

应用于亚波长角向偏振金属光栅设计的 快速收敛粒子群算法优化

朱春霖^{1,2}, 焦庆斌¹, 谭鑫¹, 王玮¹, 巴音贺希格^{1*}

¹中国科学院长春光学精密机械与物理研究所国家光栅制造与应用工程技术研究中心, 吉林 长春 130033;

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 提出了分步寻优的基于粒子位置调整惯性权重的粒子群算法(PDW-PSO), 通过调用严格耦合波方法(RCWA)计算衍射效率, 进行了光栅结构参数的优化。将 PDW-PSO 与惯性权重不变的粒子群算法(PSO)和基于迭代次数调整惯性权重的粒子群算法(IDW-PSO)进行对比, 结果表明 PDW-PSO 具有更快的收敛速度, 相比于 PSO 和 IDW-PSO, PDW-PSO 的平均迭代次数分别从 89.83 和 74 减少至 21.2, 调用 RCWA 的次数分别从 3144.05 和 2590 下降至 224。分析了波段匹配数对算法的影响, PSO 和 IDW-PSO 的 RCWA 调用次数与波段匹配数呈等倍率增加, 而 PDW-PSO 的 RCWA 调用次数的增加倍率小于波段匹配数的增加倍率。进行了算法准确度实验, 在 30 次运行中, PDW-PSO 与 PSO、IDW-PSO 正确收敛到最优值的次数相近, 误差值不超过 6.6%; 随着粒子数的增加, 三种方法的准确度都有所提高, 粒子数达到 27 后基本都可以保证收敛到最优。

关键词 光栅; 亚波长角向偏振金属光栅; 粒子群优化算法; 基于粒子位置调整惯性权重; 收敛速度

中图分类号 O436

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201939.0705002

Fast Convergent Particle Swarm Optimization Algorithm for Subwavelength Azimuthally Polarized Metal Grating Design

Zhu Chunlin^{1,2}, Jiao Qingbin¹, Tan Xin¹, Wang Wei¹, Bayanheshig^{1*}

¹National Engineering Research Centre for Diffraction Gratings Manufacturing and Application,
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 particle swarm optimization algorithm (PDW-PSO), of which the inertia weight is modulated by particle position, is proposed for step-by-step optimization. The diffraction efficiency is calculated using rigorous coupled wave analysis (RCWA), and structural parameters of gratings are optimized. The comparison among PDW-PSO, traditional particle swarm optimization of which the inertial weight is unchanged (PSO), and particle swarm optimization of which the inertia weight is iteration-determined (IDW-PSO) shows that PDW-PSO has a faster convergence rate. Compared with PSO and IDW-PSO, the average number of iterations of PDW-PSO decreases from 89.83 and 74 to 21.2, and the number of calling RCWA drops from 3144.05 and 2590 to 224. The influence of wavelength matching number on the algorithm is analyzed. The magnification of RCWA calling numbers of PSO and IDW-PSO is equal to that of wavelength fitting number, while the magnification of RCWA calling numbers of PDW-PSO is less than that of wavelength fitting number. Experiments on algorithm accuracy are carried out. In 30 runs, PDW-PSO, PSO, and IDW-PSO have similar times of correct convergence to the optimal value, and the error is less than 6.6%. With the increasing particle number, the accuracy of the three methods improves, and the algorithm can be guaranteed to converge to the right optimal value after the particle number increasing to 27.

Key words gratings; subwavelength azimuthally polarized metal grating; particle swarm optimization algorithm; inertia weight modulated by particle position; convergence rate

OCIS codes 050.6624; 230.1950; 220.2945

收稿日期: 2019-02-13; 修回日期: 2019-03-20; 录用日期: 2019-04-01

基金项目: 国家自然科学基金(61605197)

* E-mail: bayin888@sina.com

1 引言

亚波长角向偏振金属光栅(SAPG)作为二氧化碳激光器谐振腔的后腔镜,可以使二氧化碳激光器输出角向偏振光,提高激光加工的效率^[1-3]。因具有较好的偏振选择特性,光栅后腔镜成为产生高功率矢量偏振光束的首选器件^[4]。光栅通常设计为同心环状,其亚波长结构能够保证沿角向偏振的横电(TE)光近乎全部反射,而沿径向偏振的横磁(TM)光受到光栅参数的调制,从而实现偏振选择,并使角向偏振光在谐振腔内形成振荡,最终使激光器输出具有较高纯度的角向偏振光^[5-7]。亚波长金属光栅的设计方法有模态法、传输矩阵法、电感电容电路模型分析法,以及有效介质理论与薄膜抗反射设计相结合的方法等^[8-14]。基于模态法与有效介质理论,可根据需要通过逆向设计得到光栅各项参数。然而,对于亚波长角向偏振金属光栅而言,为了使光栅能够在高功率激光环境下正常工作,器件需要采用全金属结构以增加其导热性。对于衬底也为金属的全金属结构器件,有效介质理论与薄膜抗反射设计相结合的方法并不适用,且在设计过程中,每次计算只能针对单一波长进行设计,无法同时考虑整个波段的情况。

粒子群算法(PSO)是由 Kennedy 和 Eberhart^[15-16]于 1995 年提出的,属于进化算法的一种,可进行多参量最优化。PSO 可以进行波段匹配,对多个波长同时进行设计优化^[17-19];通过在选定的波段范围内取一定数目的波长值作为匹配点,采用最小二乘法得到最优参数。在优化过程中,计算衍射效率的严格耦合波(RCWA)是最耗费计算资源的一步,优化算法的设计应尽量使 RCWA 的调用次数达到最小。在粒子群规模和匹配点数目 M 不变的情况下,为了减少 RCWA 调用,需要令算法快速收敛,以减少迭代次数。为了提高收敛速度并减少迭代次数,加速收敛算法相继被提出^[20-27]。基于迭代次数调整惯性权重因子 ω 的粒子群算法(IDW-PSO)中,速度更新公式中的 ω 随着迭代的进行逐渐减小,当达到设定的最高迭代次数时, ω 最小^[20-21,28]。然而,计算过程中的迭代通常在未达到设定的最高迭代次数时就因满足了阈值而停止, ω 的减小不明显,从而减弱了快速收敛。

