

遗传模拟退火算法在玻璃和晶体色散方程参量反演中的应用

王安祥¹, 张晓军¹, 曹运华²

(1. 西安工程大学 理学院, 陕西 西安 710048; 2. 西安电子科技大学 理学院, 陕西 西安 710071)

摘要: 根据已测 K9 玻璃和晶体(ZnS, MgF₂, Calcite)的实验数据, 将遗传模拟退火算法应用于修正的 Sellmeier 方程的参数反演中, 建立了上述材料的色散方程。同时比较了遗传模拟退火算法和遗传算法(包括标准遗传算法和多种群遗传算法)在迭代搜索性能方面的差异。结果表明: 遗传模拟退火算法的优化效果最优并且性能最稳定。同时, 将通过遗传模拟退火算法所得 K9 玻璃和晶体在某一光谱区域的色散方程应用于其他光谱区域中, 发现色散方程的拟合值与实验值符合较好, 这表明通过该方法所得色散方程具有较好的外推性。因此, 通过遗传模拟退火算法进行色散方程的参量反演方法可以用于其他材料色散方程的拟合。

关键词: 标准遗传算法; 多种群遗传算法; 遗传模拟退火算法; 色散方程; 反演; 外推性
中图分类号: O436 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2015)11-3197-07

Application of genetic simulated annealing algorithm in parameters retrieval of dispersion equation for glass and crystal

Wang Anxiang¹, Zhang Xiaojun¹, Cao Yunhua²

(1. School of Science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China;

2. School of Science, Xidian University, Xi'an 710071, China)

Abstract: According to the experimental data of K9 glass, ZnS crystal, MgF₂ crystal and calcite crystal, the dispersion equations of the materials was established by the application of genetic simulated annealing algorithm to retrieval parameter of the modified sellmeier equation. Meanwhile, the differences in iteration searching properties between the genetic simulated annealing algorithm and the genetic algorithms including standard genetic algorithm and multi-population genetic algorithm were compared. The results show that the genetic simulated annealing algorithm possesses the best optimization effect and stable performance. Finally, the dispersion equations of K9 glass and crystals obtained by genetic simulated annealing algorithm in one spectral region are used in another spectral region, and the fitted values of dispersion equation are in good agreement with experimental data, indicating that the dispersion equation has better extrapolation. Therefore, retrieval parameter of dispersion equation using genetic simulated annealing algorithm can be applied to other materials.

Key words: standard genetic algorithm; multiple population genetic algorithm;
genetic simulated annealing algorithm; dispersion equations; retrieval; extrapolation

收稿日期: 2015-03-05; 修订日期: 2015-04-03

基金项目: 陕西省自然科学基金(2012JM1011); 陕西省教育厅科研项目(14JK1301); 陕西省普通高校重点学科建设专项资金(2008)169

作者简介: 王安祥(1974-), 男, 副教授, 硕士, 主要从事目标光散射特性方面的研究。Email: waxiang0921@126.com

0 引言

色散关系在光学薄膜和光学器件设计中是必不可缺的^[1],考虑色散与否对于所研究光学材料的性质存在较大差异,因此国内外学者对光学材料的色散特性非常重视,进行了大量的实验测量和理论模型研究, Kim 等人研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 晶体随温度变化的折射率色散,提出了一种含温度参量的改进型 Sellmeier 模型^[2], Salem 研究了 $\text{Zn}_x\text{Cd}_{(1-x)}\text{S}$ 薄膜的折射率受掺杂浓度的变化,发展了一种含掺杂浓度参量的改进型 Sellmeier 模型^[3],李锡善实验测量了光学玻璃和光学晶体在 $0.36\sim 2.5\ \mu\text{m}$ 波长范围内的折射率,并对某一近似色散计算公式的计算精度和适用范围进行了深入讨论^[4],赵爽通过对修正的 Sellmeier 方程严格求解,得出了石英晶体的系数表达式^[5],陈西园将修正的 Sellmeier 方程展开成多项式对方解石晶体的实验数据进行拟合,得到在近紫外和近红外光谱区方解石的修正 Sellmeier 方程的系数^[6]。目前,国内学者也开始研究通过优化算法确定理论模型的未知参量,张晓娟将改进的遗传模拟退火算法应用于光学薄膜的膜系设计中,反演出设计薄膜所需要的光学参量^[7],祝捍皓将遗传算法应用于 FFP 声场模型的参数反演中,获得了实验中所关心的声学参数^[8],江思珉将单纯形模拟退火混合算法应用于污染物迁移问题解析解的参数反演中,获得了地下水污染强度变化历时曲线^[9]。文中作者根据参考文献[4,10]已测 K9 玻璃和晶体的实验数据,将遗传算法和模拟退火算法相结合形成的混合算法(遗传模拟退火算法)应用于色散方程的参数反演中,建立了 K9 玻璃和几种晶体的色散方程,并与参考文献[4,6,10]所得上述光学材料色散方程相比较,结果表明:遗传模拟退火算法所得色散方程的拟合效果最优,而且通过该方法所得色散方程具有较好的外推性。

