

文章编号: 1002-2082(2008)04-0542-06

基于遗传算法的减反射膜的优化设计

吴素勇, 龙兴武

(国防科技大学 光电科学与工程学院光电工程系, 湖南 长沙 410073)

摘要: 为了研究膜系设计领域内的全局性优化方法, 提出了基于遗传算法的膜系设计方法。编制了用遗传算法进行膜系设计的通用程序, 并在各种类型的减反射膜设计中取得了成功。结果表明: 基于遗传算法得到的减反射膜具有与近期发表的膜系结果相一致或更好的光谱性能和全局性。同时, 在设计膜系时, 不需要给定初始膜系, 可以设定膜层厚度边界和膜层数, 这对于设计和镀制有现实意义的光学薄膜极为有利, 并且只要改变目标反射率就能推广到其他膜系的设计中, 具有良好的可移植性。

关键词: 薄膜; 膜系设计; 遗传算法; 减反射膜

中图分类号: TN305.8; O484.4

文献标志码: A

Optimal design of antireflective films based on genetic algorithms

WU Su-yong, LONG Xing-wu

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

Abstract: A film design method based on genetic algorithms was proposed and the genetic algorithms for the design of film system were programmed in order to research the global optimization methods of the optical film system design. It was applied to the optimal design of various kinds of antireflective films. The results show that the antireflective films obtained by genetic algorithms are better than or equal to those published previously in spectral characteristics and overall performance. The optimal coating design with genetic algorithms can set the thickness limit and the number of layers without providing any initial film system. All the features are very favorable in both design and deposition of films. Furthermore, the method can be easily applied to the design of other optical coatings by changing the target reflectance values.

Key words: thin film; design of film system; genetic algorithm; antireflection coating

引言

膜系设计的任务是找到满足给定光谱性质要求的最佳膜系结构及其参数。以膜系结构为参数的评价函数是一个复杂的多峰函数。膜系优化设计的过程实际上是评价函数的极小化过程。经验表明: 当膜层数较小(不超过6~8层)时, 传统的梯度法

等最优化方法能够在一定的计算时间内找到一个较好的可靠解, 但当膜层数增多时, 找到最小值的概率和速度急剧下降, 往往陷于局部极小值而停止优化。20世纪80年代初发展起来的Needle法在一定程度上克服了这一困难, 并在大量膜系的设计中取得了令人满意的解, 不仅包括正入射和斜入射的

情形,还包括对膜系的能量和相位性质都有要求的情形^[1]。尽管如此,Needle 法理论上仍不能保证求得膜系设计的最优解,仍是一种局部优化方法,在全局寻优能力上略显不足^[2]。遗传算法(genetic algorithms, GA)是一种基于自然选择和遗传变异等生物进化机制的全局性概率搜索方法,对许多传统方法难以解决的问题是非常有效的。在所求解的问题为非连续、多峰以及有噪声的情况下,遗传算法能够以很大的概率收敛到最优解或满意解,具有较好的全局寻优能力^[3]。本文把遗传算法引入减反射膜的优化设计中,探讨遗传算法在减反射膜设计中的应用价值,尽可能地使优化趋向于全局最优解,从而得到满足给定光谱特性要求的全局最佳膜系结构。

1 膜系设计理论及遗传算法的实现

膜系设计理论的基础是光学多层膜系统的光谱系数计算,关键是评价函数的选取和构造以及算法的设计。一般采用特征矩阵法来计算多层膜系统的光谱系数^[4]。评价函数的选取和构造取决于待设计的薄膜类型和精度要求。实际设计经验表明,评价函数选取和构造的好坏对于膜系设计的成功与否和效率高低起了关键作用。目前,在膜系设计领域,常用的评价函数有面积型、平方型、容差型和最大偏差型几种。如果要考虑偏振性质,需分偏振构造相应的评价函数。本质上来讲,面积型和平方型都是容差型的特例。容差型评价函数的形式如下:

$$F = \left[\frac{1}{L} \sum_{\lambda} \left| \frac{R(\lambda) - \hat{R}(\lambda)}{\Delta_{\lambda}} \right|^p \right]^{1/p} \quad (1)$$

