

doi:10.3788/gzxb20154403.0319003

# 智能算法在晶体色散方程参量反演中的比较研究

王安祥,朱长军,张晓军

(西安工程大学 理学院,西安 710048)

**摘 要:** 为了研究智能优化算法在不同晶体材料色散方程参数反演中的迭代搜索性能问题,根据已测石英和方解石晶体的实验数据,分别采用遗传算法、模拟退火算法和遗传模拟退火算法应用于晶体色散方程的参数反演中,获得了晶体修正的塞耳迈耶尔方程的参量,同时比较了三种算法在迭代搜索性能、算法稳定性、计算时间和差方和等之间的差异,结果表明,三种算法在晶体色散方程参数反演时都可以得到满意的结果,但是,由于遗传模拟退火算法同时具备遗传算法的快速全局搜索性能和模拟退火算法的极强局部搜索性能,使得在晶体色散方程参数反演中的优化效果更优.因此在建立其它材料色散方程时建议采用遗传模拟退火算法,而且这一结果对研究混合智能算法的迭代搜索性能也是有帮助的.

**关键词:** 智能算法;遗传模拟退火算法;反演;色散方程;遗传算法;模拟退火算法

中图分类号: O436

文献标识码: A

文章编号: 1004-421(2015)03-0319003-8

## Research on Comparison of Intelligent Optimization Algorithms in the Parameters Retrieval of Crystal Dispersion Equation

WANG An-xiang, ZHU Chang-jun, ZHANG Xiao-jun

(School of science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China)

**Abstract:** In order to study iteration searching properties of intelligent optimization algorithms parameters in dispersion equations of different crystal material, genetic algorithm, simulated annealing algorithm and genetic simulated annealing algorithm were employed, respectively, to obtain the coefficients of the improved Sellmeier equation for quartz crystal and calcite crystal according to the measured experimental data. Meanwhile, the differences of iteration searching property, algorithm stability, computation time and sum of squares of deviations in the three algorithms were compared. The results show that the three algorithms are all feasible in terms of coefficients retrieval in the dispersion equation, however, genetic simulated annealing algorithm have rapid large-scale search and strong local search performance deriving from the genetic algorithm and simulated annealing algorithm respectively. It makes optimization results of crystal dispersion equation parameters in inversion to be better. Therefore, we recommend using the genetic simulated annealing algorithm to obtain dispersion equations for other materials. The aforementioned results are of help to the study of iteration searching properties of mixed intelligent algorithms.

**Key words:** Intelligent optimization algorithms; Genetic Simulated Annealing Algorithm (GSAA); Dispersion equations; Retrieval ; Genetic Algorithm (GA); Simulated Annealing Algorithm (SA)

**OCIS Codes:** 190.3970; 150.1135; 100.3190; 160.4760; 130.4310

## 0 引言

色散是光学材料的重要特性,在设计光学元件时

需要知道所用材料的折射率及色散特性,但在通常计算中,并没有考虑材料的色散效应,即光学材料折射率的取值均为常数,这样会导致理论计算结果和实验测

基金项目:陕西省自然科学基金(No. 2012JM1011)、陕西省教育厅科研项目(No. 14JK1301)和陕西省普通高校重点学科建设专项资金建设项目(2008)169 资助

第一作者:王安祥(1974-),男,副教授,硕士,主要研究方向为目标光散射特性和颜色光学等. Email: waxiang0921@126.com

收稿日期:2014-09-03;录用日期:2014-11-10

<http://www.photon.ac.cn>

量数据在某一波长范围内并不太相符. 若要知道光学材料在不同波长下的折射率,一方面可以通过实验直接测量材料在不同波长下的折射率,而更方便的方法是用色散公式计算所需波长折射率的近似值,因此建立不同光学材料的色散方程是很有必要的. 国内学者对不同光学材料的色散效应进行了研究,白一鸣分析了在考虑材料折射率色散效应情况下,采用矩阵法分别计算了硅太阳能电池减反射膜和 GaAs 太阳能电池双层减反射膜的反射率与波长的函数关系<sup>[1-2]</sup>. 刘华松研究了在膜层材料存在折射率色散情况下,等厚与非等厚周期结构薄膜的反射区中心波长和反射带宽的特性<sup>[3]</sup>. 李红霞对修正的 Sellmeier 方程(塞氏方程)严格求解,得出了冰洲石晶体的系数表达式,然后研究了冰洲石晶体在不同温度下色散变化规律<sup>[4]</sup>. 苏富芳通过求解塞耳迈耶尔方程和四次拟合的方法,得出了塞耳迈耶尔方程的常数与温度的关系式,从而可以获得在任意温度下石英晶体的旋光色散特性<sup>[5]</sup>. 目前,国内学者也开始研究通过智能优化算法确定一些模型的未知参量,周全分别将模拟退火算法和遗传算法用于 Cauchy 色散方程的系数反演中<sup>[6]</sup>. 郭春依据 MgF<sub>2</sub> 单层膜在不同入射角下的反射光谱,采用遗传模拟退火算法确定了 MgF<sub>2</sub> 薄膜在 170 ~ 260nm 波段的折射率和物理厚度<sup>[7]</sup>. 王党社将差异进化算法应用于椭偏数据的反演计算中,获得了所测薄膜的光学常数<sup>[8]</sup>. 王安祥将遗传模拟退火算法应用于光散射模型的参数反演中,获得 BRDF 模型中的九个参数<sup>[9]</sup>. 本文根据文献[10]已测光学晶体的实验数据,分别将遗传算法、模拟退火算法、遗传模拟退火算法应用于石英和方解石晶体色散方程的参数反演中,建立了晶体的色散方程,并对三种智能算法在参数反演中的性能进行了分析与比较.

