

一种基于Rouard方法与太赫兹频谱的非极性材料检测方法

技术领域

本发明涉及太赫兹脉冲信号处理及材料检测领域，尤其涉及一种基于太赫兹脉冲频谱与差分进化算法的非极性材料检测方法。

背景技术

太赫兹波在电磁波谱中介于微波与红外光波之间，属于远红外波段，通常认为它的频率范围在 0.1THz~10THz，波长范围在 0.03~3mm，太赫兹的特殊位置决定了太赫兹科学综合了电子学与光子学的特色，是典型的前沿交叉学科，研究太赫兹波的机理和应用方法，具有重大的科学意义。

随着工业 4.0 的时代的到来，对先进制造提出了更高的要求，在生产线上实现在线、非接触的无损高精度检测是必然趋势。太赫兹波(Terahertz Wave)对非极性材料有高穿透性，并且由光子能量低、空间和时间分辨率高和指纹谱等优良特性。因此，与太赫兹相关的检测技术在无损检测技术里面有较大的发展空间。

与确定性寻优算法相比，随机优化方法提供了诸多便利。该类算法基于随机性、统计性和概率性，增大了得到全局最优值的概率，对于不可微、非连续、非线性、噪声和多维的目标函数，具有复杂的局部极小值的搜索空间。目前较为成熟的随机优化算法有差分进化算法 DE，遗传算法 GA，粒子群优化算法 PSO。

在太赫兹材料检测领域，如何对获得的太赫兹信号进行有效准确的分析是其中的关键。GA、DE 等随机优化算法的发展，为求解材料的光学参数提供了更加稳定可靠的选择，借助计算机便可实现参数的自动计算。因此，将随即最优化算法与太赫兹信号处理相结合具有重要的实际意义与研究意义。

发明内容

本发明提出了一种基于最优化算法的高精度太赫兹脉冲时域光谱涂层厚度测量方法，包括以下步骤：

S1: 用太赫兹时域光谱反射系统获得反射基底的参考信号 $E_{ref}(t)$ 和材料样品测量信号 $E_{mea}(t)$ ；

S2: 将参考信号 $E_{ref}(t)$ 和材料样品的测量信号 $E_{mea}(t)$ 输入计算机；

S3: 根据光谱仪的有效频段对输入的 $E_{ref}(t)$ 、 $E_{mea}(t)$ 信号在频域进行截取；

S4: 设定材料参数，如材料层数、厚度范围等；

S5: 用最优化算法求解参数最优解；

S5.1: 根据材料不同层数选择不同的数学模型；

根据Rouard方法， l 层材料的太赫兹波传递函数为：

$$\begin{aligned}
 H_l &= \frac{r_{l-1,l} + r_{l,l+1}e^{-2j\varphi_l}}{1 + r_{l-1,l}r_{l,l+1}e^{-2j\varphi_l}} \\
 H_{l-1} &= \frac{r_{l-2,l-1} + r_{l-1,l}e^{-2j\varphi_{l-1}}}{1 + r_{l-2,l-1}r_{l-1,l}e^{-2j\varphi_{l-1}}} \\
 H_{l-1,total} &= \frac{r_{l-2,l-1} + H_l e^{-2j\varphi_{l-1}}}{1 + r_{l-2,l-1}H_l e^{-2j\varphi_{l-1}}} \\
 H_{l-2,total} &= \frac{r_{l-3,l-2} + H_{l-1,total} e^{-2j\varphi_{l-2}}}{1 + r_{l-3,l-2}H_{l-1,total} e^{-2j\varphi_{l-2}}} \\
 &\dots \\
 H_{total} = H_{1,total} &= \frac{r_{1,2} + H_{2,total} e^{-2j\varphi_1}}{1 + r_{1,2}H_{2,total} e^{-2j\varphi_1}}
 \end{aligned}$$

其中，

$$r_{l-1,l} = \frac{n_l - n_{l-1}}{n_l + n_{l-1}}, \quad n_l = \sqrt{\varepsilon_l}, \quad \varphi_l = \frac{n_l \omega d_l}{c}。$$