式中:容差 Δ_{λ} 表示波长 λ 处容许的反射率偏差; L 是设计波段选取的波点数; p 为不小于 1 的整数。当取 $p=1$ 时,容差型转化为面积型;当取 $p=2$ 时,容差型转化为平方型。但是,容差型评价函数比平方型评价函数更具有灵活性,不仅给出了权重因子的具体形式,而且非常有利于分段设计,还能判别不同波段的精度区别。当取 $p=2$ 时,容差型评价函数在数值计算中也非常方便,这有利于计算机编程使用。最大偏差型评价函数形式见(2)式,这种评价函数能够得到目标反射率的平坦近似解,但由于其最优化求解相对复杂,而且不可微分,因此不适用于基于评价函数导数信息的设计方法。而遗传算法在搜索过程中使用的仅是评价函数的信息,不需要考虑评价函数的导数信息,因此对遗传算法看来是种优势。加之最大偏差型的评价函数只利用了整

个设计波段中的一个波长处的光谱信息,大量波长处的光谱信息没有充分利用起来,因此对于宽波段的膜系设计效率比较低,甚至得不到满意解。实际设计经验表明,这种评价函数只对部分窄波段膜(如单波长减反射膜)适用,而对于窄带滤光片则几乎完全失效。出于以上分析考虑,本文采用 $p=2$ 的容差型评价函数来设计减反射膜:

$$F = \max_{\lambda} |R(\lambda) - \hat{R}(\lambda)| \quad (2)$$

考虑现有镀膜工艺和成本,在用遗传算法实际设计膜系时,一般是在确定高、低 2 种折射率材料和膜层数后,对每一层的几何厚度进行优化^[5]。具体到程序设计时,只需要解决遗传编码和适应度函数的构造这 2 个问题。编码的对象是每一层膜的几何厚度,这里选择二进制格雷编码,编码的二进制位串的长度取决于膜厚的上下界和对膜厚的精度要求。为了避免因膜厚偏小不易镀制及膜厚偏大吸收损耗和成本的增加,并且为了使膜厚离散化程度减小,设计时编码的厚度上下界要合理选择。作为估算,一般选各层光学厚度为 $1/4$ (或 $1/2$) 的中心波长时的几何厚度作为中心来设置。由于遗传算法的优化方向是适应度函数的极大化方向,而膜系优化的方向是评价函数的极小化方向,因此适应度函数应当沿评价函数的相反方向进行构造。利用 MATLAB6.5 遗传算法工具箱 GATBX^[6-7],在设计膜系编程时需要编写判断膜系质量的评价函数,其他遗传算子都可以调用工具箱中的库函数^[8]。利用线性排序算子,根据评价函数对群体中的个体分配适应度,采用基于适应度的随机遍历抽样作为选择算子,使用交叉概率为 0.7 的单点交叉算子,变异使用缺省变异算子(变异概率为 $0.7/\text{Lind}$, Lind 为个体的二进制长度),采用基于适应度的重插入算子来实现群体种群恢复和精英选择。种群数和最大遗传代数的设定随膜层数和波点数及计算时间作相应的调整,通常,种群数越大越有利于提高算法的全局能力,但计算时间就会大大延长,一般情况下取种群数为 200。由于算法收敛条件以评价函数为主要依据,并且算法可以随时停止,故在计算时间允许的情况下最大遗传代数的设定可以尽量大一点,一般情况下取为 500。