## 1 基本理论

### 1.1 介质的色散方程

所研究的色散波段在正常色散范围内,对于正常色散区的色散,最早是由 Cauchy 通过实验总结得到经验公式,即

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (1)$$

式中  $A$ 、 $B$ 、 $C$  是由所研究的介质特性决定的常数,只要测出 3 个已知波长下的折射率值,然后解 3 个联立方程即得. 对于可见光频段的透明材料来说,式(1)具有相当高的准确度.

Sellmeier 在弹性以太理论上得到一个色散公式为<sup>[11]</sup>

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} \quad (2)$$

式中  $\lambda$  为入射光在真空中的波长(单位  $\mu\text{m}$ ),  $B$  是与吸

收能带有关的常量,  $C$  为媒质的吸收波长,在材料的正常色散波长范围内,上述公式只考虑物质中微粒振动的作用,且在色散公式中只考虑一个固有振动频率的影响.

若要更精确地描述光学材料在正常色散波长范围内的色散特性,则需要进一步考虑原子核振动的影响,即远红外共振的影响,可在公式中加上修正项,得到修正的 Sellmeier 方程为<sup>[12]</sup>

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2 \quad (3)$$

式中  $D$  为远红外修正有关的常量.

### 1.2 三种智能算法

基本遗传算法可描述为<sup>[13]</sup>: ① 进化代数计算器初始化:  $t \leftarrow 0$ ; ② 遗传算法部分初始化,设置最大进化代数、群体规模、编码设置、交叉概率、变异概率; ③ 随机产生初始群体  $p(t)$ , 评价群体  $p(t)$  的适应度; ④ 个体选择操作:  $p'(t) \leftarrow \text{Select}[p(t)]$ , 这里采用比例选择方法,其基本思想是:各个个体被选中的概率与其适应度大小成正比; ⑤ 个体交叉操作:  $p''(t) \leftarrow \text{Crossover}[p'(t)]$ ; ⑥ 个体变异操作:  $p'''(t) \leftarrow \text{Mutation}[p''(t)]$ ; ⑦ 评价群体  $p'''(t)$  的适应度; ⑧ 终止条件判断,如不满足终止条件,则:  $t \leftarrow t+1$ ,  $p(t+1) \leftarrow p'''(t)$ , 转到第 ⑤ 步,继续进化过程; 如满足终止条件,则:输出当前最优个体,算法结束.

遗传模拟退火算法则是将遗传算法与模拟退火算法相结合而构成的一种优化算法<sup>[14]</sup>,它在利用遗传算法进行参数优化的基础上,引入模拟退火算法,抑制了遗传算法的早熟现象,克服了其局部寻优能力较差的缺点. 具体步骤与基本遗传算法类似,不同的是需要在遗传算法过程 ② 和 ③ 之间加入一个初始化模拟退火部分,即设置初始温度  $T_0$ 、温度下降系数  $\alpha$ ; 然后在遗传算法过程 ⑥ 与 ⑦ 之间加入个体模拟退火算法操作部分,即引入 Metropolis 准则,以交叉概率  $p_c$  进行交叉操作,判断是否接受新个体. 如果新得到的子代个体优于父代,用子代个体替代父代; 否则以 Metropolis 准则接受子代个体,  $p^*(t) \leftarrow \text{SimulatedAnnealing}[p'''(t)]$ ; 再将 ⑦ 改为评价群体  $p^*(t)$  的适应度; 最后在 ⑧ 中加入一个条件:若不满足终止条件,则按照温度参数  $T_0 = \alpha T_0$  降低温度,其他条件不变.

模拟退火算法的具体实现过程在许多文献中都有详细论述<sup>[15]</sup>,这里不再重复.

## 2 计算过程与结果分析

以修正的塞氏方程作为色散方程进行参数反演,因此待优化的参量有  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $D$  4 个,为了方便比较三种算法性能,4 个参量的范围均设为  $A \in (0, 10)$ ,  $B \in (0, 0.5)$ ,  $C \in (0, 0.1)$ ,  $D \in (0, 0.5)$ . 将实验数据和所

反演的塞氏方程的拟合值的差方和  $s = \sum (n - n')^2$  作为目标函数,式中  $n'$  为方程的拟合值,  $n$  为实验测量值,目标函数  $s$  的取值是以最小为最优. 以下程序运行所用计算机为同一配置,CPU 频率为 2.81 G,内存为 512 M.

### 2.1 石英晶体的三种算法结果

根据文献[10]中石英晶体在 23℃ 下光谱区域(0.198 ~ 2.053 1 μm)的折射率值,分别利用三种算法所编程序进行参量反演.

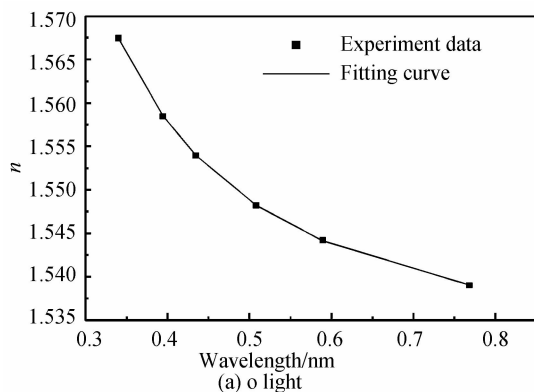
#### 2.1.1 遗传算法计算结果

基本遗传算法参数设置如下:种群规模大小  $M = 100$ ;最大遗传代数  $\text{maxgen} = 1000$ ;交叉概率  $p_c = 0.7$ ;变异概率  $p_m = 0.01$ .

