

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

© 2014 г. **Е. Н. Котликов**^{*}, доктор физ.-мат. наук; **А. Н. Тропин**^{*,**}, канд. физ.-мат. наук;
В. Б. Шалин^{*,**}, аспирант

^{*}Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения,
Санкт-Петербург

^{**}НИИ «Гириконд», Санкт-Петербург

E-mail: shalin@gmail.ru

Представлен новый метод проектирования оптических покрытий с применением эволюционных стратегий на основе генетических алгоритмов. Применительно к задачам синтеза многослойных тонкопленочных систем рассмотрены способы кодирования альтернативных решений и генетические операторы кроссинговера, селекции, генетического давления и мутации. Показано их влияние на скорость сходимости алгоритма. На примере проектирования широкополосных просветляющих покрытий для деталей из германия проиллюстрированы возможности метода.

Ключевые слова: тонкие пленки, оптические покрытия, интерференция, генетический алгоритм, генетический оператор, функция качества.

Коды OCIS: 310.4165.

Поступила в редакцию 17.05.2014.

Введение

Интерференционные покрытия различного функционального назначения наносятся на оптические элементы подавляющего большинства современных оптических и оптико-электронных систем. При проектировании таких покрытий в настоящее время в основном используется подход, основанный на минимизации функции качества [1].

Функция качества, определенная на дискретном множестве, содержащем L точек, имеет вид:

$$F(X) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w(\lambda_i) |T(X, \lambda_i) - T_0(\lambda_i)|^2 \quad (1)$$

где $T(X, \lambda_i)$ – текущее спектральное значение коэффициента пропускания (отражения), $T_0(\lambda_i)$ – заданное значение коэффициента пропускания (отражения), $w(\lambda_i)$ – весовая функция, λ_i – текущее значение длины волны. Основные трудности при таком подходе связаны с многоэкстремальностью функции качества, подлежащей минимизации.

Анализ современного состояния вопросов синтеза оптических покрытий показывает,

что в настоящее время прослеживается тенденция к разработке таких алгоритмов проектирования, которые дают не единственное квазиоптимальное решение, а находят набор альтернативных решений, с заданной точностью удовлетворяющих требованиям [2]. Затем из полученного набора решений с применением того или иного критерия пригодности, выбирается наиболее подходящая структура покрытия. Такими критериями, например, могут служить результаты исследования воспроизводимости спектральных характеристик покрытий [3], анализ устойчивости [4, 5] или так называемый предпроизводственный анализ [6, 7].

Получившие развитие в последнее время генетические алгоритмы (ГА) и эволюционные стратегии на их основе применяются в задачах многопараметрической оптимизации и проектирования в различных областях науки и техники [8]. Применительно к задачам проектирования оптических покрытий, основное отличие этих методов заключается в том, что в случае вариационной постановки задачи при нахождении оптимального решения нет необходимости вычислять производные функции качества, что существенным образом сказывается

на быстродействии и эффективности алгоритмов. В основе работы генетических алгоритмов лежит моделирование следующих механизмов популяционной генетики: манипулирование хромосомным набором при формировании генотипа новой особи путем наследования участков хромосомных наборов родителей (кроссинговер), случайное изменение генотипа, известное в природе как мутация. Кроме этого, отличительной чертой алгоритмов, в основе функционирования которых лежат эволюционные стратегии и генетические алгоритмы является то, что на каждом шаге (итерации) уже используется набор (популяция) альтернативных решений. Также важным механизмом, заимствованным у природы, является процедура естественного отбора, направленная на улучшение от поколения к поколению приспособленности членов популяции путем большей способности к “выживанию” особей, обладающих определенными признаками.

Особенности кодирования решений

В наиболее часто встречающейся разновидности генетического алгоритма для представления генотипа объекта применяются битовые строки (хромосомы). При этом каждому параметру в фенотипе соответствует один ген в генотипе объекта. Каждая хромосома представляет собой набор подкомпонентов, называемых генами. Гены располагаются в различных позициях или локусах хромосомы и принимают значения, называемые аллелями. В представлениях с бинарными строками, ген – бит, локус – его позиция в строке, и аллель – его значение (0 или 1).