2 减反射膜设计实例

2.1 单波长减反射膜设计

设计要求^[9]:在 $(632.8 \pm 7) \text{ nm}$ 的波长范围内

设计反射率小于0.01%的减反射膜,从空气中正入射,基底折射率为 $n_s=1.457$,可用材料折射率为 $n_H=2.125$ 和 $n_L=1.46$ 。

设计时为了保证带宽足够宽,将设计的波长范围调为620 nm~645 nm。在620 nm~645 nm的范围内,正入射目标反射率为0,精度为 10^{-4} 。为了突出中心波长632.8 nm处的精度要求,把波长范围分成3个波段:620 nm~625.8 nm,625.8 nm~639.8 nm,639.8 nm~645 nm。为了体现这一设计目的,一方面控制中间波段(632.8±7)nm处的允许偏差大小;另一方面通过相对地增大这一波段选取的波点数目来实现。为了与Needle法的结果[S 142.587H 124.547L 117.444H 74.727L A]^[9](其中数字为膜层的几何厚度,单位为nm,H和L分别代表高、低折射率层,S代表基底,A代表入射介质空气,下同)比较,把膜层数也设定为4层。根据减反射膜的基本理论,靠近外层入射介质的膜层一般为低折射率层,故膜层结构次序可设为[S H L H L A]。编码时对各膜层的几何厚度采用二进制编码,由于中心波长为632.8 nm,故限制膜厚搜索上下界分别为150 nm和50 nm。波点数的选取在620 nm~625.8 nm和639.8 nm~645 nm的波段内间隔设为0.1 nm,在625.8 nm~639.8 nm的波段内间隔设为0.05 nm,允许偏差对应设为 2×10^{-6} 和 10^{-6} 。运行遗传算法膜系设计程序后,得到的膜系结构为[S 144.330H 114.278L 119.941H 72.791L A],评价函数为 $F=2.2363$,小于针法结果^[9]的评价函数值 $F=4.8898$,光谱性质如图1所示。可以看出,遗传算法得到的减反射膜在设计波长的中心波段(632.8±7)nm的剩余反射率小于 3×10^{-6} ,完全满足了设计精度要求,并较针法结果的剩余反射

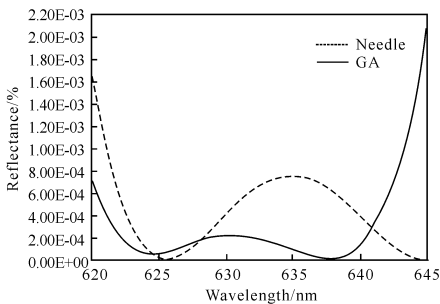


图1 针法和遗传算法得到的4层单波长减反射膜反射率

Fig. 1 Reflectance of 4-layer single wavelength antireflective film obtained with needle method and GA

率更小。

2.2 双波段减反射膜的设计

设计以BK-7玻璃为基底的可见光区(425 nm~650 nm)和1064 nm波长用双波段减反射膜,从空气中正入射,可用材料对为ZnS和MgF₂^[10]。

由于波段相隔较远,设计时应当考虑基底和膜材料折射率的色散,这里由Sellmeir型色散型方程来计算膜材料和基底的折射率,表达式为 $n^2=(A+B)/\lambda^2$,表1是引自参考文献[10]中的材料折射率色散数据。设计时波段分别选择425 nm~650 nm和1 014 nm~1 114 nm,折射率分别以532 nm和1 064 nm处的值为基准进行反射率计算,波点间隔分别为3 nm和2 nm,允许偏差均为0.1%,膜层数与参考文献[10]一致取为6层,膜层几何厚度搜索范围为5 nm~250 nm。运行遗传算法膜系设计程序后,得到的膜系结构为[S 17.077H 29.837L 153.508H 23.223L 30.994H 112.153L A],评价函数为 $F=1.4481$,光谱性质如图2和图3所示,其中 $R_{532nm}=0.0991\%$, $R_{1064nm}=0.0206\%$,比

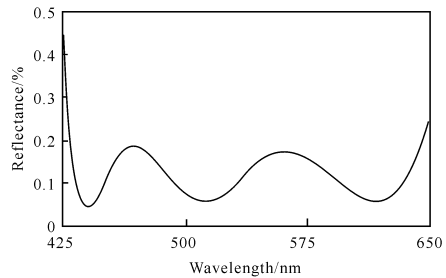


图2 6层双波段减反射膜在425 nm~650 nm的反射率

Fig. 2 Reflectance of 6-layer double-band antireflective film in spectral region of 425 nm~650 nm

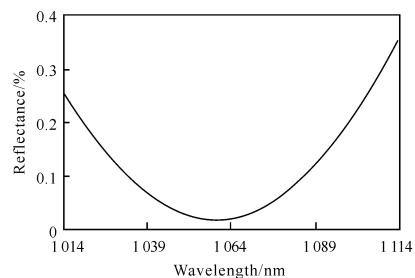


图3 6层双波段减反射膜在1 014 nm~1 114 nm的反射率

Fig. 3 Reflectance of 6-layer double-band antireflective film in spectral region of 1 014 nm~1 114 nm

参考文献[10]的剩余反射率略小。

表1 折射率色散

Table 1 Dispersion of refractive index

material	A	B/nm ²	$n_{532\text{nm}}$	$n_{1064\text{nm}}$
BK-7	2.2572	15190	1.520	1.507
MgF ₂	1.8976	15360	1.397	1.382
ZnS	4.74132	226730	2.354	2.223