首先根据文献[10]中石英晶体在 23℃ 下光谱区域(0.340 ~ 0.768 μm)的折射率值,通过基本遗传算法参数反演,获得石英晶体在该光谱区的塞氏方程表达式为

$$\begin{cases} n_o^2 = 2.35213 + \frac{1.18 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 3.585 \times 10^{-3}} - 5.979 \times 10^{-3} \cdot \lambda^2 \\ n_e^2 = 2.37990 + \frac{1.199 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 5.513 \times 10^{-3}} - 6.998 \times 10^{-3} \cdot \lambda^2 \end{cases} \quad (4)$$

由 MATLAB 计算程序可得石英晶体 o 光和 e 光拟合结



果的差方和:o 光为  $s_o = \sum_{i=1}^6 (n_o - n'_o)^2 = 1.90 \times 10^{-8}$ ,

e 光为  $s_e = \sum_{i=1}^6 (n_e - n'_e)^2 = 2.52 \times 10^{-8}$ . 而文献[12]给

出了石英晶体在 23℃ 下可见光区的塞氏方程表达式,经过计算,得到该方程的拟合结果的差方和:o 光为  $s_o = 7.99 \times 10^{-7}$ ,e 光为  $s_e = 6.42 \times 10^{-6}$ . 显然,利用基本遗传算法使得拟合的总体效果进一步提高,差方和减少 1 个数量级还要多. 图 1 表明石英晶体实验数据与所得塞氏方程拟合曲线符合得相当好. 根据文献[10]中石英晶体在 23℃ 下光谱区域(0.198 ~ 2.053 1 μm)的折射率值,通过基本遗传算法参数反演,获得石英晶体在该光谱区的塞氏方程表达式. 表 1 给出了石英晶体(o 光)的塞氏方程系数在某次遗传算法不同迭代次数下的反演结果,结果显示,迭代次数较小的情况下,所得塞氏方程拟合结果差方和已经较小,说明遗传算法可以用很快的速度寻找到一个较好解,显示遗传算法全局搜索能力极强,随着迭代次数的增加,所得塞氏方程拟合结果差方和精度虽然在提高,但是所提高精度比较缓慢,而且即使花费很长时间也很难得到最优解,只能得到次优解,表明它的局部搜索能力不足.

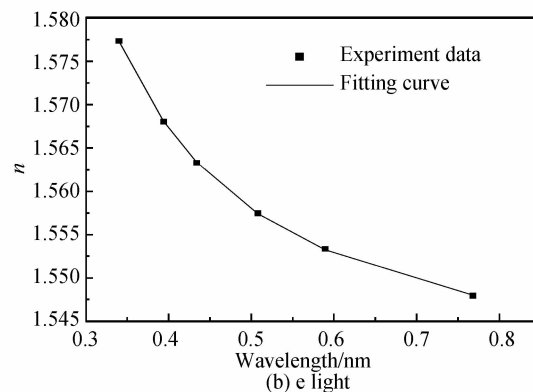


图 1 石英晶体的实验数据和塞氏方程的拟合曲线

Fig. 1 Experimental data and fitting curve of Sellmeier equation for quartz crystal

表 1 石英晶体(o 光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)某次遗传算法不同迭代次数下参量反演结果

Table 1 The retrieval results of quartz (o light) by a genetic algorithm under different iterations in spectral region (0.198 ~ 2.053 1 μm)

Iterations	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Time
50	$A = 2.38414, B = 5.894 \times 10^{-3}, C = 2.192 \times 10^{-2}, D = 2.055 \times 10^{-2}$	$2.65 \times 10^{-4}$	1.0 s
100	$A = 2.37658, B = 6.282 \times 10^{-3}, C = 2.184 \times 10^{-2}, D = 1.824 \times 10^{-2}$	$1.88 \times 10^{-4}$	2.6 s
200	$A = 2.37325, B = 7.298 \times 10^{-3}, C = 1.909 \times 10^{-2}, D = 1.719 \times 10^{-2}$	$1.01 \times 10^{-4}$	5.2 s
400	$A = 2.36523, B = 9.057 \times 10^{-3}, C = 1.428 \times 10^{-2}, D = 1.454 \times 10^{-2}$	$2.19 \times 10^{-5}$	10.5 s
800	$A = 2.35856, B = 1.031 \times 10^{-2}, C = 1.122 \times 10^{-2}, D = 1.211 \times 10^{-2}$	$1.42 \times 10^{-6}$	20.9 s
1000	$A = 2.35743, B = 1.056 \times 10^{-2}, C = 1.057 \times 10^{-2}, D = 1.172 \times 10^{-2}$	$4.65 \times 10^{-7}$	26.2 s

石英晶体(e 光)遗传算法参数设置与石英晶体(o 光)相同,通过多次运行遗传算法,寻找到差方和最小所对应的塞氏方程参量,获得石英晶体(e 光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)范围内的修正的塞氏方程为

$$n_e^2 = 2.3841 + \frac{1.11 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.04 \times 10^{-2}} - 1.21 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \quad (5)$$

经过计算,得到该方程的拟合结果的差方和为

$$s_e = \sum_{i=1}^{19} (n_e - n'_e)^2 = 7.58 \times 10^{-8},$$

程序运行时间为 25.3 s. 石英晶体(o 光)在光谱区(0.198 ~ 2.0531 μm)遗传算法多次运行所得参量反演结果如表 2 所示,很明显 5 次得到的优化结果均不相同,说明基本遗传算法性能不稳定.