结合亚波长角向偏振金属光栅设计的具体情况,本文提出了改进的 PSO 算法。改进的 PSO 算法包括中心波长寻找近似最优和多波长匹配搜索波

段最优两步。首先寻找中心波长下能够使光栅偏振选择特性达到最好的结构参数,作为近似最优点;然后将找到的近似最优点代入多波长寻优的算法中,作为诱导粒子,使其他粒子在算法初期快速地飞向目标区域。在速度更新公式中,采用基于粒子位置不断变化的惯性权重因子,减弱搜索粒子在群体最优附近的振荡,减少了冗余迭代,从而提高了收敛速度和设计效率,减少了 RCWA 调用次数。

2 设计算法

2.1 设计目标

亚波长角向偏振金属光栅结构如图 1 所示,其中 Λ 为光栅周期, d 为光栅沟槽深度。栅条材料采用金(Au),衬底材料采用铜(Cu),Au 与 Cu 之间采用一层 Ti 以增加附着力。光栅为同心环状,作为激光器腔镜,光线正入射到光栅上。光栅工作于 9.6~11.6 μm 波段,要求在中心波长处具有较高偏振选择特性,即在 10.6 μm 处 TE 光具有较高的反射率,而 TM 光具有较低的反射率。在 9.6 μm 与 11.6 μm 处,通常要求 TE 光与 TM 光的反射率之差不低于 5%^[5]。为了提高光能利用率,光栅采用亚波长结构,即光栅周期不大于 9.6 μm 。由等效介质理论可知,亚波长金属光栅对于入射的 TE 光相当于一层金属薄膜,几乎可以将其全部反射,且反射率与光栅结构参数(周期、槽深和占空比)的关系不大;而对于 TM 光来说,光栅相当于一层介质膜,光栅结构参数会对 TM 光的反射率产生调制作用^[12,22]。因而,设计时,对周期、槽深和占空比的调整使 TM 光在 9.6~11.6 μm 波段具有较低的反射率,在 10.6 μm 处 TM 光的反射率较小,同时在 9.6 μm 和 11.6 μm 处 TE 光与 TM 光的反射率之差大于 5%。

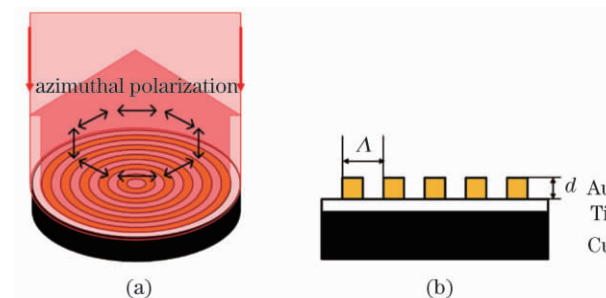


图 1 亚波长角向偏振金属光栅。

(a) 光栅为同心环结构;(b) 光栅横截面示意图

Fig. 1 Subwavelength azimuthally polarized metal grating.

(a) Grating with concentric ring structure;

(b) cross section of grating

2.2 衍射效率计算方法

在采用粒子群算法进行光栅参数的最优化时,需要在优化过程中计算光栅参数的衍射效率曲线,并将其与目标衍射效率曲线进行对比,通过对比结果指导光栅参数的迭代。通过光栅参数计算衍射效率时采用 RCWA。1981 年, Moharam 等^[29] 提出 RCWA 理论,其基本原理是将待求解的光栅区域进行水平分层,将每层的介电常数用 Fourier 级数展开,利用 Maxwell 方程组写出耦合波方程,通过边界匹配条件求解耦合波方程组,进而计算出反射区域、光栅区域和透射区域的电磁场分布,得到衍射效率^[29-30]。

对于所研究的 Au-Ti-Cu 结构光栅(图 1),由于 Cu 层中不存在电磁波,因而可以将光栅划分为入射(反射)区域、光栅区域和衬底(Ti)区域 3 层(图 2)。

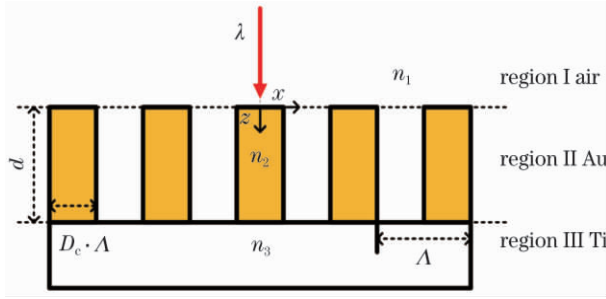


图 2 光栅分区示意图

Fig. 2 Schematic of grating partition

在光栅调制区域,由于光栅具有周期性结构,因而此区域的介电常数可以用 Fourier 级数展开,即

$$\epsilon = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \epsilon_i \exp\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} i x\right), \quad (1)$$

式中: i 为谐波级次; x 为空间横坐标; Λ 为周期; ϵ_i 为第 i 级傅里叶展开系数,其表达式为

$$\epsilon_i = \frac{1}{\Lambda} \left[\int_0^{D_c \Lambda} n_2^2 \exp(-j 2\pi i x / \Lambda) dx + \int_{D_c \Lambda}^{\Lambda} n_1^2 \exp(-j 2\pi i x / \Lambda) dx \right], \quad (2)$$

其中 D_c 为占空比, n_1 为入射区介质折射率, n_2 为光栅材料折射率。

区域 I 中的电场分布可表示为

$$E_1 = \exp[-jk_0 n_1 (x \sin \theta + z \cos \theta)] + \sum_{i=-\infty}^{\infty} R_i \exp[-j(k_{xi} x - k_{1-zi} z)], \quad (3)$$

式中: k_0 为 0 级谐波波数; θ 为入射光角度; z 为空间纵坐标; R_i 为反射的第 i 级谐波的振幅; k_{xi} 为第 i 级波矢 $\mathbf{k}_i$ 的 x 分量; k_{1-zi} 为区域 I 中第 i 级波矢 $\mathbf{k}_i$ 的 z 分量。