2.3 三波段减反射膜设计

以石英玻璃为基底,在1 064 nm, 532 nm 和 355 nm 设计同时减反射的三倍频减反射膜,从空气中正入射,可用材料对为HfO₂ 和SiO₂[11]。

根据参考文献[11],设计三倍频减反射膜需要在设计方法、材料吸收和色散等方面予以较多地考虑,综合该文中的讨论分析结果,提出了上述设计目标,并在表2中给出了设计所用基底和膜材料对的折射率色散值。设计时分别以1 064 nm, 532 nm 和 355 nm 三波长为中心,带宽40 nm 的波段作为设计波段,基底和膜材料的折射率分别以各波段中心波长处的值为基准进行反射率计算,波点间隔都为1 nm,允许偏差都是0.1%,膜层数取为9层,膜层几何厚度搜索范围为5 nm~250 nm。运行遗传算法膜系设计程序后,得到的膜系结构为[S 160.487L 10.867H 32.633L 104.443H 123.081L 89.938H 151.285L 23.714H 80.463L A],评价函数 $F = 2.0667$,光谱性质如图4、图5和图6所示,其中 $R_{355\text{nm}} = 0.090\%$, $R_{532\text{nm}} = 0.014\%$, $R_{1064\text{nm}} = 0.090\%$,达

表2 折射率色散

Table 2 Dispersion of refractive index

material	$n_{355\text{nm}}$	$n_{532\text{nm}}$	$n_{1064\text{nm}}$
glass	1.477	1.460	1.449
HfO ₂	2.050	1.975	1.90
SiO ₂	1.490	1.470	1.46

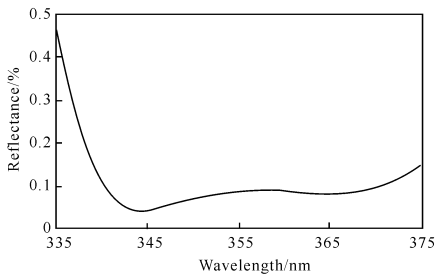


图4 9层三波段减反射膜在335 nm~375 nm 的反射率

Fig. 4 Reflectance of 9-layer three-band antireflective film in spectral region of 335 nm~375 nm

到了目前三倍频减反射膜的光谱指标[12]。

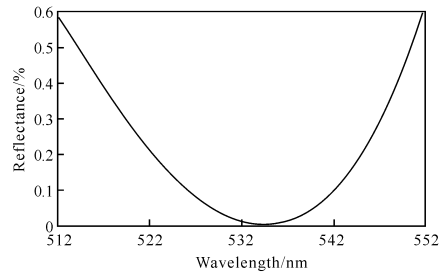


图5 9层三波段减反射膜在512 nm~552 nm 的反射率

Fig. 5 Reflectance of 9-layer three-band antireflective film in the spectral region of 512 nm~552 nm

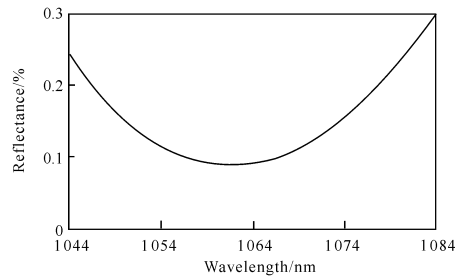


图6 9层三波段减反射膜在1 044 nm~1 084 nm 的反射率

Fig. 6 Reflectance of 9-layer three-band antireflective film in spectral region of 1 044 nm~1 084 nm

2.4 宽带减反射膜的设计

设计7 700 nm~12 300 nm 波长范围内的宽带减反射膜时,光从空气中正入射,基底GaAs 的折射率为 $n_s = 4$,可用材料对为Ge 和ZnS,对应折射率分别为 $n_H = 4.2$ 和 $n_L = 2.2$ [13]。

这是远红外波段的宽带减反射膜,设计时波点间隔取为100 nm,允许偏差为1%,膜层数取为17层,膜层几何厚度搜索范围为50 nm~1 500 nm。运行遗传算法膜系设计程序后,得到的膜系结构为[S 79.852L 1376.7H 628.9L 69.903H 1272.9L 700.68H 136.31L 316.68H 1148.4L 272.07H 211.63L 676.22H 1255.6L 102.96H 534.54L 603.26H 1086.2L A],评价函数为 $F = 0.6535$,平均剩余反射率为0.61625%,光谱性质如图7实线所示,其中虚线为参考文献[13]中的17层膜系结果,其评价函数值为 $F = 0.6542$,平均剩余反射率为0.61848%。从图中可以看出,所得膜系具有和参考文献[13]几乎一致的光谱性能。