表 2 石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)基本遗传算法多次运行所得参量反演结果

Table 2 The retrieval results of quartz (o light) by multiple runs of the genetic algorithm in spectral region(0.198 ~ 2.053 1 μm)

The i time	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Time
1	$A = 2.35743, B = 1.056 \times 10^{-2}$	$4.64 \times 10^{-7}$	26.2 s
	$C = 1.057 \times 10^{-2}, D = 1.172 \times 10^{-2}$		
2	$A = 2.35647, B = 1.079 \times 10^{-2}$	$2.66 \times 10^{-7}$	25.6 s
	$C = 9.991 \times 10^{-3}, D = 1.141 \times 10^{-2}$		
3	$A = 2.35696, B = 1.068 \times 10^{-2}$	$2.88 \times 10^{-7}$	25.5 s
	$C = 1.027 \times 10^{-2}, D = 1.157 \times 10^{-2}$		
4	$A = 2.35661, B = 1.076 \times 10^{-2}$	$2.57 \times 10^{-7}$	27.2 s
	$C = 1.006 \times 10^{-2}, D = 1.145 \times 10^{-2}$		
5	$A = 2.35624, B = 1.085 \times 10^{-2}$	$3.17 \times 10^{-7}$	28.2 s
	$C = 9.846 \times 10^{-3}, D = 1.133 \times 10^{-2}$		

2.1.2 模拟退火算法结果

模拟退火算法参数设置如下:初始温度参量  $T_0 = 1000$ ,终止温度  $T = 0.001$ ,马可夫链长度  $L = 10000$ ,步长因子  $step = 0.02$ .这里采用的退火方法是指指数降温策略,即  $t_{k+1} = \alpha t_k$ ,其中  $k \geq 0, 0 < \alpha < 1, \alpha$ 为温度衰减参数,这里取  $\alpha = 0.95$ .模拟退火算法是一种个体寻优算法,具有较强的局部搜索能力,但它不适合全局搜索,且其搜索效率很低,存在收敛速度慢,执行时间长等缺点.

多次运行模拟退火算法后,从结果中选取差方和最小所对应的一组塞氏方程的系数,获得石英晶体在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)内的塞氏方程为

$$\begin{cases} n_o^2 = 2.35624 + \frac{1.064 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.05 \times 10^{-2}} - 1.139 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \\ n_e^2 = 2.38407 + \frac{1.146 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 9.032 \times 10^{-3}} - 1.186 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \end{cases} \quad (6)$$

由 MATLAB计算程序可得石英晶体o光和e光拟合结果的差方和:o光为  $s_o = \sum_{i=1}^{19} (n_o - n'_o)^2 = 9.42 \times 10^{-7}$ , e光为  $s_e = \sum_{i=1}^{19} (n_e - n'_e)^2 = 4.66 \times 10^{-6}$ ,程序运行时间分别为  $t = 55 \text{ min}18.1 \text{ s}$ 和  $t = 51 \text{ min}20.1 \text{ s}$ .显然,与遗传算法相比,不仅其拟合效果要差一些,而且所花费

时间要远远多于遗传算法.这里保持温度衰减参数  $\alpha = 0.95$ 不变,由于初始和终止温度以及温度衰减参数都已经确定,可得总降温次数为270次,石英晶体o光和e光通过模拟退火算法所得塞氏方程拟合结果的最小差方和所对应的降温次数分别为219次和239次,温度衰减参数  $\alpha$ 是影响模拟退火算法搜索性能的重要因素,改变温度衰减参数时石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)所得塞氏方程的模拟退火算法结果如表3所示,表中最小差方和对应的降温次数这一列中第一项是指总的降温次数,而紧接着括号内的这一项是指最小差方和所对应的降温次数.结果表明,若温度衰减参数  $\alpha$ 接近1,将导致降温次数增多和退火过程进展缓慢,相应的运行时间也会增加;若温度衰减参数  $\alpha$ 取值越小,尽管降温次数和运行时间都减小了,但是会导致程序正在寻最优解的过程中退火温度已达到终止温度而提前结束,显然,当温度衰减参数  $\alpha$ 取值为0.9和0.85时,所得塞氏方程拟合结果的差方和都非常小,但是程序运行时间却大幅度减小,所以温度衰减参数  $\alpha$ 一般取值区间为0.85 ~ 0.95.另外,每个温度的迭代次数(Metropolis链长  $L$ )取得越大,也将导致程序运行时间增加.

表 3 改变衰减参数时石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)的模拟退火算法结果(马可夫链长度  $L = 10000$ )

Table 3 The retrieval results of simulated annealing algorithm under different temperature decay factor for quartz (o light) in spectral region (0.198 ~ 2.053 1 μm) (Metropolis  $L = 10000$ )

Temperature decay factor	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Cooling times	Time
0.90	$A = 2.35576, B = 1.080 \times 10^{-2}$	$2.32 \times 10^{-6}$	132(127)	28 min 13.5 s
	$C = 9.819 \times 10^{-3}, D = 1.147 \times 10^{-2}$			
0.85	$A = 2.35780, B = 1.078 \times 10^{-2}$	$2.87 \times 10^{-6}$	86(84)	16 min 41.8 s
	$C = 9.879 \times 10^{-3}, D = 1.146 \times 10^{-2}$			
0.75	$A = 2.35892, B = 1.065 \times 10^{-2}$	$7.73 \times 10^{-6}$	49(49)	9 min 29.6 s
	$C = 1.012 \times 10^{-2}, D = 1.149 \times 10^{-2}$			
0.65	$A = 2.35216, B = 1.133 \times 10^{-2}$	$8.79 \times 10^{-6}$	33(33)	6 min 17.4 s
	$C = 8.416 \times 10^{-3}, D = 9.731 \times 10^{-3}$			
0.55	$A = 2.35962, B = 9.806 \times 10^{-3}$	$1.01 \times 10^{-5}$	24(24)	4 min 31.4 s
	$C = 1.239 \times 10^{-2}, D = 1.295 \times 10^{-2}$			

石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)多次运行模拟退火算法所得参量反演结果如表4所示,很明显5次得到的优化结果均不相同,表明模拟退

火算法性能也不稳定.而且所得塞氏方程拟合结果的差方和大于遗传算法,表明模拟退火算法的拟合效果要劣于遗传算法.