Для удобства представления информации об альтернативных решениях пронумеруем слои и соответствующие им толщины слоев, начиная от подложки. Обозначим толщину n -го слоя как d_n . Таким образом, для описания альтернативного решения необходимо кодировать, например, для 5-слойного оптического покрытия 5 чисел.

В последовательной системе кодирования альтернативных решений числа, характеризующие конструкцию оптического покрытия, группируются. Структура хромосомы, описывающей альтернативное решение в последовательной системе кодирования, может быть представлена следующим образом: $d_1 d_2 d_3 d_4 d_5$.

Основной недостаток классического двоичного кодирования заключается в том, что двоичное

представление последовательных десятичных чисел отличаются в значениях нескольких бит, так например число 3 в двоичном коде – 011. Число же 4 – 100. Соответственно при переходе от 3 к 4 меняют свое значение все 3 бита одновременно, что увеличивает время, необходимое для сходимости алгоритма, и затрудняет его функционирование в целом из-за потери “наследственности”. Для того чтобы избежать этой проблемы, представляется перспективным использовать кодирование, при котором соседние числа отличаются меньшим количеством позиций, а в идеале – значением всего одного бита. Это может быть достигнуто, например, с помощью рефлексивного кода Грея [8].

Сравнение эффективности применения двоичного представления и кодировки Грея проводилось в разработанной программе на примере проектирования широкополосных просветляющих покрытий. Для этого были проведены исследования изменения функции качества в зависимости от размера популяции каждого способа кодирования. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведены зависимости функции качества от размера начальной популяции альтернативных решений. Для каждого размера популяции усреднения проводились по десяти процедурам запуска программы.

Анализ скорости сходимости алгоритма показывает, что увеличение размера популяции приводит к уменьшению среднего значения функции пригодности. Это означает, что увеличение размера популяции альтернативных решений при неизменном количестве итераций сопровождается увеличением вероятности отыскания оптимального решения. Как видно

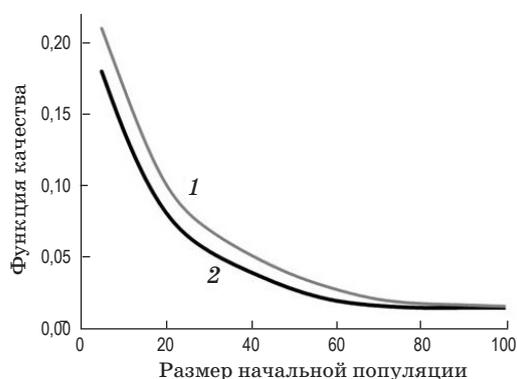


Рис. 1. Зависимость усредненной функции качества от размера начальной популяции альтернативных решений. 1 – двоичное представление; 2 – кодировка Грея.

из полученных результатов, для алгоритма, использующего кодировку Грея скорость сходимости выше, чем для алгоритма использующего двоичное представление. Это можно объяснить тем, что при использовании кодировки Грея изменение в особи минимально. Это приводит к тому, что вероятность “проскочить” оптимальное решение гораздо меньше, чем у алгоритма, использующего двоичное представление хромосомы. Следовательно, использование кодировки Грея предпочтительней с позиций наиболее быстрого отыскания одного решения или набора решений, удовлетворяющих требованиям.

Выбор эффективных генетических операторов

Работа генетических операторов представляет собой итерационный процесс, который продолжается до тех пор, пока не выполнятся заданное число поколений или какой-либо иной критерий останова. На каждой итерации ГА популяция решений подвергается действию построенных специальным образом генетических операторов: селекции, скрещивания (кроссинговера) и мутации. В терминах оптимизационной постановки задачи проектирования оптических покрытий генетический алгоритм представляет собой комбинацию двух методов оптимизации – переборного и локально-градиентного. Операторы кроссинговера и мутации реализуют переборную часть метода, а отбор наилучших решений – селекцию – градиентную часть.