区域 III 中的电场分布可表示为

$$E_{III} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} T_i \exp\{-j[k_{xi} x + k_{III-zi} (z - d)]\}, \quad (4)$$

式中: T_i 为透射的第 i 级谐波的振幅; k_{III-zi} 为区域 III 中第 i 级波矢 $\mathbf{k}_i$ 的 z 分量。

区域 II 中的电场和磁场可分别表示为

$$E_{II} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_{II-yi}(z) \exp(-jk_{xi} x), \quad (5)$$

$$H_{II} = -j\sqrt{\epsilon_0/\mu_0} \sum_{i=-\infty}^{\infty} V_{II-xi}(z) \exp(-jk_{xi} x), \quad (6)$$

式中: $U_{II-yi}(z)$ 为归一化第 i 级空间谐波电场复振幅; $V_{II-xi}(z)$ 为归一化第 i 级空间谐波磁场复振幅; ϵ_0 为真空介电常数; μ_0 为真空磁导率。

对于 TE 波,电场 x 分量、电场 z 分量和磁场 y 分量都为 0,即 $E_{gx} = E_{gz} = H_{gy} = 0$, 根据 Maxwell 方程,有

$$H_{gx} = -\frac{j}{\omega' \mu} \frac{\partial E_{gy}}{\partial z}, \quad (7)$$

$$H_{gz} = -\frac{j}{\omega' \mu} \frac{\partial E_{gy}}{\partial x}, \quad (8)$$

$$-j\epsilon_0 \epsilon(x) \omega' E_{gy} = \frac{\partial H_{gx}}{\partial z} - \frac{\partial H_{gz}}{\partial x}, \quad (9)$$

式中: H_{gx} 为磁场 x 分量; E_{gy} 为电场 y 分量; H_{gz} 为磁场 z 分量; ω' 为角频率; μ 为磁导率。耦合波方程可表示为

$$\frac{\partial^2 U_{yi}}{\partial (k_0 z)^2} = \left(\frac{k_{xi}}{k_0}\right)^2 U_{yi} - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \epsilon_{m-i} U_{yi}, \quad (10)$$

式中: U_{yi} 为归一化第 i 级空间谐波电场复振幅。

求出耦合波方程的解为

$$U_{yi}(z) = \sum_{n=1}^N p_{in} \{c_n^+ \exp[-k_0 q_n (z - z_0)] + c_n^- \exp[k_0 q_n (z - z_1)]\}, \quad (11)$$

$$V_{xi}(z) = \sum_{n=1}^N s_{in} \{-c_n^+ \exp[-k_0 q_n (z - z_0)] + c_n^- \exp[k_0 q_n (z - z_1)]\}, \quad (12)$$

式中: V_{xi} 为归一化第 i 级空间谐波磁场复振幅; z_0 为考察区域上表面坐标; z_1 为考察区域下表面坐标; N 为粒子数; p_{in} 为耦合波方程在矩阵形式下系数矩阵的本征矢量 $\mathbf{P}$ 的元素; q_n 为系数矩阵本征值的平方根; $s_{in} = q_n p_{in}$ 为矩阵 $\mathbf{S} = \mathbf{PQ}$ 的元素; $\mathbf{Q}$ 为以 q_n 为对角元素组成的对角矩阵; c_n^+ 、 c_n^- 由边界条件确定。

1) 当 $z=0$ 时,边界条件为

$$\begin{cases} \delta_{i0} + R_i = \sum_{m=1}^n p_{im} [c_m^+ + c_m^- \exp(-k_0 q_m d)] \\ j[n_1 \cos \theta \delta_{i0} - (k_{1-zi}/k_0) R_i] = \\ \sum_{m=1}^n s_{im} [c_m^+ - c_m^- \exp(-k_0 q_m d)] \end{cases}, \quad (13)$$

式中: δ_{i0} 表示中心元素为 1、其余元素为 0 的列矩阵的第 i 个元素。

2) 当 $z=d$ 时, 边界条件为

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^n p_{im} [c_m^+ \exp(-k_0 q_m d) + c_m^-] = T_i \\ \sum_{m=1}^n s_{im} [c_m^+ \exp(-k_0 q_m d) - c_m^-] = j(k_{III-zi}/k_0) T_i \end{cases}. \quad (14)$$

通过边界条件求出 R_i 、 T_i , 最后得到衍射效率的表达式为

$$D_{ri} = R_{TEi} R_{TEi}^* \operatorname{Re}[k_{1-zi}/(k_0 n_1 \cos \theta)], \quad (15)$$

$$D_{ti} = T_{TEi} T_{TEi}^* \operatorname{Re}[k_{III-zi}/(k_0 n_1 \cos \theta)], \quad (16)$$

式中: 下标 TE 代表横电波; D_{ri} 为 TE 第 i 级反射衍射效率; D_{ti} 为 TE 第 i 级透射衍射效率; $*$ 为求共轭。

对于 TM 波, $H_{gx} = H_{gz} = E_{gy} = 0$, 经推导可得

$$D'_{ri} = R_{TMi} R_{TMi}^* \operatorname{Re}[k_{1-zi}/(k_0 n_1 \cos \theta)], \quad (17)$$

$$D'_{ti} = T_{TMi} T_{TMi}^* \operatorname{Re}[k_{III-zi}/(n_{III}^2 k_0 n_1 \cos \theta)], \quad (18)$$

式中: 下标 TM 代表横磁波; D'_{ri} 为 TM 第 i 级反射衍射效率; D'_{ti} 为 TM 第 i 级透射衍射效率; n_{III} 为区域 III 介质折射率。在进行光栅参数优化时, 可以将 RCWA 计算衍射效率的过程单独编写为一个函数, 函数的输入为光栅的结构参数, 输出为光栅的衍射效率。在优化过程中, 伴随着结构参数的迭代, 需要调用大量的 RCWA 函数。