1 基本理论

任何电介质材料都存在折射率色散,其色散遵从洛伦兹模型。对高密度物质,洛伦兹公式应写成修正的 Sellmeier 方程,其形式如下^[5]:

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

式中: λ 为入射光在真空中的波长(单位 μm); A 、 B 、 C 、 D 均为待定参数。

遗传模拟退火算法的基本理论和具体实现过程在许多文献中都进行了详细的论述^[11-12],这里不再赘述。

2 计算过程与结果分析

在参数反演问题中,还须设定待定参量的变化范围,即 4 个参量 A 、 B 、 C 、 D 的上下限约束:

$$\begin{cases} 0 < A < 10 \\ 0 < B < 0.5 \\ 0 < C < 0.1 \\ 0 < D < 0.5 \end{cases} \quad (2)$$

令目标函数 $s = \sum (n - n')^2$, 式中 n 和 n' 分别为实验值和所反演色散方程的计算值,目标函数 s 为所反演的色散方程的计算值与实验值的差方和。

2.1 K9 玻璃的算法结果

根据参考文献[4]所给 K9 玻璃在光谱区域 ($0.365\ 01\sim 1.013\ 98\ \mu\text{m}$) 的折射率值,首先通过遗传模拟退火算法进行参数反演,然后与遗传算法(包括标准遗传算法和多种群遗传算法)所得结果进行比较。

2.1.1 遗传模拟退火算法(GSAA)计算结果

GSAA 参量设置如下:最大遗传代数、种群规模大小及 Metropolis 链长均为 100,交叉概率和变异概率分别为 0.7 和 0.01,初始温度和终止温度分别为 200 和 1,温度下降系数为 0.95。

根据参考文献[4]中 K9 玻璃在光谱区域 ($0.365\ 01\sim 1.013\ 98\ \mu\text{m}$) 的折射率数据,通过 GSAA 得到 K9 玻璃修正的 Sellmeier 方程为:

$$n^2 = 2.270\ 239 + \frac{1.084\ 7 \times 10^{-2}}{\lambda^2 - 1.250\ 6 \times 10^{-2}} - 9.975\ 5 \times 10^{-3} \cdot \lambda^2 \quad (3)$$

由 MATLAB 计算可得 K9 玻璃拟合结果的差方

$$\text{和为 } s = \sum_{i=1}^{14} (n_o - n'_o)^2 = 2.66 \times 10^{-10}.$$

而参考文献[4]提供的 K9 玻璃近似色散公式为:

$$n_\lambda^2 = A_0 + A_1\lambda^2 + A_2\lambda^{-2} + A_3\lambda^{-4} + A_4\lambda^{-6} + A_5\lambda^{-8} \quad (4)$$

式中: A_0, A_1, \dots, A_5 为一组待定常数; λ 为取 μm 的波长; n_λ 为对应 λ 的折射率值。K9 玻璃的一组系数 $A_0\sim A_5$ 为:

$$A_0=2.269\ 185, A_1=-9.449\ 785\times 10^{-3},$$

$$A_2=1.163\ 685\times 10^{-2}, A_3=-1.380\ 36\times 10^{-4},$$

$$A_4=4.419\ 505\times 10^{-5}, A_5=-2.344\ 665\times 10^{-6}$$

公式(4)所得 K9 玻璃拟合结果的差方和为 $s=$

$\sum_{i=1}^{14} (n_o-n_o')^2=4.11\times 10^{-10}$ 。可以看出,利用 GSAA 所得修正的 Sellmeier 方程参量拟合的总体效果要比公式(4)有进一步提高,图 1 为 K9 玻璃的修正 Sellmeier 方程的拟合结果。