相对于反射基底而言，第 l 层为底层，第1层为表层。 H_l 、 H_{l-1} 为第 l 层、第 $l-1$ 层材料的传递函数， $H_{l-1,total}$ 为第 l 层、第 $l-1$ 材料的总传递函数，同理可得 $H_{l-2,total}$ 。 H_{total} 为 l 层材料的总传递函数； n_l 、 ε_l 为第 l 层材料的折射率和介电常数， d_l 为第 l 层材料的厚度
 c 为光速。

S5.2: 设置误差函数；

$$\text{误差函数 } Y \text{ 定义为 } Y = \sum_j (E_{mea}(t_j) - E_{sim}(t_j))^2$$

$E_{sim}(t) = F^{-1}(H_{total} \times F(E_{ref}(t)))$ ，其中 H_{total} 为被检测材料的总传递函数， F 为信号的傅里叶变换， F^{-1} 为其逆变换。

S5.3: 令误差函数 Y 达到最小值，获取材料参数；

误差函数 Y 定义为：

$$Y = \sum_j (E_{mea}(t_j) - E_{sim}(t_j))^2$$

将误差函数 Y 作为差分进化算法的目标函数，寻求该误差函数的最小值。当函数 Y 的函数值达到最小时，即可获得每层材料的参数 n_l 、 ε_l 、 d_l 。

S6: 输出计算结果并绘制图像。

附图说明

通过参考附图会更清楚的理解本发明的特征和优点，附图是示意性的而不应理解为对本发明的任何限制，附图为利用本算法处理信号的一个具体实例：

图 1 为算法流程图

图 2 为拟合信号 $E_{sim}(t)$ 与测量信号 $E_{mea}(t)$ 对比图；

图 3 为误差随迭代次数变化图；

图 4 为计算结果示例图

图 5 为材料参数计算结果示意图

具体实施方式

S1: 用太赫兹时域光谱反射系统获得反射基底的参考信号 $E_{ref}(t)$ 和材料样品测量信号 $E_{mea}(t)$ ；

利用太赫兹时域反射光谱（THz-RTDS）分别对反射基底与放置在基底上的样品进行测量，获得参考信号 $E_{ref}(t)$ 和样品测量信号 $E_{mea}(t)$ 。

S2: 将参考信号 $E_{ref}(t)$ 和材料样品的测量信号 $E_{mea}(t)$ 输入计算机；

通过信号采集模块，将太赫兹时域反射光谱获取的参考信号和测量信号输入计算机。

S3: 根据光谱仪的有效频段对输入的 $E_{ref}(t)$ 、 $E_{mea}(t)$ 信号在频域进行截取；

不同光谱仪的有效稳定频段不同，根据实际情况在频域对输入的信号进行截取。例如，光谱仪有效频段为 0.2—3THz，对信号进行截取时，只保留该信号在 0.2—3THz 频段的频率成分。

S4: 设定材料参数，如材料层数、厚度范围等；

设定被检测材料的层数，程序将根据该层数选择不同的数学模型。比较准确的厚度范围可以另参数求解结果更加准确。

S5: 用最优化算法求解参数最优解;

S5.1: 根据材料不同层数选择不同的数学模型;

根据Rouard方法, l 层材料的太赫兹波传递函数为:

$$\begin{aligned}
 H_l &= \frac{r_{l-1,l} + r_{l,l+1}e^{-2j\varphi_l}}{1 + r_{l-1,l}r_{l,l+1}e^{-2j\varphi_l}} \\
 H_{l-1} &= \frac{r_{l-2,l-1} + r_{l-1,l}e^{-2j\varphi_{l-1}}}{1 + r_{l-2,l-1}r_{l-1,l}e^{-2j\varphi_{l-1}}} \\
 H_{l-1,total} &= \frac{r_{l-2,l-1} + H_l e^{-2j\varphi_{l-1}}}{1 + r_{l-2,l-1}H_l e^{-2j\varphi_{l-1}}} \\
 H_{l-2,total} &= \frac{r_{l-3,l-2} + H_{l-1,total} e^{-2j\varphi_{l-2}}}{1 + r_{l-3,l-2}H_{l-1,total} e^{-2j\varphi_{l-2}}} \\
 &\dots \\
 H_{total} = H_{1,total} &= \frac{r_{1,2} + H_{2,total} e^{-2j\varphi_1}}{1 + r_{1,2}H_{2,total} e^{-2j\varphi_1}}
 \end{aligned}$$