表 4 石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)模拟退火算法多次运行所得参量反演结果

Table 4 The retrieval results of quartz (o light) by multiple runs of the simulated annealing algorithm in spectral region(0.198 ~ 2.053 1 μm)

The <i>i</i> -th time	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Time
1	$A = 2.35426, B = 1.135 \times 10^{-2},$ $C = 8.757 \times 10^{-3}, D = 1.104 \times 10^{-2}$	$3.84 \times 10^{-6}$	55 min 43.9 s
2	$A = 2.35680, B = 1.044 \times 10^{-2},$ $C = 1.096 \times 10^{-2}, D = 1.185 \times 10^{-2}$	$2.91 \times 10^{-6}$	57 min 18.3 s
3	$A = 2.35766, B = 1.110 \times 10^{-2},$ $C = 8.952 \times 10^{-3}, D = 1.202 \times 10^{-2}$	$4.87 \times 10^{-6}$	55 min 27.7 s
4	$A = 2.35837, B = 1.045 \times 10^{-2},$ $C = 1.076 \times 10^{-2}, D = 1.257 \times 10^{-2}$	$3.11 \times 10^{-6}$	54 min 51.7 s
5	$A = 2.35666, B = 1.092 \times 10^{-2},$ $C = 9.319 \times 10^{-3}, D = 1.187 \times 10^{-2}$	$2.93 \times 10^{-6}$	54 min 42.9 s

2.1.3 遗传模拟退火算法结果

遗传模拟退火算法参量设置如下:种群规模大小  $M = 100$ ;最大遗传代数  $\text{maxgen} = 100$ ;交叉概率  $p_c = 0.7$ ;变异概率  $p_m = 0.01$ .温度参量  $T_0 = 200$ ,终止温度  $T = 1$ ,温度衰减参数  $\alpha = 0.95$ ,马可夫链长度与种群数相同,也为  $L = 100$ .

通过遗传模拟退火算法参数反演<sup>[16-17]</sup>,获得石英晶体在可见光区(0.340 ~ 0.768 μm)的塞氏方程表达式为

$$\begin{cases} n_o^2 = 2.35584 + \frac{1.0925 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 8.7755 \times 10^{-3}} - 1.016 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \\ n_e^2 = 2.38443 + \frac{1.0967 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.1243 \times 10^{-2}} - 1.227 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \end{cases} \quad (7)$$

由 MATLAB 计算程序可得石英晶体 o 光和 e 光拟合结果的差方和: o 光为  $s_o = \sum_{i=1}^6 (n_o - n'_o)^2 = 1.86 \times 10^{-9}$ , e 光为  $s_e = \sum_{i=1}^6 (n_e - n'_e)^2 = 3.64 \times 10^{-9}$ . 与文献[12]给出的石英晶体在 23℃ 下可见光区的塞氏方程表达式的拟合结果的差方和相比较,提高了两个数量级还要多.显然,利用遗传模拟退火算法使得拟合的总体效果得到进一步提高.采用文献[12]的方法确定色散方程的系数,虽然是通过严格求解修正的塞氏方程得到,但是当所使用的光谱范围较宽,且实验数据点较多时,若每次选取不同的四个波长的折射率值,则所确定上式中的 4 个参量  $A, B, C, D$  也会不同,所得到的塞

氏方程与全部实验数据符合的不会很理想,若要得到与全部实验数据点符合得较好的塞氏方程的参量,就需要反复进行多次代入计算,会使该方法显得较麻烦.

通过遗传模拟退火算法参数反演,获得石英晶体在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)的塞氏方程表达式为

$$\begin{cases} n_o^2 = 2.35668 + \frac{1.075 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.009 \times 10^{-2}} - 1.148 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \\ n_e^2 = 2.38410 + \frac{1.111 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.037 \times 10^{-2}} - 1.211 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \end{cases} \quad (8)$$

拟合结果的差方和分别为 o 光为  $s_o = 2.54 \times 10^{-7}$  和 e 光为  $s_e = 7.31 \times 10^{-8}$ ;运行程序所花费时间分别为  $t_o = 3 \text{ min } 5.5 \text{ s}$  和  $t_e = 4 \text{ min } 42.7 \text{ s}$ .显然,与遗传算法和模拟退火算法所得结果相比,遗传模拟退火算法所得塞氏方程差方和更小,拟合的总体效果更优.

通过遗传模拟退火算法对石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)不同遗传代数下的参量反演结果如表 5 所示,发现将最大遗传代数改为 200,300,400 后重新运行程序,发现所得到的参量反演结果几乎完全一致,只有在小数点后两位会发生变化,但这些变化对石英晶体色散结果影响微乎其微,而且发现不同遗传代数下所得结果的差方和完全相同,所以在遗传模拟退火过程中,迭代次数不需太大,这里选取 100 即可,这样可以较大程度减少程序运行时间,提高了程序运行效率.

表 5 石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)的遗传模拟退火算法不同迭代次数下的参量反演结果

Table 5 The retrieval results of quartz (o light) by a genetic simulated annealing algorithm under different iterations in spectral region(0.198 ~ 2.053 1 μm)

Maximum iterations	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Time
100	$A = 2.3566799, B = 1.0747375 \times 10^{-2},$ $C = 1.0099814 \times 10^{-2}, D = 1.1477769 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 min 5.5 s
200	$A = 2.3566799, B = 1.0747366 \times 10^{-2},$ $C = 1.0099836 \times 10^{-2}, D = 1.1477781 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	6 min 49.3 s
300	$A = 2.3566799, B = 1.0747363 \times 10^{-2},$ $C = 1.0099845 \times 10^{-2}, D = 1.1477786 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	10 min 2.2 s
400	$A = 2.3566799, B = 1.0747363 \times 10^{-2},$ $C = 1.0099844 \times 10^{-2}, D = 1.1477785 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	16 min 21.8 s

石英晶体(o光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)遗传模拟退火算法连续 5 次运行所得参量反演结果如表 6 所示,显示所得参量结果几乎相同,只有微小的差

别,而且差方和完全相同,说明遗传模拟退火算法稳定性很好.