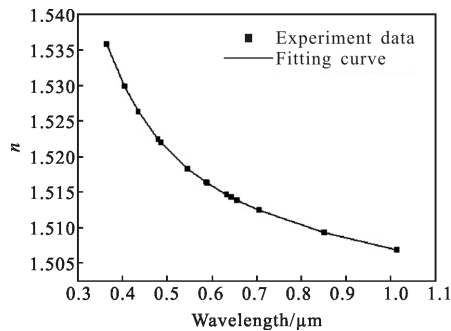


图 1 遗传模拟退火算法所得 K9 玻璃的色散方程拟合曲线

Fig.1 Fitting curve of dispersion equation for K9 glass by GSAA

为了验证所得 K9 玻璃修正的 Sellmeier 方程表达式的可靠性,利用参考文献[4]所给 K9 玻璃在光谱区(1.064~2.215 μm)的实验数据分别与公式(3)和公式(4)的计算值进行比较,发现公式(3)所得拟合曲线(实线)与实验值符合更好,如图 2 所示,然后由

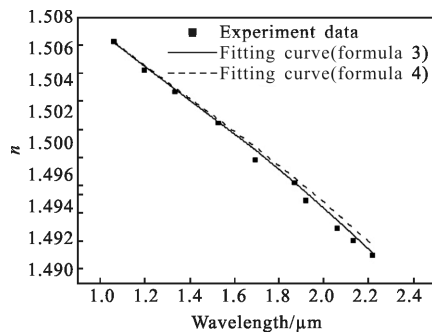


图 2 K9 玻璃的色散方程在光谱区(1.064~2.215 μm)的拟合曲线

Fig.2 Fitting curves of dispersion equations for K9 glass in spectral region(1.064~2.215 μm)

MATLAB 计算可得公式(3)拟合结果的差方和为 $s=$

$\sum_{i=1}^{10} (n_o-n_o')^2=1.56\times 10^{-6}$,而公式(4)拟合结果的差方和为 $s=4.70\times 10^{-6}$ 。结果表明:尽管公式(3)是 K9 玻璃在光谱区域(0.365 01~1.013 98 μm)所得色散方程表达

式,但是它的外推性却比较好。

2.1.2 遗传算法计算结果与分析

(1) 标准遗传算法(SGA)参数设置如下:最大遗传代数和种群规模大小分别为 1 000 和 100;交叉和变异概率则分别为 0.7 和 0.01。

根据参考文献中 K9 玻璃在光谱区域(0.365 01~1.013 98 μm)的测量数据^[4],通过 SGA 得到 K9 玻璃色散方程的 4 个参数,如表 1 所示。可以看出:迭代次数为 50 时,所得拟合结果差方和的数量级为 10^{-6} ,说明 SGA 整体搜索能力强,但是当迭代次数从 400 变化至 1 000 次时,反演所得色散方程的拟合值和实验值的差方和虽然在减小,但是减小得非常缓慢,而且所反演色散方程的 4 个参量值也基本趋于稳定,说明该算法的局部搜索能力不强,即使花费更长的时间,也很难给出令人满意的解。因此,标准遗传算法存在局部寻优能力差、收敛速度慢、易陷入局部极值点等问题。

表 1 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)单次运行 SGA 的计算结果

Tab.1 Single calculation results by SGA for K9 glass in spectral region(0.365 01~1.013 98 μm)

Iterations	Coefficients of improved Sellmeier equation	Error	Time/s
50	$A=2.260\ 75, B=1.334\times 10^{-2}, C=1.212\times 10^{-3}, D=1.224\times 10^{-3}$	2.46×10^{-6}	1.2
100	$A=2.265\ 61, B=1.239\times 10^{-2}, C=8.404\times 10^{-4}, D=6.611\times 10^{-3}$	1.24×10^{-7}	2.1
200	$A=2.265\ 77, B=1.231\times 10^{-2}, C=1.483\times 10^{-3}, D=6.517\times 10^{-3}$	1.08×10^{-7}	5.2
400	$A=2.266\ 07, B=1.22\times 10^{-2}, C=2.254\times 10^{-3}, D=6.71\times 10^{-3}$	9.42×10^{-8}	10.6
800	$A=2.266\ 75, B=1.199\times 10^{-2}, C=3.669\times 10^{-3}, D=7.291\times 10^{-3}$	6.93×10^{-8}	20.1
1 000	$A=2.266\ 95, B=1.191\times 10^{-2}, C=4.466\times 10^{-3}, D=7.393\times 10^{-3}$	5.99×10^{-8}	25.9