其中,

$$r_{l-1,l} = \frac{n_l - n_{l-1}}{n_l + n_{l-1}}, \quad n_l = \sqrt{\varepsilon_l}, \quad \varphi_l = \frac{n_l \omega d_l}{c}.$$

相对于反射基底而言, 第 l 层为底层, 第1层为表层。 H_l 、 H_{l-1} 为第 l 层、第 $l-1$ 层材料的传递函数, $H_{l-1,total}$ 为第 l 层、第 $l-1$ 材料的总传递函数, 同理可得 $H_{l-2,total}$ 。 H_{total} 为 l 层材料的总传递函数; n_l 、 ε_l 为第 l 层材料的折射率和介电常数, d_l 为第 l 层材料的厚度
 c 为光速。

S5.2: 设置误差函数;

$$\text{误差函数 } Y \text{ 定义为 } Y = \sum_j (E_{mea}(t_j) - E_{sim}(t_j))^2$$

$$E_{sim}(t) = F^{-1}(H_{total} \times F(E_{ref}(t))), \text{ 其中 } H_{total} \text{ 为被检测材料的总传递函数, } F \text{ 为信号}$$

的傅里叶变换, F^{-1} 为其逆变换。

S5.3: 令误差函数 Y 达到最小值, 获取材料参数;

误差函数 Y 定义为:

$$Y = \sum_j (E_{mea}(t_j) - E_{sim}(t_j))^2$$

将误差函数 Y 作为差分进化算法的目标函数，寻求该误差函数的最小值。当函数 Y 的函数值达到最小时，即可获得每层材料的参数 n_l 、 ε_l 、 d_l 。

S6: 输出计算结果并绘制图像。

图 4 示出了各个参数的计算结果，在该实例中：

$$d_2 = 23.26\mu m$$

$$d_3 = 57.14\mu m$$

$$\text{误差函数最小值 } Y_{\min} = 377.87$$

完成了对双层样品材料参数的测量工作。

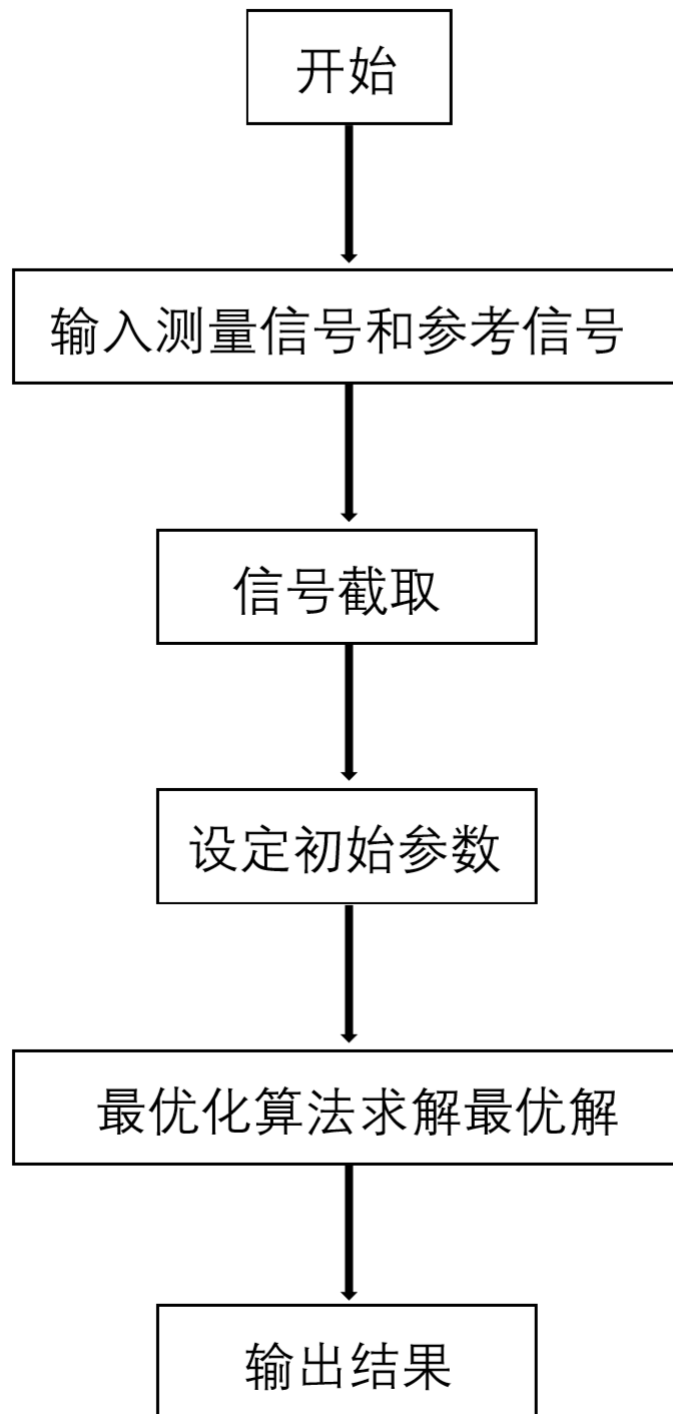


图 1

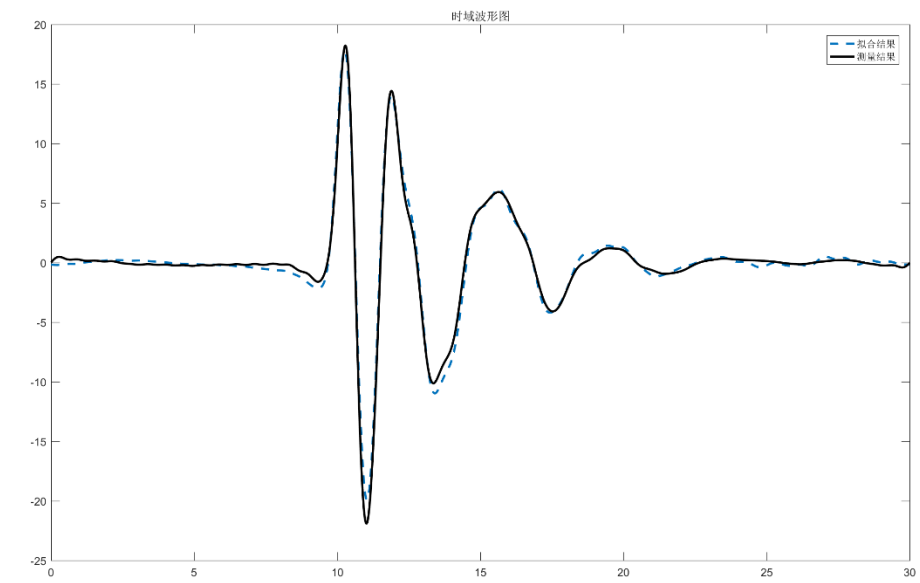