Оператором селекции наиболее приспособленных решений был выбран отбор на основе колеса рулетки [8]. Его работа организована следующим образом. Для каждого элемента популяции альтернативных решений вычисляется значение функции пригодности. Для случая проектирования оптических покрытий за численное значение функции пригодности в работе принималась значение функции качества (1). Затем колесо рулетки разбивается на сектора, количество которых равно числу элементов популяции альтернативных решений. Площадь каждого сектора пропорциональна отношению значения функции пригодности данного элемента к суммарному значению функций пригодности всех элементов популяции. Очевидно, что чем больше это отношение, тем больше площадь соответствующего ему сектору на колесе рулетки.

Для реализации переборной части генетического алгоритма представлялось необходимым исследовать различные операторы скрещивания и мутации.

Существует два наиболее часто используемых оператора скрещивания (кроссинговера) – одноточечный и двухточечный. Одноточечный оператор скрещивания работает следующим образом. Сначала, у пары родительских хромосом случайным образом выбирается одна из $l - 1$ точек разрыва, где l – количество бит в строке, а точка разрыва – это участок между соседними битами в строке. Обе родительские структуры разрываются на два сегмента по этой точке. Затем соответствующие сегменты различных родителей склеиваются и получаются два генотипа потомков. Двухточечный оператор работает по такому же принципу, только выбирается уже не одна точка разрыва, а две.

Ранее в работе [9] были исследованы одноточечный и двухточечный операторы скрещивания. Было показано, что скорость сходимости алгоритма на основе одноточечного оператора кроссинговера выше по сравнению с двухточечным оператором. Однако, двухточечный оператор имеет меньшее значение функции качества, что означает лучшее соответствие характеристик оптического покрытия проектным требованиям. Но разница в значениях функции качества одноточечного и двухточечного кроссинговера невелика. Исходя из этих результатов, выбор в настоящей работе был сделан в пользу одноточечного оператора кроссинговера, так как он требует наименьшее время на поиск требуемого решения.

Оператор мутации с некоторой вероятностью изменяет значение гена в хромосоме на любое другое возможное значение. Например, если в хромосоме 1001101010 мутации подвергается ген на позиции 7, то его значение, равное 1, изменяется на 0, что приводит к образованию хромосомы 1001100010. Вероятность мутации обычно очень мала, и именно от нее зависит, будет ли данный ген мутировать или нет.

Если принять во внимание, что в случае сходимости популяции в локальном оптимуме мутация остается единственным механизмом, способным вывести популяцию из него, то проблема нахождения наиболее эффективной вероятности мутации становится весьма значимой.

В работе исследование зависимости значения функции качества от вероятности мутации так же, как в случае с исследованием способов

кодирования, было проведено на примере проектирования просветляющих покрытий. Вычислительные эксперименты проводились при постоянных размерах начальной популяции – 100 особей и количестве итераций – 20. Результаты вычислительных процедур представлены на рис. 2.

Анализ зависимости функции качества от вероятности мутации показывает, что увеличении вероятности мутации приводит к росту значения функции качества. Это означает, что увеличение вероятности мутации приводит к уменьшению вероятности отыскания оптимального решения, удовлетворяющего проектным требованиям. Это происходит из-за того, что при увеличении мутации происходит изменение большего количества хромосом, содержащих хорошее решение. Тем самым высокая вероятность мутации идет во вред сходимости алгоритма. Из рис. 2 видно, что наиболее эффективной является вероятность мутации близкая 2–3%.

Немаловажным параметром эффективности алгоритма является генетическое давление на популяцию. Генетическое давление заключается в замене элементов популяции потомками, возникшими в результате применения генетических операторов. То есть при каждой итерации генетического алгоритма какая-то часть родительских хромосом заменяется хромосомами потомков, что приводит к повышению скорости схождения алгоритма. На рис. 3 приведена зависимость функции качества от генетического давления. Вычисления проводились при постоянных размерах начальной популяции, равных 100 особям и 20 итерациям.