表 2 给出 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)多次运行 SGA 的计算结果,发现算法运行多次所得色散方程 4 个参量均不相同,并且拟合结果的差方和差别较大,表明 SGA 算法性能不稳定。因此,对于上述复杂的函数优化,通过 SGA 只能得到问题的次优解,而不是最优解。

表 2 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)多次运行 SGA 的计算结果

Tab.2 Multiple calculation results by SGA for K9 glass in spectral region(0.36501–1.01398 μm)

<i>i</i> time	Coefficients of improved Sellmeier equation	Error	Time/s
1	$A=2.295\ 33, B=4.42\times 10^{-3}, C=7.051\times 10^{-2}, D=3.224\times 10^{-2}$	7.03×10^{-6}	2.59
2	$A=2.266\ 75, B=1.197\times 10^{-2}, C=4.019\times 10^{-3}, D=7.255\times 10^{-3}$	6.65×10^{-8}	2.67
3	$A=2.266\ 95, B=1.191\times 10^{-2}, C=4.466\times 10^{-3}, D=7.393\times 10^{-3}$	5.99×10^{-8}	25.9
4	$A=2.290\ 11, B=5.598\times 10^{-3}, C=5.774\times 10^{-2}, D=2.697\times 10^{-2}$	3.67×10^{-5}	23.3
5	$A=2.265\ 73, B=1.233\times 10^{-2}, C=1.303\times 10^{-3}, D=6.496\times 10^{-3}$	1.11×10^{-7}	26.9

(2) 多种群遗传算法(MPGA)参数设置如下^[13]: 种群数目、种群规模大小及最大遗传代数分别为 10、100 和 600;交叉和变异概率分别为 0.7 和 0.01。

早熟收敛问题是遗传算法不可忽视的缺陷,主要表现在一个种群中的所有个体都趋于同一状态而停止进化,算法最终只能搜索到次优解。而多种群遗传算法是引入多个种群通过移民算子相互联系来进行协同优化搜索,这样就减小单一遗传算法的未成熟收敛问题。表 3 为 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)多种群遗传算法多次运行的计算结果,

表 3 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)多次运行 MPGA 的计算结果

Tab.3 Multiple calculation results by MPGA for K9 glass in spectral region(0.36501–1.01398 μm)

<i>i</i> time	Coefficients of improved Sellmeier equation	Error	Time
1	$A=2.27, B=1.092\ 5\times 10^{-2}, C=1.187\ 2\times 10^{-2}, D=9.798\ 1\times 10^{-3}$	6.54×10^{-10}	6 m5.4 s
2	$A=2.270\ 61, B=1.073\ 1\times 10^{-2}, C=1.340\ 4\times 10^{-2}, D=1.027\ 6\times 10^{-2}$	1.15×10^{-9}	6 m57.2 s
3	$A=2.270\ 66, B=1.071\ 4\times 10^{-2}, C=1.353\ 8\times 10^{-2}, D=1.030\ 6\times 10^{-2}$	1.39×10^{-9}	6 m8.6 s
4	$A=2.271\ 81, B=1.034\ 6\times 10^{-2}, C=1.649\ 6\times 10^{-2}, D=1.117\ 9\times 10^{-2}$	1.64×10^{-8}	6 m4.0 s
5	$A=2.269\ 96, B=1.093\ 7\times 10^{-2}, C=1.180\ 6\times 10^{-2}, D=9.759\ 4\times 10^{-3}$	7.07×10^{-10}	6 m15.5 s

与标准遗传算法所得结果表 2 相比较,所得修正的 Sellmeier 方程参量拟合的差方和更小,而且多次运行 MPGA 所得 4 个参量的差异有所减小,表明算法的优化性能和算法稳定性都有所提高,但是耗时却增加了。

2.1.3 遗传模拟退火算法的结果分析

表 4 给出了 K9 玻璃多次运行 GSAA 所得结果,发现多次运行 GSAA 后所得色散方程的 4 个参量相应值都非常接近,说明 GSAA 具有很好的稳定性,而且所得色散方程拟合结果的差方和比标准遗传算法要小两个以上数量级,比多种群遗传算法也要小,说明其拟合总体效果要好得多。

表 4 K9 玻璃在光谱区(0.36501~1.01398 μm)多次运行 GSAA 的计算结果

Tab.4 Multiple calculation results by GSAA for K9 glass in spectral region(0.36501–1.01398 μm)