2.3 基于粒子位置调整惯性权重的 PSO

基于粒子位置调整惯性权重的 PSO (PDW-PSO) 分为两个步骤: 1) 中心波长寻找近似最优; 2) 多波长匹配搜索波段最优。第一步计算出光栅在 $10.6 \mu\text{m}$ 处 TM 光的反射率最低时的结构参数, 此结构参数为近似最优。将此结构参数作为诱导粒子代入第二步的粒子群中, 计算出光栅在 $9.6 \sim 11.6 \mu\text{m}$ 波段内 TM 光的反射率最低时的结构参数, 此结构参数即为所求的波段最优。两步中粒子数 N 都选取为 7; 每一个粒子的位置代表一个由需要优化的参量 (周期 Λ 、槽深 d 、占空比 D_c) 组成的向量; 粒子的速度表示每一轮迭代中粒子位置的改变量。受加工能

力及亚波长结构等条件的限制, 将 Λ 、 d 、 D_c 的范围分别设置为 $3 \sim 9 \mu\text{m}$ 、 $0 \sim 5 \mu\text{m}$ 和 $0.1 \sim 0.8$, 相应的粒子位置改变的最大速度分别为 6, 5, 0.7。

2.3.1 中心波长寻找近似最优

如图 3 所示, 首先在给定的范围内随机生成粒子的位置 $\mathbf{X}(\Lambda, d, D_c)$ 与速度 $\mathbf{V}(\delta\Lambda, \delta d, \delta D_c)$; 采用 RCWA 计算每个粒子的适应度 F_1 ; 记录粒子个体在历次迭代过程中的最佳适应度 P_{best} 和所有粒子之间的种群最佳适应度 G_{best} 。 P_{best} 体现了某一个粒子在历次迭代过程中计算出的最低反射率; G_{best} 体现了所有粒子在历次迭代过程中计算出的最低反射率。根据 P_{best} 和 G_{best} 确定粒子位置的改变速度, 进行粒子位置的迭代。当 G_{best} 满足终止条件后停止迭代, G_{best} 所对应的位置向量即为所求的近似最优光栅结构参数。

对于每一个粒子, 第一步的适应度定义为由其位置向量中 Λ 、 d 、 D_c 计算出的 $10.6 \mu\text{m}$ 波长处 TM 光的反射率, 适应度函数可表示为

$$F_1 = R_{\text{design}}, \quad (19)$$

式中: R_{design} 为由 RCWA 计算得到的反射率。

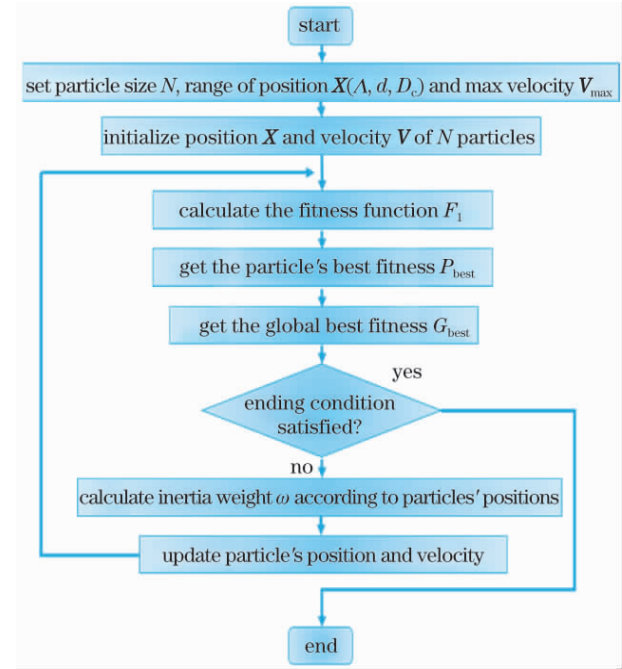


图 3 PDW-PSO 第一步基本流程

Fig. 3 Flow chart of 1st step of PDW-PSO

位置更新是迭代过程中的关键步骤。对于第 $k+1$ 次迭代, 若第 i 个粒子的适应度 $F[\mathbf{X}_i^{(k+1)}]$ 优于其历史最优 $P_{\text{best}i}$, 则将 $P_{\text{best}i}$ 更新为 $F[\mathbf{X}_i^{(k+1)}]$, 并重新选取 N 个粒子中最好的个体历史最优值, 作为种群最优 G_{best} 。第 i 个粒子的位置更新方程为

$$\begin{cases} \mathbf{X}_i^{(k+1)} = \mathbf{X}_i^{(k)} + \mathbf{V}_i^{(k)} \\ \mathbf{V}_i^{(k+1)} = \omega \times \mathbf{V}_i^{(k)} + c_1 \times r_{\text{and}} \times [\mathbf{X}_{\text{best}i} - \mathbf{X}_i^{(k)}] + c_2 \times r_{\text{and}} \times [\mathbf{X}_{\text{best}} - \mathbf{X}_i^{(k)}] \end{cases}, \quad (20)$$

式中: ω 、 c_1 和 c_2 为权重因子; $\mathbf{V}_i^{(k)}$ 为第 k 轮迭代时粒子的速度向量; $\mathbf{X}_{\text{best}i}$ 为历史最优值 $P_{\text{best}i}$ 所对应的位置向量; $\mathbf{X}_i^{(k)}$ 为第 k 轮迭代时粒子的位置向量; $\mathbf{X}_{\text{best}}$ 为种群最优值 G_{best} 所对应的位置向量。 r_{and} 为 $0 \sim 1$ 之间以均匀分布概率生成的随机数。

权重因子 ω 、 c_1 和 c_2 分别用来限制粒子个体惯性速度、粒子记忆最佳位置和种群最佳位置对粒子速度的影响, c_1 和 c_2 分别设置为 0.5 和 2。

基于粒子位置调整惯性权重因子 ω 的计算公式为

$$\omega = \omega_0 \times \sqrt{\left[\frac{\mathbf{X}_{\text{best}} - \mathbf{X}_i}{(X_{\text{max}} - X_{\text{min}})/2} \right]^2}, \quad (21)$$

式中: $\omega_0 = 1.2$, 为初始惯性权重因子; X_{max} 与 X_{min} 分别为粒子位置的上界与下界。

经多次实验, 发现当 $G_{\text{best}} < 0.16$ 时接近最优, 因而设定 0.16 为迭代的终止条件; 同时设定 $M_n = 200$ 为最高迭代次数。