Анализ зависимости функции качества от генетического давления показывает, что наиболее эффективным является генетическое давление, равное 40%. Это означает, что генетиче-

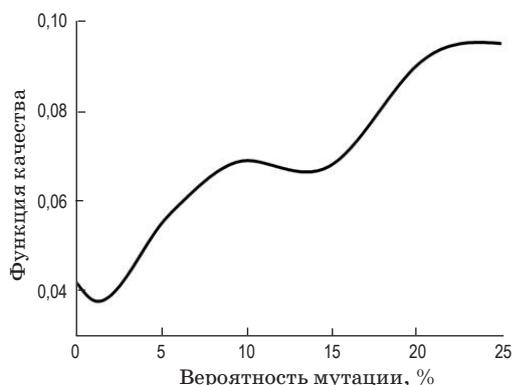


Рис. 2. Зависимость функции качества от вероятности мутации.

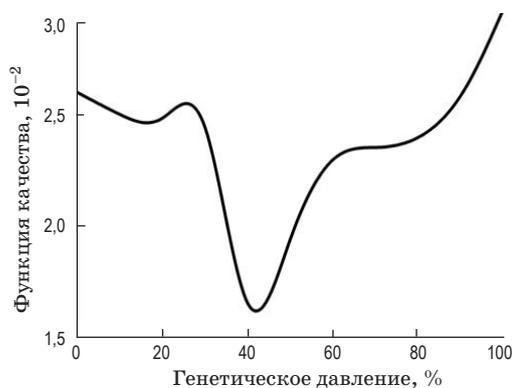


Рис. 3. Зависимость функции качества от генетического давления.

ский алгоритм имеет большую скорость сходимости при замене 40% родительских хромосом хромосомами потомков.

Проектирование оптических покрытий с устойчивыми спектральными характеристиками

Важной проблемой при изготовлении интерференционных покрытий является возникновение ошибок в оптических константах пленок и их толщинах. Причины возникновения таких ошибок различны и связаны как с физическими принципами работы и точностными характеристиками используемых систем для контроля процесса вакуумного напыления, так и с уровнем вакуумного напылительного оборудования в целом. Это обстоятельство порождает еще одну задачу при конструировании оптических покрытий, которая заключается в анализе найденных решений с точки зрения их устойчивости по отношению к различного рода ошибкам при их изготовлении.

Существует несколько подходов для анализа устойчивости интерференционных покрытий к ошибкам в толщинах слоев [3–7]. Для выбора наиболее устойчивого решения использовалась методика, изложенная в работе [4]. Критерием устойчивости служила введенная специальным образом функция устойчивости

$$S_i(X) = \frac{1}{N} \sum_i \left(\frac{\partial^2 F(X)}{\partial D_i^2} \right)^2, \quad (2)$$

где N – количество слоев в структуре покрытия, $F(X)$ – функция качества оптимизированной структуры (1), $D_i = n_i d_i$ – оптическая толщина i -го слоя.

Чем больше вторая производная функции качества для данного слоя, тем больше увеличение функции качества при отклонении решения от точки локального минимума. Другими словами, если слой имеет большую вторую производную в точке локального минимума, то небольшие изменения его толщины приведут к значительному увеличению функции качества, т.е. к существенному отклонению спектральной характеристики от требуемой.

При проектировании оптических покрытий с использованием генетических алгоритмов в качестве переменных использовались количество слоев покрытия и толщина каждого слоя в покрытии. Количество слоев ограничивается требованиями, предъявляемыми к оптическому покрытию с позиций его практической реализации.

Для реализации генетического алгоритма было разработано оригинальное программное обеспечение, которое позволяет осуществлять проектирование интерференционных оптических покрытий различного назначения. В программе имеется возможность рассчитывать спектры отражения и пропускания покрытий, задавать структуру покрытия и оптимизировать ее для нахождения наилучшего решения, удовлетворяющего проектным требованиям, оперировать набором наилучших решений, которые оцениваются на устойчивость к ошибкам в толщине слоев.

Блок-схема работы составленной программы приведена на рис. 4.