<i>i</i> time	Coefficients of improved Sellmeier equation	Error	Time
1	$A=2.270\ 239\ 8, B=1.084\ 688\ 3\times 10^{-2}, C=1.250\ 613\ 3\times 10^{-2}, D=9.975\ 484\ 0\times 10^{-3}$	$2.653\ 131\ 8\times 10^{-10}$	3 m1.1 s
2	$A=2.270\ 237\ 7, B=1.084\ 712\ 8\times 10^{-2}, C=1.250\ 603\ 7\times 10^{-2}, D=9.973\ 323\ 1\times 10^{-3}$	$2.651\ 921\ 8\times 10^{-10}$	3 m22.5 s
3	$A=2.270\ 239\ 8, B=1.084\ 688\ 3\times 10^{-2}, C=1.250\ 613\ 3\times 10^{-2}, D=9.975\ 484\ 0\times 10^{-3}$	$2.653\ 131\ 8\times 10^{-10}$	3 m5.9 s
4	$A=2.270\ 238\ 0, B=1.084\ 749\ 8\times 10^{-2}, C=1.250\ 103\ 9\times 10^{-2}, D=9.674\ 000\ 0\times 10^{-3}$	$2.650\ 492\ 9\times 10^{-8}$	3 m49.6 s
5	$A=2.270\ 239\ 8, B=1.084\ 688\ 3\times 10^{-2}, C=1.250\ 613\ 3\times 10^{-2}, D=9.975\ 484\ 0\times 10^{-3}$	$2.653\ 131\ 8\times 10^{-10}$	3 m9.6 s

K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)的某次 GSAA 中随退火进程的参量反演结果如表 5 所示,发现第 1 次降温后差方和已达到 10^{-7} 数量级,第 5 次降温后差方和达到 10^{-9} 数量级,所反演色散方程的 4 个参量已趋近最终优化值,当降温次数由 50 变化至最终降温次数 104 次过程中,差方和虽然在减小,但减小得非常缓慢,所反演色散方程的 4 个参量也相应变化很小。需要说明一点,尽管第 50 次降温后的差方和只发生微小的变化,但是它的趋势一直是减小的,一直在寻找最优解的过程中,说明遗传模拟退火算法尽管其全局和局部搜索能力都较强,但是要得到最优解却并不是件容易的事。在其他参量保持不变的情况下,使得终止温度设置为 0.000 1,

通过遗传模拟退火算法参数反演,获得 K9 玻璃在光谱区域(0.365 01~1.013 98 μm)的修正的 Sellmeier 方程为:

$$n^2=2.270\ 230\ 3+\frac{1.084\ 981\ 3\times 10^{-2}}{\lambda^2-1.248\ 374\ 7\times 10^{-2}}-9.967\ 837\ 4\times 10^{-3}\cdot\lambda^2 \quad (5)$$

由 MATLAB 计算可得 K9 玻璃拟合结果的差方和为 $s=\sum_{i=1}^{14}(n_o-n_o')^2=2.645\ 9\times 10^{-10}$, 由于终止温度的大幅减小,在遗传模拟退火算法进化过程中总降温次数增加为 283 次,程序运行时间增加为 9 min3.4 s,但是最终所得 K9 玻璃拟合结果的差方和却减小很少。

表 5 K9 玻璃在光谱区(0.365 01~1.013 98 μm)单次运行 GSAA 的计算结果

Tab.5 Single calculation results by GSAA for K9 glass in spectral region(0.36501–1.01398 μm)

The <i>i</i> annealing	Coefficients of the improved Sellmeier equation	Error	Annealing temperature
1	$A=2.283\ 291\ 3, B=7.602\ 881\ 0\times 10^{-3},$ $C=9.155\ 934\ 6\times 10^{-2},$ $D=4.485\ 723\ 7\times 10^{-2}$	7.97×10^{-7}	200
5	$A=2.270\ 921\ 5, B=1.063\ 206\ 0\times 10^{-2},$ $C=1.418\ 192\ 0\times 10^{-2},$ $D=1.051\ 503\ 9\times 10^{-2}$	3.00×10^{-9}	162.9
50	$A=2.270\ 310\ 7, B=1.082\ 422\ 2\times 10^{-2},$ $C=1.268\ 269\ 0\times 10^{-2},$ $D=1.003\ 043\ 0\times 10^{-2}$	3.03×10^{-10}	16.20
80	$A=2.270\ 243\ 1, B=1.084\ 586\ 6\times 10^{-2},$ $C=1.251\ 385\ 6\times 10^{-2},$ $D=9.978\ 213\ 2\times 10^{-3}$	2.66×10^{-10}	3.48
104	$A=2.270\ 239\ 8, B=1.084\ 688\ 3\times 10^{-2},$ $C=1.250\ 613\ 3\times 10^{-2},$ $D=9.975\ 484\ 0\times 10^{-3}$	2.65×10^{-10}	1.02