通过中心波长寻找近似最优, 可以计算出近似最优结构参数。

2.3.2 多波长匹配搜索波段最优

通过第一步, 即中心波长寻找近似最优计算出近似最优结构参数后, 将其作为一组初始值加入第二步, 即多波长匹配搜索波段最优的粒子群中。如图 4 所示, 第二步的计算流程与第一步基本一致, 不同之处在于适应度函数的计算。第二步的适应度定义为由其位置向量中 Λ 、 d 、 D_c 计算出的 $9.6 \sim 11.6 \mu\text{m}$ 波段处 TM 光的反射率曲线与目标反射率曲线的匹配程度。选取 $9.6, 10.1, 10.6, 11.1, 11.6 \mu\text{m}$ 5 个波长作为匹配点, 5 个波长处的目标反射率分别为 $0.8, 0, 0, 0, 0.8$ 。适应度函数可表示为

$$F_2 = \sqrt{\frac{\sum_{p=1}^M [R_{\text{object}}^{(p)} - R_{\text{design}}^{(p)}]^2}{M}}, \quad (22)$$

式中: $M=5$ 为选取的波长数; $R_{\text{object}}^{(p)}$ 为第 p 个波长处设定的反射率; $R_{\text{design}}^{(p)}$ 为第 p 个波长处由 RCWA 计算的反射率。第二步的终止条件为 $G_{\text{best}} < 0.449$ 。

3 结果与讨论

计算得到的结果为 $\Lambda = 9 \mu\text{m}$, $d = 1.36 \mu\text{m}$,

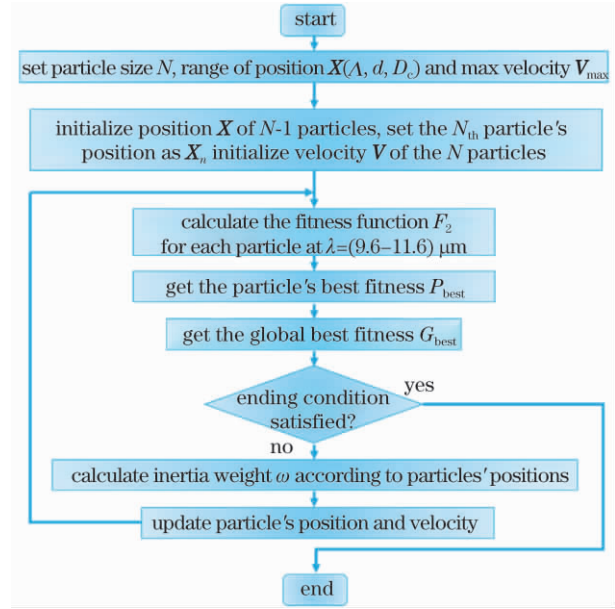


图 4 PDW-PSO 第二步基本流程

Fig. 4 Flow chart of 2nd step of PDW-PSO

$D_c = 0.8$, 此即通过两步计算优化后得到的在 $9.6 \sim 11.6 \mu\text{m}$ 波段能够使光栅具有最优偏振选择特性的结构参数。对于优化得到的光栅参数, 采用 RCWA 计算仿真得到反射率曲线如图 5 所示。其中 R_{object} 代表目标反射率; R_{design} 代表与目标结果最为接近的最优化结果。所设计的结构在 $9.6 \mu\text{m}$ 和 $11.6 \mu\text{m}$ 处 TM 光的反射率约为 0.7161 和 0.5763, 在 $10.6 \mu\text{m}$ 处 TM 光的反射率约为 0.1537。TE 光的反射率在 $9 \sim 12 \mu\text{m}$ 波段内始终为 0.98 左右, 所以光栅的偏振选择特性在 $9.6 \sim 11.6 \mu\text{m}$ 波段内不低于 26.39%, 在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长处约为 82.63%, 满足设计要求。在此基础上, 对算法的收敛速度和准确度进行了实验分析。

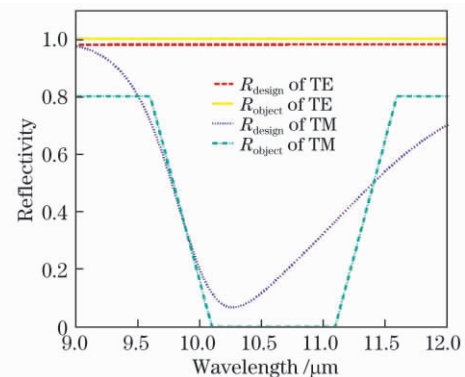


图 5 采用 RCWA 计算仿真得到反射率

Fig. 5 Simulated reflectivity by RCWA

3.1 算法的收敛速度

改进的 PDW-PSO 算法基于粒子位置计算惯性

权重 ω , 相比于 ω 不变的 PSO 和基于迭代次数计算 ω 的 PSO (IDW-PSO), 该算法可以减少迭代次数, 从而加速收敛。对惯性权重不变的 PSO、IDW-PSO 和 PDW-PSO 进行亚波长角向偏振金属光栅结构参数设计时的收敛情况进行了对比。其中, 惯性权重不变的 PSO 中 ω 设定为 1.2, IDW-PSO 中 ω 可表示为

$$\omega = \omega_0 - (\omega_0 - \omega_{\text{end}}) \left(\frac{k}{M_a} \right)^2, \quad (23)$$

式中: $\omega_0 = 1.2$ 为初始惯性权重因子; $\omega_{\text{end}} = 0.4$ 为终止惯性权重因子; $M_a = 200$ 为最高迭代次数。

PDW-PSO 中的 ω 按照 (23) 式变化。同时, 为了测试算法对不同目标光谱优化的性能, 除了对亚波长角向偏振金属光栅结构参数进行优化外, 还对图 6 所示的三种衍射效率曲线的光栅结构进行了优化, 得到的结果分别为: 对于多峰谱线光栅结构, $\Lambda = 0.021077 \mu\text{m}$, $d = 1.9238 \mu\text{m}$, $D_c = 0.6768$; 对于窄带谱线光栅结构, $\Lambda = 0.34699 \mu\text{m}$, $d = 0.5 \mu\text{m}$, $D_c = 0.8$; 对于宽波段谱线光栅结构, $\Lambda = 0.01 \mu\text{m}$, $d = 0.5 \mu\text{m}$, $D_c = 0.31443$ 。