图 2

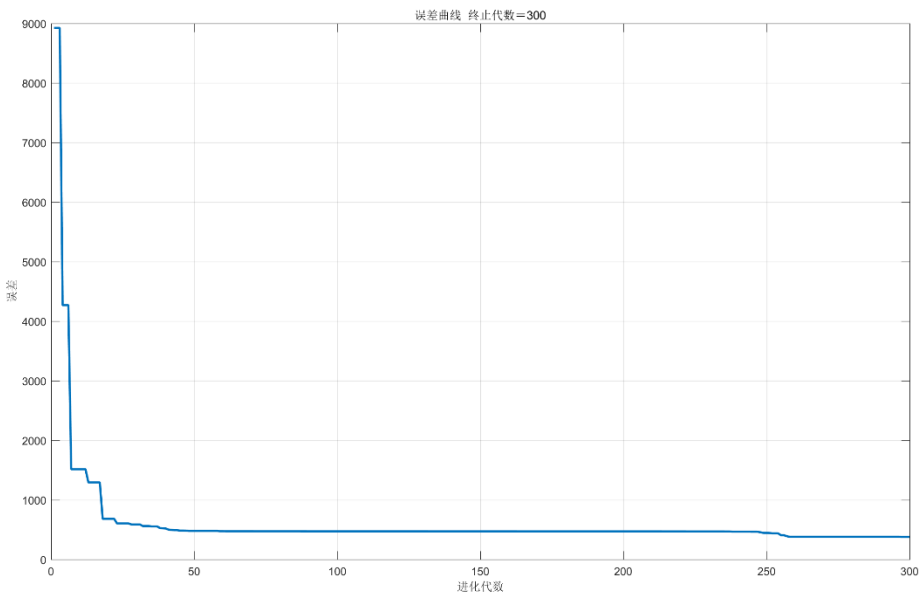


图 3

*****表层油漆的模型参数及厚度*****

lorentz2 =

1.0e+03 *

0.0186 1.4108 1.0222 1.9732

d2 =

23.2591

*****底层油漆的模型参数及厚度*****

lorentz3 =

1.0e+03 *

0.0034 0.1254 0.1063 2.9262

d3 =

57.1440

*****参考位置*****

d =

315.6744

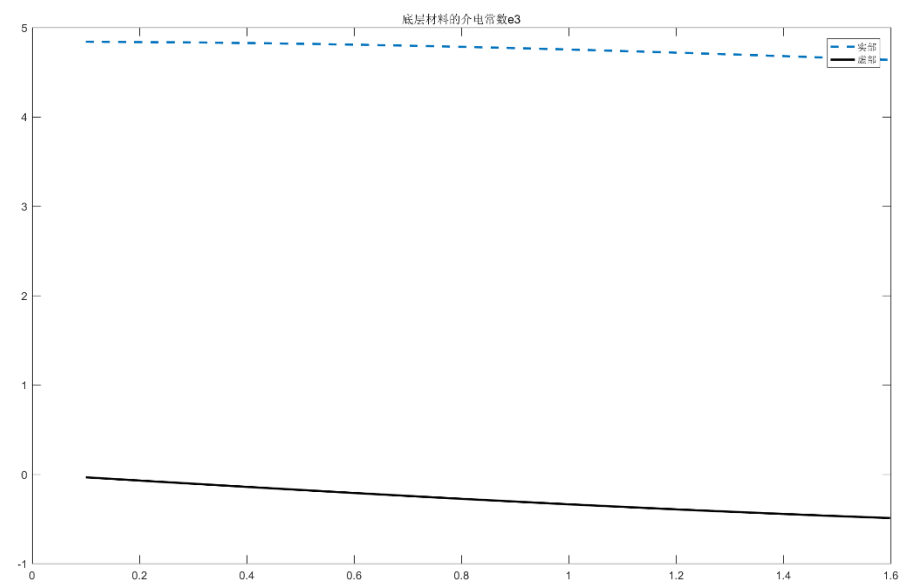
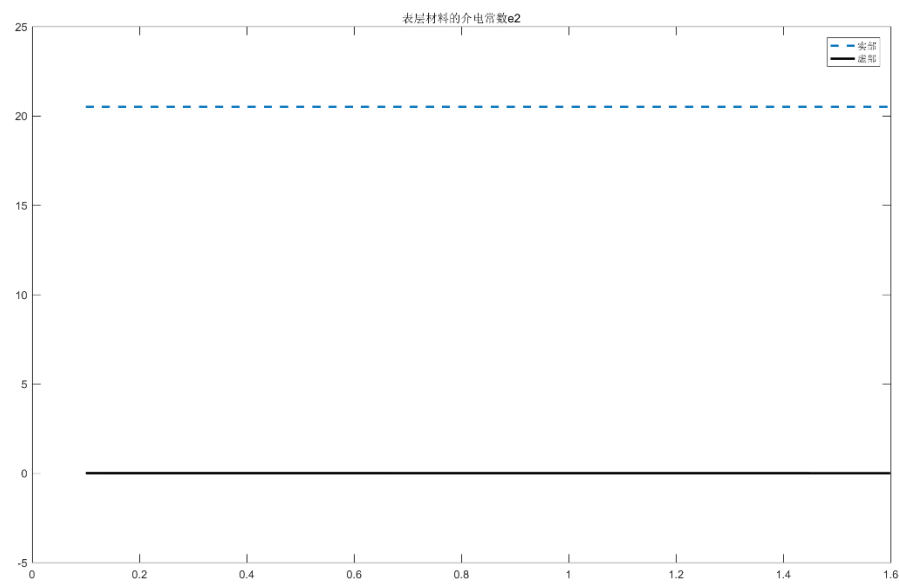
*****最终误差*****