2.5 超宽带减反射膜的设计

设计400 nm~1 200 nm 波长范围内的超宽带

减反射膜时,光从空气中正入射,基底折射率为 $n_s = 1.52$,可用材料折射率分别为 $n_H = 2.35$ 和 $n_L = 1.45$ ^[14]。

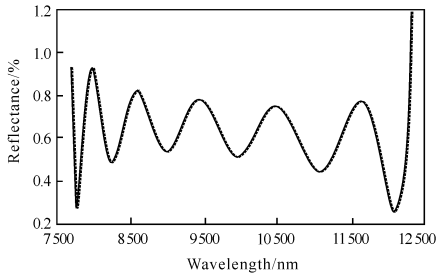


图7 20层宽带减反射膜在7 700 nm~12 300 nm的反射率

Fig.7 Reflectance of 20-layer wideband antireflective film in spectral region of 7 700 nm~12 300 nm

根据参考文献[14]的设计经验,在宽波段设计膜系时采用非均匀选取波点更有利于设计。具体实施时采用分波段均匀取点,在400 nm~500 nm范围取17点,500 nm~600 nm范围取13点,600 nm~700 nm范围取11点,700 nm~900 nm范围取18点,900 nm~1 200 nm范围取21点。允许偏差设为1%,膜层数取为24层,膜层几何厚度搜索范围为5 nm~250 nm。运行遗传算法膜系设计程序后,得到的膜系结构为[S 9.146H 55.429L 27.462H 27.381L 140.17H 10.644L 15.416H 31.768L 14.8H 152.35L 6.953H 59.196L 32.351H 16.977L 92.695H 27.076L 23.925H 233.2L 24.276H 27.914L 83.952H 17.611L 31.945H 112.58L A],评价函数为 $F = 0.6248$,平均剩余反射率为0.613%,光谱性质如图8实细线所示,其中虚线为参考文献[14]中的40层膜系结果,其评价函数值为 $F = 0.5686$,平均剩余反射率为0.563%。

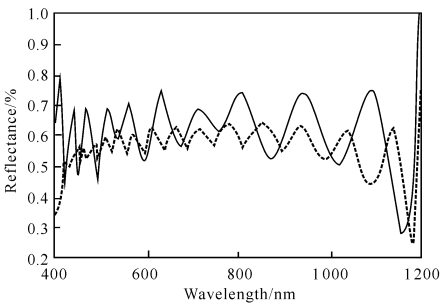


图8 400 nm~1 200 nm 超宽带减反射膜的反射率

Fig.8 Reflectance of broadband antireflective film in spectral region of 400 nm~1 200 nm

从图中可以看出,所得膜系具有与参考文献[14]相差不大的光谱性能。从实用角度来看,遗传算法得到的结果更具有现实意义,平均反射率虽然比参考文献[14]的结果大0.05%,但膜层数却减少了16层,而0.613%的剩余反射率对于大多数实际应用已经足够了。

3 结论

本文探讨了遗传算法在减反射膜优化设计领域的应用价值,并在单波长减反射膜、双波段减反射膜、三倍频减反射膜、宽带减反射膜和超宽带减反射膜的设计中取得了成功。结果表明,遗传算法得到的减反射膜具有与已发表的用其他方法(如等效法和针法)的设计结果相一致或更好的光谱性能和全局性。同时,在应用遗传算法进行膜系设计时,不需要给定初始膜系便可设定膜层厚度边界和膜层数,对于设计和镀制有现实意义的光学薄膜极为有利,并且只要改变目标反射率就能推广到其他膜系的设计中,具有良好的可移植性。

参考文献:

[1] FURMAN S A, TIKHONRAVOV A V. Basics of optics of multilayer systems[M]. Singapore: Fong & Sons Printers Pte. Ltd., 1992:123-124.