表 6 方解石晶体在光谱区(0.394~1.159 μm)内分别运行 SGA、MPGA 和 GSAA 计算结果比较

Tab.6 Comparison of calculation results obtained by SGA, MPGA and GSAA for calcite in spectral region(0.394–1.159 μm)

Algorithm type	<i>o</i> light		<i>e</i> light	
	Coefficients of Sellmeier equation	Error	Coefficients of Sellmeier equation	Error
SGA	$A=2.689\ 25, B=2.216\times 10^{-2},$ $C=4.053\times 10^{-3}, D=1.012\times 10^{-2}$	4.98×10^{-7}	$A=2.182\ 51, B=9.388\times 10^{-3},$ $C=2.964\times 10^{-3}, D=1.083\times 10^{-3}$	7.60×10^{-8}
MPGA	$A=2.697\ 57, B=1.886\times 10^{-2},$ $C=2.057\times 10^{-2}, D=1.534\times 10^{-2}$	2.12×10^{-8}	$A=2.185\ 28, B=8.252\times 10^{-3},$ $C=1.672\times 10^{-2}, D=2.792\times 10^{-3}$	1.41×10^{-8}
GSAA	$A=2.696\ 71, B=1.9196\times 10^{-2},$ $C=1.881\times 10^{-2}, D=1.48\times 10^{-2}$	1.39×10^{-8}	$A=2.184\ 94, B=8.403\times 10^{-3},$ $C=1.471\times 10^{-2}, D=2.599\times 10^{-3}$	1.19×10^{-8}

2.2 方解石的算法结果

遗传模拟退火算法和遗传算法(包括标准遗传算法和多种群遗传算法)都按照 K9 玻璃的参量设置进行,根据参考文献[10]方解石的折射率值,通过上述算法进行参量反演,得到方解石晶体的修正 Sellmeier 方程的系数如表 6 所示。结果显示,遗传模拟退火算法所得修正的 Sellmeier 方程在整个光谱区的拟合效果要优于遗传算法,而在遗传算法中多种群遗传算法的拟合效果要优于标准遗传算法。

而参考文献 [4] 给出了方解石晶体在近紫外及近红外光谱区(0.394~1.159 μm)范围内的色散方程,经过计算,通过 Matlab 计算,得到相应 *o* 光和 *e* 光的差方和分别为 $s_o=2.82\times 10^{-5}$ 和 $s_e=3.37\times 10^{-8}$,显然,利用上述算法使得拟合的总体效果进一步优化。

参考文献[10]给出了方解石晶体在光谱区域(0.20~0.361 μm)范围内折射率的实验测量值,根据智能算法所得色散方程(参数如表 6 所示),将塞氏方程的计算值与实验测量值进行比较,发现方解石(*o* 光)的实验值与通过遗传模拟退火算法所得塞氏方程的拟合曲线符合得最好,而通过标准遗传算法所得色散方程的拟合曲线符合得最差,如图 3 所示,经过计算,得到方解石(*o* 光)在光谱区域(0.20~0.361 μm)范围内的拟合结果的差方和:SGA 为 $s_o=\sum_{i=1}^{19}(n_o-n_o')^2=2.36\times 10^{-2}$,MPGA 为 $s_o=7.86\times 10^{-4}$,GSAA 为 $s_o=1.71\times 10^{-4}$ 。方解石(*e* 光)在光谱区(0.291~0.361 μm)范围内的实验测量值与色散方程的拟合曲线符合得较好,而在光谱区(0.20~0.274 μm)范围内实验测量值与色散方程的拟合曲线符合得差一些,且实验值与相应拟合值的差值随着波长的减小而逐渐增大,如图 4

所示,显然,上述算法中通过遗传模拟退火算法所得色散方程的拟合曲线与实验值符合最好,经过计算,得到方解石晶体在光谱区域(0.20~0.361 μm)范围内的拟合结果的差方和:SGA 为 $s_e = \sum_{i=1}^{19} (n_o - n_o')^2 = 8.78 \times 10^{-4}$,MPGA 为 $s_e = 1.11 \times 10^{-3}$,GSAA 为 $s_e = 4.14 \times 10^{-4}$ 。上述结果表明:尽管色散方程是在光谱区域(0.394~1.159 μm)所得,但是通过遗传模拟退火算法所得色散方程的外推性却比较好,特别是方解石晶体(o 光)的外推性更好。