表 6 石英晶体(o 光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)遗传模拟退火算法多次运行所得参量反演结果

Table 6 The retrieval results of quartz (o light) by multiple runs of the genetic simulated annealing algorithm in spectral region (0.198 ~ 2.053 1 μm)

The <i>i</i> -th time	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Time
1	$A = 2.3566799, B = 1.0747375 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099814 \times 10^{-2}, D = 1.1477769 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 min 5.5 s
2	$A = 2.3566800, B = 1.0747340 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099906 \times 10^{-2}, D = 1.1477819 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 min 5.3 s
3	$A = 2.3566799, B = 1.0747359 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099855 \times 10^{-2}, D = 1.1477791 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 min 6.9 s
4	$A = 2.3566799, B = 1.0747358 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099857 \times 10^{-2}, D = 1.1477792 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 min 3.6 s
5	$A = 2.3566799, B = 1.0747358 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099857 \times 10^{-2}, D = 1.1477792 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	3 mn 6.9 s

石英晶体(o 光)在某次遗传模拟退火算法中随退火进程所得参量反演结果如表 7 所示,石英晶体在遗传模拟退火算法进化过程中总降温次数为 104 次,发现第 1 次降温后方差已经较小,而第 5 次降温后已经接近最优值,而第 45 次降温后差方和已经达到最小,剩下的降温过程中所反演参量只发生微小的改变,但是差方和始终不变.而模拟退火算法在寻最优解中经历

一个非常缓慢的过程,说明遗传算法和模拟退火算法相结合形成一种混合算法后,以遗传算法控制寻优方向,并用模拟退火算法解决局部收敛问题,从而加快了搜索进程,提高了收敛的精度,充分发挥了遗传算法的快速全局搜索性能和模拟退火算法的局部搜索能力,较大地增强了算法的全局收敛性,能很好地避免有传统遗传算法的“早熟”现象,不会陷入局部收敛.

表 7 石英晶体(o 光)在光谱区(0.198 ~ 2.053 1 μm)遗传模拟退火算法随退火进程所得参量反演结果

Table 7 The retrieval results of quartz (o light) by a genetic simulated annealing algorithm within the annealing process in spectral region (0.198 ~ 2.053 1 μm)

The <i>i</i> -th annealing	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Annealing temperature
1	$A = 3.0457591, B = 2.6197807 \times 10^{-2}$ $C = 8.8819884 \times 10^{-2}, D = 3.9191762 \times 10^{-1}$	$4.0786961 \times 10^{-4}$	200
5	$A = 2.3596521, B = 1.0720892 \times 10^{-2}$ $C = 9.8011552 \times 10^{-3}, D = 1.3059399 \times 10^{-2}$	$3.0044629 \times 10^{-7}$	162.9
30	$A = 2.3566808, B = 1.0747135 \times 10^{-2}$ $C = 1.0100447 \times 10^{-2}, D = 1.1478060 \times 10^{-2}$	$2.5428207 \times 10^{-7}$	45.19
45	$A = 2.3566801, B = 1.0747333 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099917 \times 10^{-2}, D = 1.1477845 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	20.93
104	$A = 2.3566799, B = 1.0747358 \times 10^{-2}$ $C = 1.0099857 \times 10^{-2}, D = 1.1477792 \times 10^{-2}$	$2.5428188 \times 10^{-7}$	1.02

石英晶体的实验数据分别与上述三种智能优化算法所得最优拟合值的差值曲线  $\delta = n - n'$  如图 2 所示,这里  $n$  和  $n'$  分别为实验值和拟合值.图 2 表明,通过遗传模拟退火算法所得石英晶体 o 光和 e 光的差值曲线在零点附近上下波动幅度最小,说明通过遗传模拟退

火算法所得塞氏方程在整个光谱区的拟合效果最优;而通过模拟退火算法所得塞氏方程与实验数据符合得最差,特别是在短波段拟合效果相对更差,利用遗传算法所得塞氏方程的拟合效果居中.

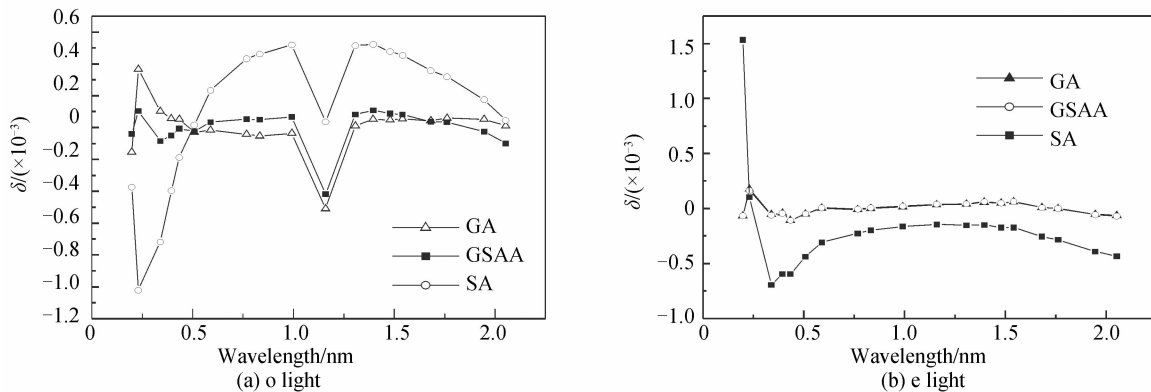


图 2 石英晶体实验数据与拟合值的差值曲线

Fig. 2 Residual curves of experimental data and fitting data for quartz crystal

2.2 方解石晶体的三种算法结果

方解石晶体算法参数设置与石英晶体相同,所得

方解石晶体在在光谱区(0.394 ~ 1.159 μm)三种算法

参数反演的性能比较如表 8.