[2] 杨明红,刘劲松,张波,等. 基于遗传算法的窄带滤光片的优化设计[J]. 中国激光,2003,30(1):57-59. YANG Ming-hong, LIU Jin-song, ZHANG Bo, et al. Optimal design of narrow band filter with genetic arithmetic[J]. Chinese Journal of Lasers, 2003,30(1):57-59. (in Chinese)

[3] 李敏强,寇纪松,林丹,等. 遗传算法的基本理论与应用[M]. 北京:科学出版社,2002:3-5. LI Min-qiang, KOU Ji-song, LIN Dan, et al. Basic theory and application of genetic algorithms[M]. Beijing: Science Press, 2002:3-5. (in Chinese)

[4] 叶美盈. 基于整体退火遗传算法的膜系设计方法[J]. 光电工程,2000, 27(3):12-15. YE Mei-ying. A coating design method based on a whole annealing genetic algorithm [J]. Opto-Electronic Engineering, 2000, 27 (3): 12-15. (in Chinese)

[5] 王霞,汪晓东,吕焜. 基于实数编码自适应遗传算法的膜系优化设计[J]. 量子电子学报,2004,21(1):51-55. WANG Xia, WANG Xiao-dong, Lü Kui. Optical thin film optimization design using adaptive real-

- coded genetic algorithm [J]. Chinese Journal of Quantum Electronics, 2004, 21 (1): 51-55. (in Chinese)
- [6] CHIPPERFIELD A, FLEMING P, PROLHEIM H, et al. Genetic algorithm toolbox for use with MATLAB V1. 2 user's guide [M]. Sheffield: University of Sheffield, 1994:1-94.
- [7] 雷英杰, 张善文, 李续武, 等. MATLAB 遗传算法工具箱及应用[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005:1-270.
LEI Ying-jie, ZHANG Shan-wen, LI Xu-wu, et al. MATLAB genetic algorithm toolbox and application [M]. Xi'an: Xidian University Press, 2005:1-270. (in Chinese)
- [8] 常天海. 遗传算法在窄带滤光片膜系设计中的应用[J]. 真空与低温, 2002, 8(4): 225-229.
CHANG Tian-hai. Application of genetic algorithms to the design on film system of narrow-band filter [J]. Vacuum & Cryogenics, 2002, 8(4): 225-229. (in Chinese)
- [9] 杨开勇. 全自动光学薄膜软件的研制[D]. 长沙: 国防科技大学, 2003: 62-64.
YANG Kai-yong. Development of automatic software for thin films design [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2003: 62-64. (in Chinese)
- [10] SZAFRANEK I. Broad double-band antireflection coatings on glasses for 1.064 and visible or ultraviolet radiation; design and experiment [J]. SPIE, 1983, 401:138-145.
- [11] 章岳光, 顾培夫, 刘旭, 等. 1064 nm, 532 nm, 355 nm 三倍频增透膜[J]. 激光与红外, 1996, 26(3):213-215.
ZHANG Yue-guang, GU Pei-fu, LIU Xu, et al. Antireflection coatings simultaneously effective at 1064 nm, 532 nm and 355 nm [J]. Laser & Infrared, 1996, 26(3):213-215. (in Chinese)
- [12] 谭天亚, 占美琼, 田光磊, 等. 全固态激光器用晶体镀膜的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2004, 41(7):31-34.
TAN Tian-ya, ZHAN Mei-qiong, TIAN Guang-lei, et al. Development of coatings on the crystals for the diode pumped lasers [J]. Laser & Optoelectronics Development, 2004, 41(7): 31-34. (in Chinese)
- [13] MARTIN S, RIVORY J, SCHOENAUER M. Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms[J]. Applied Optics, 1995, 34(13):2247-2254.
- [14] TIKHONRAVOV A V, TRUBETSKOV M K, DEBELL G W. Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings[J]. Applied Optics, 1996, 35(28): 5493-5508.

(上接第 532 页)

- State bureau of technical supervision, GB/T3977-1997, Show method of color [S]. Beijing: China Standard Press, 1997. (in Chinese)
- [4] 金伟其, 胡威捷. 辐射度、光度与色及其测量[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2006.
JIN Wei-qi, HU Wei-jie. Radiometry, photometry and colourimetry, and their measurement [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 2006. (in Chinese)
- [5] 束越新. 颜色光学基础理论[M]. 山东: 山东科学技术出版社, 1981.
SHU Yue-xin. Basic theory of colouring optics[M]. Shandong: Shandong Science and Technology Press. 1981. (in Chinese)