Поиск решения осуществляется на ряде шагов. На первом шаге задается начальная популяция и количество желаемых слоев оптического покрытия. Далее формируется начальная популяция решений. Эти решения оцениваются и, если есть такое решение, которое удовлетворяет проектным требованиям, то алгоритм заканчивает свою работу и показывает это решение. Если же нужное решение не найдено, то происходит формирование новой популяции альтернативных решений посредством генетических операторов – кроссинговера и мутации. На следующем шаге происходит оценка на устойчивость и селекция решений. Хорошие решения остаются в популяции, плохие вымирают. Если найдено нужное решение, алгоритм прекращает работу, если нет, то цикл повторяется с формирования начальной популяции до тех пор, пока это решение не будет найдено.

Для иллюстрации применимости предлагаемого метода алгоритма были спроектированы

10- и 12-слойные просветляющие покрытия для деталей из германия, работающие в спектральном диапазоне 2–12 мкм. Структуры покрытий приведены в таблице, а расчетные спектральные характеристики покрытий для случая полубесконечной подложки приведены на рис. 4. При проектировании 10-слойного просветляющего покрытия использовались такие пленкообразующие материалы, как ZnSe, Ge и BaF₂. Для 12-слойной структуры ZnSe был заменен на ZnS. Как видно из рис. 5, 10-слойное покрытие лучше соответствует проектным требованиям, то есть пропусканию, близкому к 100% в диапазоне 2–12 мкм. На рис. 5 приведены значения $\partial^2 F(X)/\partial D_i^2$ для двух покрытий, т.е. показана чувствительность каждого слоя к ошибке в его толщине. Из него следует, что 12-слойное покрытие менее чувствительно к ошибкам в толщине каждого слоя. То есть 12-слойное покрытие обладает лучшей устойчивостью.

Для сравнительного анализа эффективности и быстродействия предложенного алгоритма проектирования оптических покрытий была использована разработанная ранее программа FilmMgr, основанная на комбинации двух оптимизационных методов – случайного перебора



Рис. 4. Блок-схема программы для проектирования оптических покрытий.

Структуры просветляющих покрытий

10-ти слойное просветляющее покрытие												
№ слоя	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
Материал	ZnSe	Ge	ZnSe	Ge	ZnSe	Ge	ZnSe	BaF ₂	ZnSe	BaF ₂		
Физическая толщина, нм	36	139	96	103	174	55	508	244	95	802		
12-ти слойное просветляющее покрытие												
№ слоя	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Материал	ZnS	Ge	ZnS	Ge	ZnS	Ge	ZnS	Ge	ZnS	BaF ₂	ZnS	BaF ₂
Физическая толщина, нм	18	159	59	130	122	92	199	48	542	241	100	820

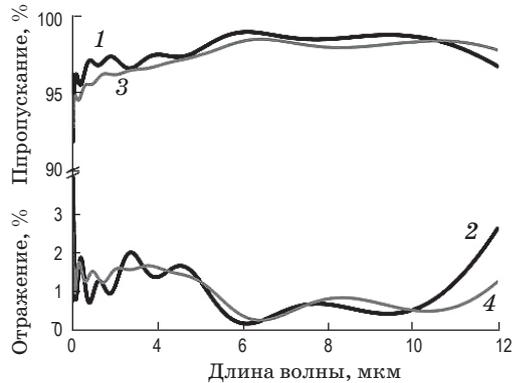


Рис. 5. Спектры пропускания (1) и отражения (2) для 10-слойного покрытия, пропускания (3) и отражения (4) для 12-слойного покрытия соответственно.

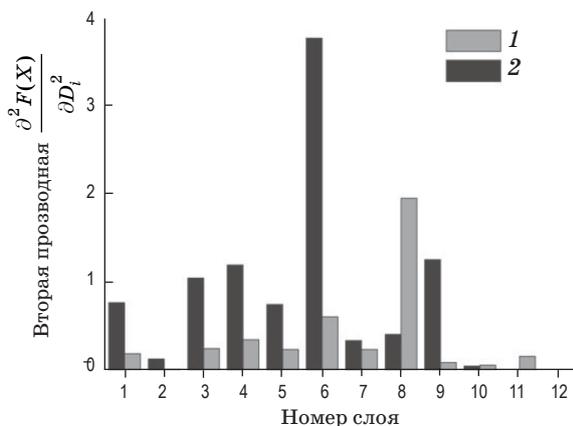


Рис. 6. Чувствительность слоев к ошибкам. 1 – 10-слойное покрытие, 2 – 12-слойное покрытие.

