- 12 Csendes T. Nonlinear parameter estimation by global optimization—efficiency and reliability[J]. Acta Cybernetica, 1989, 8(4): 361–370.
- 13 Csendes T, Pál L, Sendin J O H, *et al.*. The global optimization method revisited[J]. Optim Lett, 2008, 2(4): 445–454.
- 14 Mongeau M, Karsenty H, Rouzé V, *et al.*. Comparison of public-domain software for black-box global optimization[J]. Optim Methods Softw, 2000, 13(3): 203–226.
- 15 Banga J R, Moles C G, Alonso A A. Global Optimization of Bioprocesses Using Stochastic and Hybrid methods[M]. Floudas C A, Pardalos P M, eds., US: Frontiers in Global Optimization, Nonconvex Optimization and its Applications, 2004: 45–70.
- 16 Moles C G, Banga J R, Keller K. Solving nonconvex climate control problems: Pitfalls and algorithm performances[J]. Appl Soft Comput, 2004, 5(1): 35–44.
- 17 Moles C G, Gutierrez G, Alonso A A, *et al.*. Integrated process design and control via global optimization—a wastewater treatment plant case study[J]. Chem Eng Res Des, 2003, 81(5): 507–517.
- 18 Hendrix K, Oliver J. Optical interference coatings design contest 2010: Solar absorber and Fabry–Perot etalon[J]. Appl Opt, 2011, 50(9): C286–C300.
- 19 Davidon W C. Variable metric method for minimization[J]. SIAM J Optim, 1991, 1(1): 1–17.
- 20 Macleod H A. Thin-Film Optical Filters[M]. New York : CRC Press, 2012: 595–625.

栏目编辑: 张浩佳