用BFS变尺度法设计宽带增透膜系

赵 学 恩

一、引　　言

我们从1973年起就已经把变尺度法应用在各种膜系设计工作中。几年的实践证明，变尺度法的膜系设计比起其它方法来说具有很大的特点；特别是对于宽带增透膜系的设计最为方便，其设计质量也是十分令人满意的。

为了说明这个问题，我们就拿1975年美国宽带增透膜系最新设计结果，与我们变尺度法设计的结果进行比较。比较结果证明了上面的结论。

Rabinovitch与Pagis[1]（简写RP）把增透膜系用全介质法卜利—白洛干涉滤光片的原理进行处理。在给定材料折射率n_i，且无色散情况下，设计了剩余反射率低于0.5%的四层与五层宽带增透膜系。他们设计结果是目前比较好的一种。据作者自己讲：四层增透膜所用的$n_1=n_3=1.38$，$n_2=n_4=2.05$，$n_g=1.52$，所得带宽为2880Å；五层增透膜所用的$n_1=n_4=1.38$，$n_2=n_5=2.05$，$n_3=2.3$，$n_g=1.7$，所得带宽为4250Å。应该指出RP的五层增透膜设计结果并没有完全达到剩余反射率低于0.5%的要求。

我们用BFS变尺度法，也针对上述同样的材料折射率和剩余反射率的要求，一次计算就得出不逊于RP的结果。在计算速度为10万次/秒的503电子计算机上只分别花三、四分钟的时间。

二、变尺度法

这种方法是Davidon[2]先提出来，后来于1963年经Fletcher与Powell改进得来，叫做DFP变尺度法。是一种容易理解和成功的求极值算法。

如果用X表示膜系光学厚度向量：

$$X=\begin{vmatrix} n_1d_1 \\ n_2d_2 \\ \vdots \\ n_Nd_N \end{vmatrix}$$

N为层数。那么在前后两次迭代中

$$X^{(k+1)}=X^{(k)}-\alpha^{(k)}H^{(k)}G^{(k)} \tag{1}$$

其中$H^{(k)}$是第k次迭代的正定矩阵。开始时候的$H^{(1)}$可以任意选择，例如取单位矩阵。$G^{(k)}$是评价函数f在第k次迭代时对于各层厚度的梯度向量。$\alpha^{(k)}$是待调整的参数。调整的方法就是把（1）式代入评价函数f中，用插值法，或0.618法，或比较法使$f(\alpha)\simeq 0$时就是所寻找的$\alpha^{(R)}$。整个变尺度法在这步是费时间的。Powell指出宁可求出近似的$\alpha^{(k)}$也就可以了。

DFP法对$H^{(k+1)}$是这样取的：

$$H^{(k+1)}=H^{(k)}-\frac{H^{(k)}\ r^{(k)}\ r^{(k)T}\ H^{(k)}}{1r^{(k)T}H^{(k)}\ r^{(k)}}+$$

$$+\frac{P^{(k)}P^{(k)T}}{P^{(k)}r^{(k)}} \tag{2}$$

其中T表示转置，$P^{(k)}$与$r^{(k)}$是：

$$\left.\begin{aligned} P^{(k)} &= X^{(k+1)} - X^{(k)} \\ r^{(k)} &= G^{(k+1)} - G^{(k)} \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

我们曾经用DFP算法的Algol 60程序[4]进行了许多计算。绝大多数情况是很满意的，在有舍入误差情况下，$H^{(R)}$ 易趋向于病态，致使收敛稳定性没有绝对保证。

Broyden[5]，Fletcher[6]与Shanno[7]改进了上述的 $H^{(k)}$，得出：

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + (\mu^{(k)}P^{(k)}P^{(k)T} - H^{(k)}r^{(k)}P^{(k)T} - P^{(k)}r^{(k)T}H^{(k)})/P^{(k)T}r^{(k)} \qquad (4)$$