и градиентного спуска [10]. Серия вычислительных экспериментов по проектированию оптических покрытий различного назначения показала, что скорость работы алгоритма на основе эволюционных стратегий примерно в 2 раза выше по сравнению с традиционными алгорит-

мами на основе случайного перебора и градиентного спуска, реализованными в программе FilmMgr. Так, например, с использованием предложенного алгоритма время проектирования 12-слойного просветляющего покрытия (см. таблицу), усредненное по 10 запускам процедуры составляет около 30 с.

Заключение

В работе представлены результаты адаптации эволюционных стратегий на основе генетических алгоритмов для решения задач многопараметрической оптимизации, возникающих при проектировании тонкопленочных оптических интерференционных покрытий. Исследована эффективность различных генетических операторов кроссинговера, селекции и мутации. Установлено, что для кодировки решений целесообразнее использовать рефлексивный код Грея. Из-за отсутствия необходимости вычисления производных функции качества алгоритм эволюционного поиска оказывается эффективнее традиционных градиентных методов оптимизации.

Применимость нового подхода показана на примере проектирования широкополосных просветляющих покрытий. Отличительной особенностью разработанного алгоритма является возможность оперировать не единственным квазиоптимальным решением, а набором альтернативных решений. Из полученного набора решений наиболее подходящая структура покрытия может быть определена с применением того или иного критерия пригодности. В каждом конкретном случае выбор определяется, в том числе, и уровнем развития применяемых технологий получения оптических покрытий, а также стратегиями контроля процесса осаждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ.

* * * * *

ЛИТЕРАТУРА

1. *Baumeister P.* Design of multilayer filters by successive approximations // *J. Opt. Soc. Amer.* 1958. V. 48. P. 955–957.
2. *Тихонравов А.В., Трубецков М.К.* Современное состояние и перспективы развития методов проектирования многослойных оптических покрытий // *Оптический журнал.* 2007. Т. 74. № 12. С. 66–73.
3. *Балышев К.В., Путилин Э.С., Старовойтов С.Ф.* Исследование воспроизводимости выходных параметров многослойных диэлектрических систем во время изготовления // *Оптический журнал.* 1998. Т. 65. № 3. С. 39–43.
4. *Котликов Е.Н., Тропин А.Н.* Критерий устойчивости спектральных характеристик многослойных интерференционных покрытий // *Оптический журнал.* 2009. Т. 76. № 3. С. 60–64.
5. *Котликов Е.Н., Новикова Ю.А.* Сравнительный анализ критериев устойчивости интерференционных покрытий // *Оптический журнал.* 2013. Т. 80. № 9. С. 81–87.
6. *Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K.* Computational manufacturing as a bridge between design and production // *Appl. Opt.* 2005. V. 44. № 32. P. 6877–6884.
7. *Tikhonravov A.V.* Virtual deposition plant // *Proc. SPIE. Advances of thin-film coatings for optical applications II* / Ed. by Fulton M.L., Kruschwitz J.D.T. 2005. V. 5870. P. 108–120.
8. *Панченко Т.В.* Генетические алгоритмы. Астрахань: Издательский дом “Астраханский университет”, 2007. 87 с.
9. *Котликов Е.Н., Шалин В.Б., Тропин А.Н.* Синтез оптических покрытий с применением генетических алгоритмов // *Научно-технический вестник ИТМО.* 2011. № 5(75). С. 1–5.
10. *Котликов Е.Н., Хонинева Е.В.* Программа синтеза интерференционных покрытий “FilmMgr”. СПб.: ГУАП, 2011. № гос. регистрации 2011612364.