表 8 方解石晶体在在光谱区(0.394 ~ 1.159 μm)三种算法参数反演的性能比较

Table 8 The Comparison of three intelligent algorithms in the parameters retrieval of dispersion equation for calcite crystal in spectral region (0.394 ~ 1.159 μm)

Algorithm type	o light			e light		
	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error S( $\times 10^{-7}$ )	Time	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error S( $\times 10^{-8}$ )	Time
GA	A = 2.689 25 B = $2.216 \times 10^{-2}$ C = $4.053 \times 10^{-3}$ D = $1.012 \times 10^{-2}$	4.98	25.8 s	A = 2.182 51 B = $9.388 \times 10^{-3}$ C = $2.964 \times 10^{-3}$ D = $1.083 \times 10^{-3}$	7.60	39.4 s
SA	A = 2.69536 B = $1.937 \times 10^{-2}$ C = $1.797 \times 10^{-2}$ D = $1.319 \times 10^{-2}$	4.47	54 min 56.8 s	A = 2.18630 B = $8.175 \times 10^{-3}$ C = $1.568 \times 10^{-2}$ D = $3.61 \times 10^{-3}$	24.4	56 min 35.4 s
GSAA	A = 2.69671 B = $1.92 \times 10^{-2}$ C = $1.881 \times 10^{-2}$ D = $1.48 \times 10^{-2}$	0.143	3 min 28.6 s	A = 2.18494 B = $8.403 \times 10^{-3}$ C = $1.471 \times 10^{-2}$ D = $2.599 \times 10^{-3}$	1.19	3 min 10.3 s

而文献[11]给出了方解石晶体在光谱区(0.394 ~ 1.159 μm)范围内的塞氏方程,经过计算,得到该方程拟合结果的差方和:o 光为  $s_o = 2.82 \times 10^{-5}$ , e 光为  $s_e = 3.37 \times 10^{-8}$ . 显然,利用上述三种智能算法使得拟合的总体效果进一步提高,差方和减少 1 个数量级还要多. 将方解石晶体的实验数据分别与上述三种智能优化算法所得拟合曲线的差值曲线  $\delta = n - n'$  画出,如图 3. 图中表明,通过遗传模拟退火算法所得石英晶体 o 光和 e 光的差值曲线在零点附近上下波动幅度最小,说明通过遗传模拟退火算法所得塞氏方程在整个光谱区的拟合效果最优;而通过模拟退火算法所得塞氏方

程与实验数据符合得最差,特别是在短波段拟合效果相对更差,利用遗传算法所得塞氏方程的拟合效果居中. 比较遗传算法和模拟退火算法所得塞氏方程在整个光谱区的差值曲线,发现石英晶体(o 光)在短波段中两者的误差方向恰好相反,而石英晶体(e 光)在长波段区域中两者的误差方向恰好相反. 通过遗传模拟退火算法所得石英晶体 o 光和 e 光的差值曲线在零点附近上下波动幅度最小,说明通过遗传模拟退火算法所得塞氏方程在整个光谱区的拟合效果得到了进一步提高.

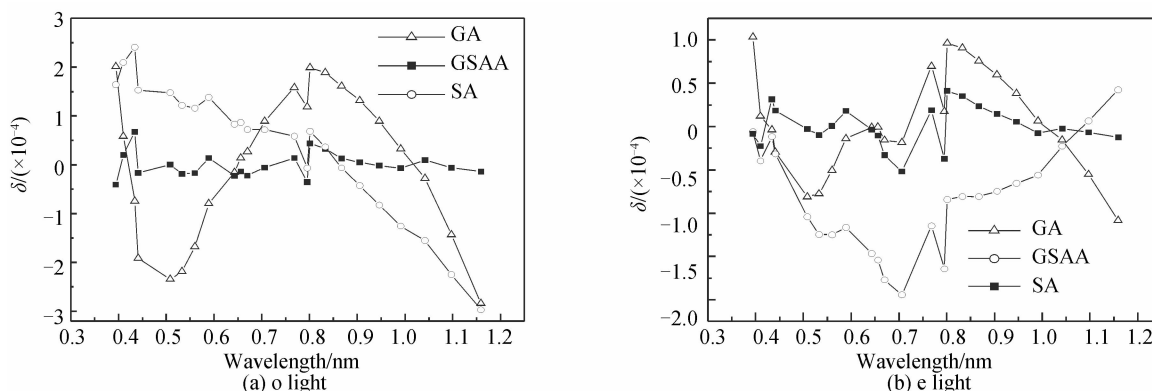


图 3 方解石实验数据与拟合值的差值曲线

Fig. 3 Residual curves of Experimental data and fitting data for calcite crystal

由于上述晶体的色散波段均处于正常色散范围内,因此,通过遗传模拟退火算法进行色散方程的参量反演这种方法可在拟合其它材料色散方程时使用,且要求材料的色散波段处于正常色散区域中.

3 结论

本文分别将遗传算法、模拟退火算法、遗传模拟退火算法应用于晶体色散方程的参数反演中,获得了不

同光学晶体色散方程的参量,建立了不同光学晶体的色散方程.同时对三种智能算法在参数反演中的性能进行了分析与比较,发现这三种算法在色散方程参数反演方面均具有可行性,但是它们也存在不同之处.模拟退火算法程序所需的计算时间明显多于另外两种算法程序所花费的时间,并且它的拟合效果也比另外两种算法要差一点;遗传算法尽管拟合效果较好,但是性能不太稳定,很难得到最优解;采用遗传模拟退火算法所得拟合效果最优,而且性能最稳定,表明通过混合智能优化算法来解决问题,使得几种智能优化算法的优势互补,克服了单一算法的不足,从而增强了算法的求解能力,因此有效地设计开发新的混合智能优化算法将是以后研究的方向.