分别运行 30 次, 收敛时运行的平均迭代次数 (记为 I , 下标代表算法及算法步骤) 见表 1。

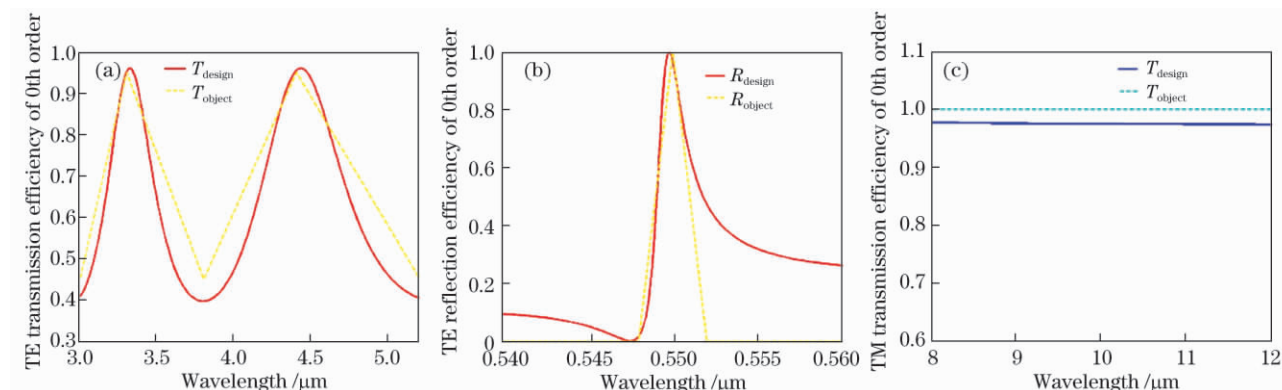


图 6 三种不同形式的目标衍射效率曲线和设计结果。(a)多峰谱线; (b)窄带谱线; (c)宽波段谱线

Fig. 6 Object diffraction efficiency curves and designed results of three different types. (a) Multi-peak curves; (b) narrow-band curves; (c) broad-band curves

表 1 3 种 PSO 的平均迭代次数

Table 1 Average iteration times of three PSO algorithms

Curve type	PSO	IDW-PSO	PDW-PSO	
			1 st step	2 nd step
Single peak (SAPG)	89.83	74.00	18.5	2.70
Multi peaks	142.70	107.27	90.3	14.00
Narrow-band	178.00	158.10	119.0	3.03
Broad-band	69.60	53.00	21.5	4.00

由表 1 中实验数据可见, IDW-PSO 相比于 ω 不变的 PSO, 平均迭代次数有所减少, 但减少得不明显。而 PDW-PSO 基于粒子位置调整 ω , 使用分步计算使迭代次数显著减少。对于不同的目标谱线, 算法搜索耗费的迭代次数有所不同。目标谱线越复杂, 与目标谱线相匹配的设计谱线越多样, 即搜索空间内会有更多的局部最优; 目标谱线变化越尖锐 (窄带宽情况), 搜索空间内与最优结构参数相近似的结构参数越少, 粒子越难以搜索到最优, 因而对于多峰和窄带宽谱线算法的迭代次数明显更多。对于多峰谱线, PDW-PSO 第二步的搜索次数偏高, 这

是因为第一步中为了计算诱导粒子, 选取单波长时只能选多峰中某一个峰对应的波长, 在这种情况下计算出的诱导粒子虽然满足此波长处的目标谱线, 但在目标谱线的其他峰值波长处不一定得到最优, 诱导粒子与真实最优粒子之间的距离可能较远, 导致迭代次数增加。

在算法的各个步骤中, 调用 RCWA 计算衍射效率 (R_{design}) 是最耗费计算资源的一步。RCWA 的调用次数决定了算法的效率。每一组参数值都需要进行一次 RCWA 的调用, 总的调用次数为粒子数、波长数与迭代次数之积, 因而, 在粒子数和波长数都

较小的情况下,迭代次数的降低对于提高收敛速度和计算效率具有重要意义。

对于 PSO 和 IDW-PSO 来说,RCWA 的调用次数(C)为迭代次数、粒子数与匹配点数目之积,则 PSO 和 IDW-PSO 的 RCWA 的调用次数分别为

$$C_{\text{PSO}} = I_{\text{PSO}} \times N \times M, \quad (24)$$

$$C_{\text{IDW-PSO}} = I_{\text{IDW-PSO}} \times N \times M. \quad (25)$$

对于 PDW-PSO,第一步的匹配点数目为 1,因而总的 RCWA 调用次数为

$$C_{\text{PDW-PSO}} = I_{\text{PDW-PSO-1}} \times N \times 1 + I_{\text{PDW-PSO-2}} \times N \times M. \quad (26)$$

舍弃表 1 中未收敛的数据,通过迭代次数的平均值计算三种方法的 RCWA 平均调用次数,结果如表 2 所示。

由表 2 可见,所提出的基于粒子位置调整 ω 的 PSO 调用 RCWA 的次数明显少于另外两种方法。由(24)~(26)式可以看出,对于 PSO 和 IDW-PSO 来说,匹配波长数目 M 的增加会使 RCWA 的调用次数成倍增加;对于分步骤的 PDW-PSO 来说,匹配波长数目 M 的增加只会对第二步的多波长优化造

成影响。而第二步多波长优化基于粒子位置调整 ω ,利用诱导粒子使迭代次数大幅减少,因而匹配波长数目 M 的增加对基于粒子位置调整 ω 的 PSO 造成的影响要远小于 ω 不变的 PSO 和基于迭代次数调整 ω 的 PSO。

表 2 不同目标谱线下三种方法的 RCWA 平均调用次数

Table 2 Average calling times of RCWA of three algorithms under different object curves