ans =

377.8689

图 4

说明书



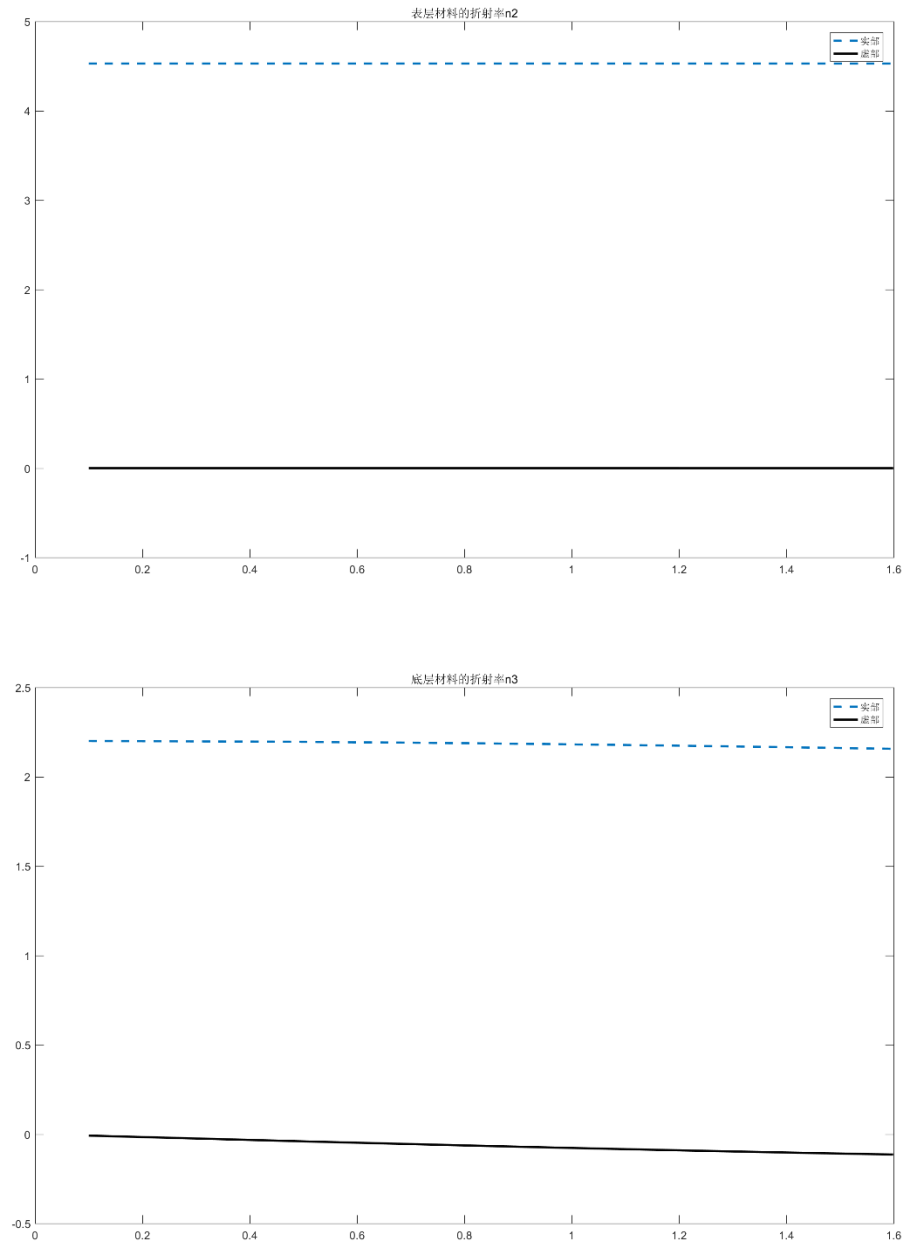


图 5