#### 参考文献

- [1] BAI Yi-ming, CHEN Nuo-fu, PENG Chang-tao, *et al.* Refractive-index dispersion effect on anti-reflection coatings of crystalline Si solar cells[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(7):1202-1206.  
白一鸣,陈诺夫,彭长涛,等.折射率色散效应对晶体硅太阳能电池反射率的影响[J].光子学报,2007,**36**(7):1202-1206.
- [2] BAI Yi-ming, CHEN Nuo-fu, DAI Rui-xuan, *et al.* Dispersion effect on double layer anti reflection coatings of GaAs solar cells[J]. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2006, **27**(4):725-729.  
白一鸣,陈诺夫,戴瑞煜,等.色散效应对 GaAs 太阳能电池双层减反射膜的影响[J].半导体学报,2006,**27**(4):725-729.
- [3] LIU Hua-song, LIU Dan-dan, JIANG Cheng-hui, *et al.* Properties of reflecting region of periodic-structured thin film with refractive index dispersion[J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, **63**(1):0178011-0178015.  
刘华松,刘丹丹,姜承慧,等.周期结构薄膜在折射率色散下反射区特性研究[J].物理学报,2014,**63**(1):0178011-0178015.
- [4] LI Hong-xia, WU Fu-quan, FAN Ji-yang. Sellmeier coefficients for the refractive indices of calcite at crystal different temperatures[J]. *Applied Optics*, 2004, **25**(5):7-10.  
李红霞,吴福全,范吉阳.冰洲石晶体色散方程解析研究及折射率温度系数表达式[J].应用光学,2004,**25**(5):7-10.
- [5] SU Fu-fang, WU Fu-quan. The research of thermal effect on the rotatory power of quartz[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5):670-672.  
苏富芳,吴福全.石英晶体旋光性的温度效应测试研究[J].光学学报,2005,**25**(5):670-672.
- [6] ZHOU Quan, HUANG Yun. Application and comparison of simulated annealing algorithm and algorithm in spectral ellipsometry data processing[J]. *Applied Optics*, 2008, **29**(3):385-389.  
周全,黄云.模拟退火算法与遗传算法在光谱椭圆偏数据处理中的应用比较[J].应用光学,2008,**29**(3):385-389.
- [7] GUO Chun, LI Bin-cheng. Determination of refractive index and thickness of MgF<sub>2</sub> film using simulated annealing algorithm [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2013, **21**(4):858-863.  
郭春,李斌成.用模拟退火法确定 MgF<sub>2</sub> 薄膜折射率和厚度 [J]. 光学精密工程, 2013, **21**(4):858-863.
- [8] WANG Dang-she, WANG Hai-jiao, ZHANG Jian-ke. Data inversion algorithm of ellipsometry based on differential evolution optimization [J]. *Chinese Journal of Vacuum Science and Technology*, 2012, **32**(3):263-267.  
王党社,王海娇,张剑科.基于差异进化算法的椭圆偏测量数据反演[J].真空科学与技术学报,2012,**32**(3):263-267.
- [9] WANG An-xiang, WU Zhen-sen. Parameter inversion of shadowing function in light scattering model [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, **43**(1):332-337.  
王安祥,吴振森.光散射模型中遮蔽函数的参数反演[J].红外与激光工程,2014,**43**(1):332-337.
- [10] 李景镇.光学手册[M].西安:陕西科技出版社,1986,1300-1326.
- [11] CHEN Xi-yuan, SHAN Ming. Dispersion formula of calcite [J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2007, **34**(5):38-42.  
陈西园,单明.方解石晶体色散方程的研究[J].光电工程,2007,**34**(5):38-42.
- [12] ZHAO Shuang, WU Fu-quan. The study on dispersive equation and thermal refractive index coefficient of quartz crystal [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(8):1183-1186.  
赵爽,吴福全.石英晶体的色散方程及折射率温度系数[J].光子学报,2006,**35**(8):1183-1186.
- [13] WANG An-xiang, FENG Jian, ZENG Zhen-chao, *et al.* Application of genetic algorithms based on the parameters reverse of BRDF model [J]. *Laser & Infrared*, 2008, **38**(4):362-366.  
王安祥,冯健,曾振超,等.遗传算法在光散射模型参数反演中的应用[J].激光与红外,2008,**38**(4):362-366.
- [14] WANG An-xiang, FENG Jian. Genetic simulated annealing algorithm in the parameter retrieval of light scattering model [J]. *Laser Technology*, 2009, **33**(1):32-35.  
王安祥,冯健.光散射模型参数反演中的遗传模拟退火算法 [J]. 激光技术, 2009, **33**(1):32-35.
- [15] LIAO Qing-jun, WANG Zhi-heng, WANG Lei, *et al.* Ellipsometric data inversion of absorbing films by simulated annealing [J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(6):683-687.  
廖清君,王植恒,王磊,等.模拟退火法在吸收薄膜的椭圆偏反演算法中的应用[J].光学学报,2002,**22**(6):683-687.
- [16] WANG An-xiang, ZHANG Han-lu, WU Zhen-sen, *et al.* Experiment measurements and optimal modeling of goal surface's visible spectrum BRDF [J]. *Optical Technique*, 2008, **34**(5):655-658.  
王安祥,张涵璐,吴振森,等.目标表面可见光谱 BRDF 的实验测量及优化建模[J].光学技术,2008,**34**(5):655-658.
- [17] CAO Yun-hua, WU Zhen-sen, ZHANG Han-lu, *et al.* Research on visible light scattering of spatial targets based on spectral BRDF of target samples [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(11):2264-2268.  
曹运华,吴振森,张涵璐,等.基于粗糙样品光谱 BRDF 的空间目标可见光散射研究 [J]. 光子学报, 2008, **37**(11):2264-2268.