Type of target spectrum line	PSO	IDW-PSO	PDW-PSO
Single peak (SAPG)	3144.05	2590.00	224.00
Multi peaks	4994.50	3754.45	1122.10
Narrow-band	6230.00	5533.50	939.05
Broad-band	2436.00	1855.00	290.50

3.2 算法的准确度

在优化过程中,有时算法会陷入局部最优,收敛到错误的点上。用算法收敛到正确位置的运行次数占总运行次数的百分比来代表算法的准确度。在粒子数分别为 3~37 时,PSO、IDW-PSO 和 PDW-PSO 的准确度如图 7 所示。

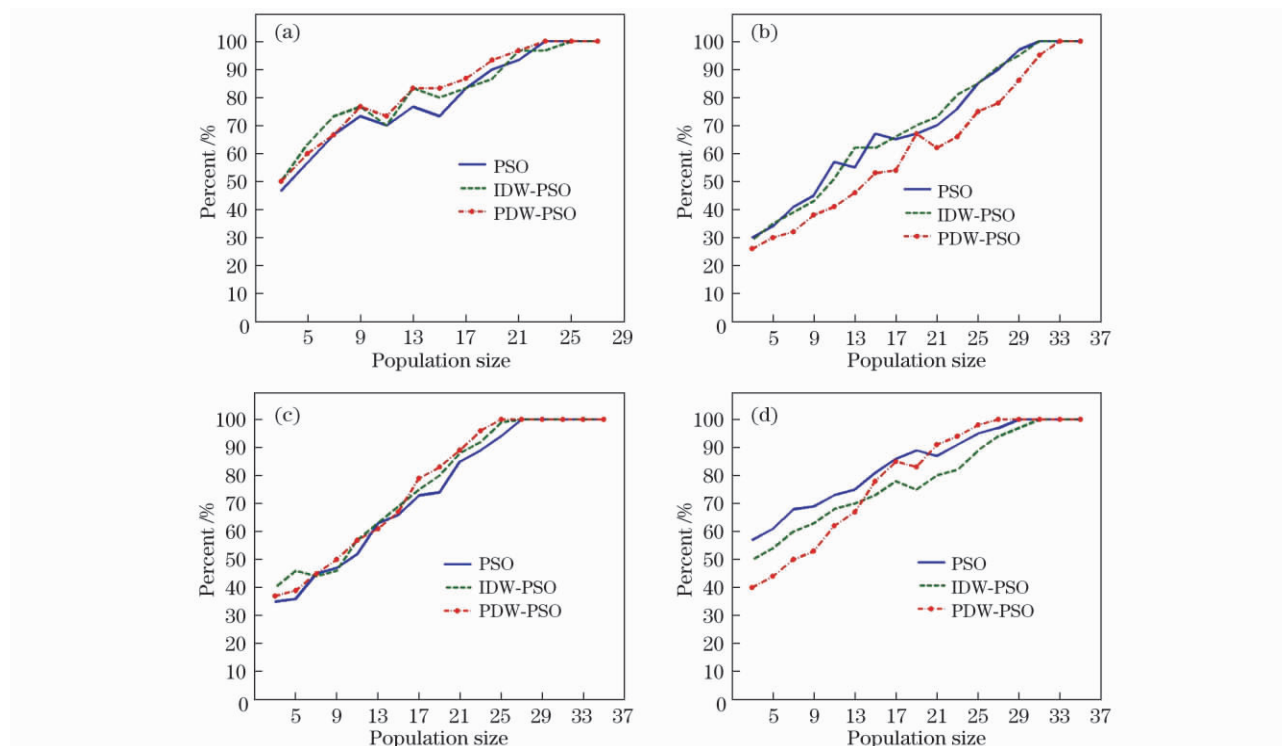


图 7 不同种群规模下三种 PSO 算法的准确度。(a)单峰谱线(亚波长角向偏振金属光栅);
(b)多峰谱线;(c)窄带谱线;(d)宽波段谱线

Fig. 7 Accuracy of three PSO algorithms under different sizes of population. (a) Single peak (SAPG);
(b) multi-peak curve; (c) narrow-band curve; (d) broad-band curve

可见,在相同粒子数下,三种算法的准确度相近,而随着粒子数的增加准确度逐渐提高,对于所研

究的亚波长角向偏振金属光栅设计来说,在粒子数达到 27 后基本都可以保证收敛到最优点;而对于较

复杂的多峰谱线,所需的粒子数更多。由于初始化时粒子在结构参数空间中的概率分布是均匀分布,因而更大粒子数可以提高最优参数附近落入粒子的概率,相应地,算法找到最优而避免落入局部最优的概率就会增大。在粒子数足够大的情况下,算法几乎可以百分之百地找到正确的最优。为了提高算法的准确度,可以选用较大的粒子数,然而,从(24)~(26)式可以看出,粒子数 N 的增加会成倍地提高 RCWA 的调用次数,导致算法效率降低。在相同情况下,基于粒子位置调整 ω 的 PSO 算法调用 RCWA 的次数较少,因而相比于 PSO 和 IDW-PSO,PDW-PSO 在提高准确度的同时又能保持较快收敛速度方面具有更大的优势。

4 结 论

针对亚波长角向偏振金属光栅的设计,提出了改进的 PDW-PSO 算法,通过中心波长寻找近似最优和多波长匹配搜索波段最优分步优化,以及基于粒子位置调整惯性权重因子减少了迭代次数,相比于 PSO 和 IDW-PSO,PDW-PSO 的平均迭代次数从 89.83 和 74 下降至 21.2;调用 RCWA 的次数从 3144.05 和 2590 下降至 224,从而提高了算法的收敛速度,并且对于多峰、窄带和宽波段目标谱线的优化,PDW-PSO 同样显示出快速收敛的优势。对算法的准确度进行了实验分析,在相同的粒子数规模下,PDW-PSO 与 IDW-PSO、PSO 的准确度相近;改进的 PDW-PSO 算法迭代次数对于粒子数规模的增加不敏感,因而当粒子数成倍增大时,总的 RCWA 调用次数的增加远小于 PSO 与 IDW-PSO,收敛速度所受影响较小。