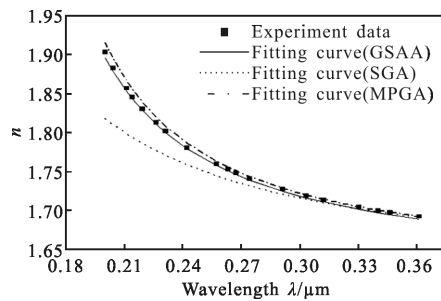


图 3 方解石晶体(o 光)3种智能算法下色散方程在光谱区(0.20~0.361 μm)的拟合曲线

Fig.3 Fitting curves of dispersion equation in three intelligent algorithms for calcite crystal(o light) in spectral region (0.20~0.361 μm)

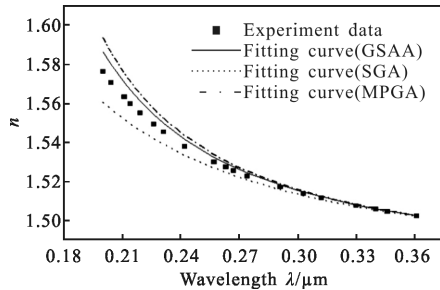


图 4 方解石晶体(e 光)3种智能算法下色散方程在光谱区(0.20~0.361 μm)的拟合曲线

Fig.4 Fitting curves of dispersion equation in three intelligent algorithms for calcite crystal (e light) in spectral region (0.20~0.361 μm)

另外,根据参考文献[10]中氟化镁的折射率值,通过遗传模拟退火算法进行参数反演,获得氟化镁在光谱区(0.21386~1.0830 μm)修正的 Sellmeier 方程为:

$$\begin{cases} n_o^2 = 1.88622 + \frac{4.515 \times 10^{-3}}{\lambda^2 - 7.215 \times 10^{-3}} - 4.054 \times 10^{-3} \cdot \lambda^2 \\ n_e^2 = 1.91828 + \frac{4.758 \times 10^{-3}}{\lambda^2 - 7.042 \times 10^{-3}} - 4.350 \times 10^{-3} \cdot \lambda^2 \end{cases} \quad (6)$$

由 MATLAB 计算程序可得氟化镁晶体 o 光和 e 光拟合结果的差方和: o 光为 $s_o = \sum_{i=1}^{20} (n_o - n_o')^2 = 5.28 \times 10^{-7}$,

e 光为 $s_e = \sum_{i=1}^{20} (n_e - n_e')^2 = 5.55 \times 10^{-7}$ 。

而参考文献[10]给出了氟化镁晶体在光谱区(0.21386~1.0830 μm)的色散方程表达式,经过计算,得到该方程的拟合结果的差方和: o 光为 $s_o = 1.38 \times 10^{-4}$, e 光为 $s_e = 2.56 \times 10^{-3}$ 。显然,利用遗传模拟退火算法使得拟合的总体效果大幅度提高。同样,根据参考文献[10]硫化锌(立方晶系)的折射率值,通过遗传模拟退火算法进行参数反演,获得硫化锌在光谱区(0.440~1.400 μm)修正的 Sellmeier 方程为:

$$n^2 = 5.19424 + \frac{1.067 \times 10^{-1}}{\lambda^2 - 8.668 \times 10^{-2}} - 3.321 \times 10^{-2} \cdot \lambda^2 \quad (7)$$

由 MATLAB 计算程序可得硫化锌晶体拟合结果的差方和为 $s = \sum_{i=1}^{14} (n - n')^2 = 6.30 \times 10^{-5}$,而参考文献[10]给出了硫化锌晶体在光谱区(0.440~1.400 μm)的色散方程表达式,经过计算,得到该方程的拟合结果的差方和为 $s = 1.10 \times 10^{-4}$ 。