其中：

$$\mu^{(k)} = 1 + r^{(k)T}H^{(k)}r^{(k)}/P^{(k)T}r^{(k)} \qquad (5)$$

叫做BFS变尺度法。这样一来使 $H^{(R)}$不会出现病态，所以有可靠的稳定性。因此它是目前最成功的变尺度法。而且甚至比 DFP 法尚省时间。

顺便指出朱风石与赵瑞安的文章“求函数极小值的变尺度法”[8]，对变尺度法作了十分系统的介绍。

评价函数 f(X)是这样定义的：

$$f(X) = \sum_{\lambda} [R(\lambda) - Ro(\lambda)]^2 \qquad (6)$$

$Ro(\lambda)$ 为各计算点（波长 λ） 的目标值，$R(\lambda)$为该点反射率。

三、计算结果与讨论

首先选择大致合适的初始厚度。表一与表二分别列出四层增透膜与五层增透膜设计结果的各层厚度。所得剩余反射率曲线绘于下列图中。

在计算中令所有的 $Ro(\lambda) = 0$，姑且令各计算点的权重都相等。每间隔 300 Å 或更多一些取一个计算点。

四层增透膜，用 BFS 变尺度法设计结果，剩余反射率低于 0.5% 者，其带宽为 2950 Å，比RP 略宽一些；五层增透膜的带宽为4190 Å，虽比RP的带宽 4250 Å 略小 60 Å，但是 RP 并没有完全达到剩余反射率低于0.5%的要求（见图一)。因此用 BFS 法仍比 RP 为佳。

表一　四层膜厚度

	n_i	RP (单位:度)	本文初始 (单位: Å)	本文最终 (单位: Å)
1	1.38	90	1375	1313
2	2.05	193.5	2755	2778
3	1.38	29.25	500	423
4	2.05	21.78	500	356

表二　五层膜厚度

	n_i	RP (单位:度)	本文初始 (单位: Å)	本文最终 (单位: Å)
1	1.38	90	1375	1351
2	2.05	90	1375	1352
3	2.3	106.2	1375	1535
4	1.38	9.18	500	149
5	2.05	54.45	500	827

关于初始条件(指初始厚度)问题。我们在前一文[9]已指出变尺度法对初始厚度的选择没有苛刻的要求。固然很坏的初始厚度会延长一些计算时间，但是我们曾经把60年代几个国外作者所设计的膜系，用变尺度法重新设计，可以得出结论：对于同一的初始厚度的膜系用变尺度法进行设计，迭代次数较少（时间短),评价函数下跌得较快。

图二是本文初始与最终的剩余反射率的比较。由图可见，本文的五层膜，基本上只迭代七次即可；而本文的四层膜，基本上只迭代四次即可。

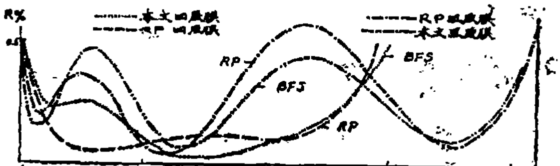

图 1　BFS变尺度法与RP法设计结果比较

(下转第 8 页)

参 考 文 献

（1）Оптика и спектроскопия том 33 вып 2 p332—338 1971

（2）Appl. Opt Vol 9，1—4，1970 p 866

（3）光学薄膜技术 周百林 尹树百 译

（4）彩色电视中的色度学问题 王大衍 著

（上接第10页）

王希泉同志参加本文的一些计算工作，他的仔细计算结果，四层增透膜还更加宽20～30 Å左右。

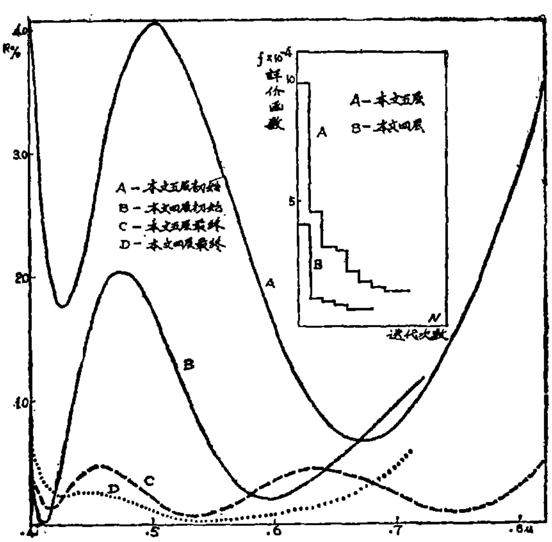

图 2　本文初始与最终的剩余反射率比较

参 考 文 献

（1）K.Rabinovitch and A.Pagis, Appl. Opt. **14** (1975) 1326—1334

（2）Davidon, W.C., AEC Research and Development Report, ANL-5990(Rev)(1959)

（3）Fletcher, R., and Powell, M. J.D., Comput. J. **6** (1963)163—168

（4）Wells, M., CACM **8** (1965) 169—170

（5）Broyden, C.G., J.Inst, Maths. Applics **6** (1970), 76—90, 222—231.

（6）Fletcher, R., Comput. J. **13** (1970) 317—322

（7）Shanno. D. F., Maths. Comput. **24** (1970) 647—656

（8）朱风石赵瑞安，计算机应用与应用数学1975年第9期1—16页

（9）沈字619部队：变尺度法膜系自动设计，光学薄膜技术，第五机械工业部综合研究所资料汇编（1975年）279页