参 考 文 献

- [1] Niziev V G, Nesterov A V. Influence of beam polarization on laser cutting efficiency[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 1999, 32(13): 1455-1461.
- [2] Weber R, Michalowski A, Abdou-Ahmed M, *et al.* Effects of radial and tangential polarization in laser material processing[J]. Physics Procedia, 2011, 12: 21-30.
- [3] Meier M, Romano V, Feurer T. Material processing with pulsed radially and azimuthally polarized laser radiation[J]. Applied Physics A, 2007, 86(3): 329-334.
- [4] Hu Y Y, He X F, Tang X H, *et al.* Polarization-sensitive resonator based on Fox-Li iterative method [J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(8): 0826001.
- [5] 胡友友, 何小凤, 唐霞辉, 等. 基于 Fox-Li 迭代法的偏振敏感谐振腔 [J]. 光学学报, 2017, 37(8): 0826001.
- [6] Niz'Ev V G, Yakunin V P, Turkin N G. Generation of polarisation-nonuniform modes in a high-power CO₂ laser[J]. Quantum Electronics, 2009, 39(6): 505-514.
- [7] Zhao J, Li B, Zhao H, *et al.* Generation of azimuthally polarized beams in fast axial flow CO₂ laser with hybrid circular subwavelength grating mirror[J]. Applied Optics, 2014, 53(17): 3706-3711.
- [8] Kämpfe T, Tonchev S, Tishchenko A V, *et al.* Azimuthally polarized laser mode generation by multilayer mirror with wideband grating-induced TM leakage in the TE stopband[J]. Optics Express, 2012, 20(5): 5392-5401.
- [9] Bräuer R, Bryngdahl O. Design of antireflection gratings with approximate and rigorous methods[J]. Applied Optics, 1994, 33(34): 7875-7882.
- [10] Cory H, Zach C. Wave propagation in metamaterial multi-layered structures[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 2004, 40(6): 460-465.
- [11] Zhang Z M, Fu C J. Unusual photon tunneling in the presence of a layer with a negative refractive index[J]. Applied Physics Letters, 2002, 80(6): 1097-1099.
- [12] Haus J W. Photonic band structures [M]// Ducloy M, Bloch D. Quantum optics of confined systems. Dordrecht: Springer, 1996: 101-141.
- [13] Richter I, Sun P C, Xu F, *et al.* Design considerations of form birefringent microstructures [J]. Applied Optics, 1995, 34(14): 2421-2429.
- [14] Shore B W, Perry M D, Britten J A, *et al.* Design of high-efficiency dielectric reflection gratings[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1997, 14(5): 1124-1136.
- [15] Lee B J, Wang L P, Zhang Z M. Coherent thermal emission by excitation of magnetic polaritons between periodic strips and a metallic film[J]. Optics Express, 2008, 16(15): 11328-11336.
- [16] Kennedy J, Eberhart R. Particle swarm optimization [C]// Proceedings of ICNN'95-International Conference on Neural Networks, November 27-December 1, 1995, Perth, WA, Australia. New York: IEEE, 1995: 1942-1948.
- [17] Eberhart R, Kennedy J. A new optimizer using particle swarm theory[C]// Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science, October 4-6, 1995, Nagoya, Japan. New York: IEEE, 1995: 39-43.
- [18] Liu Y M, Yu Z Y, Yang H B, *et al.* Numerical

- optimization and simulation to wavelength-division multiplexing isolation filter consisted of two identical long period fiber grating[J]. Optics Communications, 2005, 246(4/5/6): 367-372.
- [18] Le D, Tran Q, Lee S, *et al.* Ultra broadband absorption of SPPs enhanced dual grating thin film CIGS solar cell enabled by particle swarm optimization[J]. Journal of the Optical Society of Korea, 2014, 18(5): 429-435.
- [19] Shokooh-Saremi M, Magnusson R. Particle swarm optimization and its application to the design of diffraction grating filters[J]. Optics Letters, 2007, 32(8): 894-896.
- [20] Shi Y H, Eberhart R C. Parameter selection in particle swarm optimization[M]//Porto V W, Saravanan N, Waagen D, *et al.* Evolutionary programming VII. Lecture notes in computer science. Berlin, Heidelberg: Springer, 1998, 1447: 591-600.
- [21] Shi Y, Eberhart R. A modified particle swarm optimizer[C]//1998 IEEE International Conference on Evolutionary Computation, May 4-9, 1998, Anchorage, AK, USA. New York: IEEE, 1998: 69-73.
- [22] Shi Y, Eberhart R C. Empirical study of particle swarm optimization[C]//Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation-CEC99 (Cat. No. 99TH8406), July 6-9, 1999, Washington, D. C., USA. New York: IEEE, 1999: 1945-1950.
- [23] Guo W, Li Z, Gao H, *et al.* Design of infrared polarizer based on sub-wavelength metal wire grid[J]. Proceedings of SPIE, 2013, 8759: 87593I.
- [24] Eberhart R C, Shi Y. Comparing inertia weights and constriction factors in particle swarm optimization[C]//Proceedings of the 2000 Congress on Evolutionary Computation, July 16-19, 2000, La Jolla, CA, USA. New York: IEEE, 2000: 84-88.
- [25] Clerc M, Kennedy J. The particle swarm-explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6(1): 58-73.
- [26] Carlisle A, Dozier G. An off-the-shelf PSO[C]//Proceedings of the Workshop on Particle Swarm Optimization 2001, Purdue School of Engineering and Technology, Indianapolis, IN, USA. [S.l.: s.n.], 2001: 1-6.
- [27] Zhang H R, Yuan M, Liang Y T, *et al.* A novel particle swarm optimization based on prey-predator relationship[J]. Applied Soft Computing, 2018, 68: 202-218.
- [28] Rapać M R, Kanović Ž. Time-varying PSO-convergence analysis, convergence-related parameterization and new parameter adjustment schemes[J]. Information Processing Letters, 2009, 109(11): 548-552.
- [29] Moharam M G, Gaylord T K. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America, 1981, 71(7): 811-818.
- [30] Moharam M G, Gaylord T K. Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America, 1983, 73(9): 1105-1112.