3 结论

建立不同光学材料的色散方程对于研究其光学性质具有重要意义,文中将遗传模拟退火算法应用于修正的 Sellmeier 方程的参数反演中,建立了 K9 玻璃和晶体(ZnS, MgF₂, Calcite)的色散方程。同时比较了遗传模拟退火算法、标准遗传算法及多种群遗传算法在迭代搜索性能方面的差异,结果表明:遗传模拟退火算法所得拟合效果最优和性能最稳定,且多种群遗传算法的拟合效果要优于标准遗传算法。最后将通过遗传模拟退火算法所得光学材料在某一光谱区域的色散方程应用于相邻光谱区域中,发现色散方程的拟合值与实验值符合得较好,表明通过该方法所得色散方程具有较好的外推性,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他材料色散方程时使用。

参考文献:

- [1] Shen Zhenmin, Liu Hongying, Lan Tian, et al. Disersion and compensation of femtosecond laser pulses in the atmosphere

- [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(4): 940–946. (in Chinese)
沈振民, 刘红影, 蓝天, 等. 飞秒激光脉冲在大气中的色散及补偿[J]. 红外与激光工程, 2013, 42(4): 940–946.
- [2] Kim J P, Sarangan A M. Temperature-dependent Sellmeier equation for the refractive index of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [J]. *Opt Lett*, 2007, 32(5): 536–538.
- [3] Salem A M. Structure, refractive-index dispersion and the optical absorption edge of chemically deposited $\text{Zn}_x\text{Cd}_{(1-x)}\text{S}$ thin films[J]. *Appl Phys A*, 2002, 74(2): 205–211.
- [4] Li Xishan, Jiang Haiying, Jiang Anmin. Dispersion measurement of optical glass and discussion of the approximate calculation method [J]. *Acta Photonica Sinica*, 1995, 15(2): 206–211. (in Chinese)
李锡善, 蒋海英, 蒋安民. 光学玻璃的色散特性测量及近似计算方法的讨论[J]. 光学学报, 1995, 15(2): 206–211.
- [5] Zhao Shuang, Wu Fuquan. The study on dispersive equation and thermal refractive index coefficient of quartz crystal [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, 35(8): 1183–1186. (in Chinese)
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.
- [6] Chen Xiyuan, Shan Ming. Dispersion formula of calcite [J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2007, 34(5): 38–42. (in Chinese)
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.
- [7] Zhang Xiaojuan, Qiao Guanjun, Liu Hanchen. Simulated annealing algorithm for multi-layer optical thin films [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, 30(12): 3660–3664. (in Chinese)
张晓娟, 乔冠军, 刘汉臣. 多层光学薄膜模拟退火算法的研究[J]. 光学学报, 2010, 30(12): 3660–3664.
- [8] Zhu Hanhao, Piao Shengchun, Zhang Haigang, et al. The research for seabed parameters inversion with fast field program [J]. *Journal of Harbin Engineering University*, 2012, 33(5): 648–652. (in Chinese)
祝捍皓, 朴胜春, 张海刚, 等. 快速场(FFP)算法反演海底参数研究[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2012, 33(5): 648–652.
- [9] Jiang Simin, Zhang Yali, Cai Yi, et al. Groundwater contaminant identification by hybrid simplex method of simulated annealing [J]. *Journal of Tongji University*, 2013, 41(2): 253–257. (in Chinese)
江思珉, 张亚力, 蔡奕, 等. 单纯形模拟退火算法反演地下水污染源强度[J]. 同济大学学报, 2013, 41(2): 253–257.
- [10] Li Jingzhen. Handbook of Optics [M]. Xi'an: Press of Science in Shanxi, 1986: 1300–1326. (in Chinese)
李景镇. 光学手册 [M]. 西安: 陕西科技出版社, 1986: 1300–1326.
- [11] Yang Lei, Tian Zuohua, Liu Shan, et al. Genetic simulated annealing algorithm of controller parameter optimization for time-delay systems [J]. *Computer Simulation*, 2009, 23(2): 154–156. (in Chinese)
杨磊, 田作华, 刘山, 等. 时滞系统控制参数优化的遗传模拟退火算法[J]. 计算机仿真, 2009, 23(2): 154–156.
- [12] Wang Anxiang, Feng Jian. Genetic simulated annealing algorithm in the parameter retrieval of light scattering model [J]. *Laser Technology*, 2009, 33(1): 32–35. (in Chinese)
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.
- [13] Wang Liping, Zhang Lichao, He Fengyun, et al. Design of aspheric mirror for panoramic imaging system using multi-population genetic algorithm [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2009, 17(5): 1020–1025. (in Chinese)
王丽萍, 张立超, 何锋贇, 等. 采用多种群遗传算法的全景成像系统非球面设计 [J]. 光学精密工程, 2009, 17(5): 1020–1025.