

中国激光

基于粒子群算法的超材料吸波体传感器逆设计

韩丁, 马子寅, 王俊林^{*}, 王鑫^{**}, 刘苏雅拉图

内蒙古大学电子信息工程学院, 内蒙古 呼和浩特 010021

摘要 传统的超材料吸波器设计方法严重依赖于设计人员的知识、经验和直觉, 无法实现超材料的快速设计。近年来, 基于人工智能技术的超材料逆设计方法发展迅速, 但该方法难以应对不同尺寸的设计, 容易陷入局部最优状态, 并且尚无针对超材料吸波器的专用设计方法。针对以上问题, 提出一种基于改进粒子群算法的超材料吸波器快速设计方法, 采用自动寻峰技术计算超材料吸波器的吸收特性, 实现对超材料金属谐振层的寻优与逆设计。结果表明, 使用基于粒子群算法的超材料快速设计方法可设计出类似人工设计的结果, 在 0.3122 THz 处实现了对入射电磁波的近乎完美吸收。通过以待测分析物代替原有中间介质层等方法可有效增强待测分析物与谐振磁场的耦合, 提升了超材料吸波器的传感特性。与传统的超材料设计方法相比, 基于粒子群算法的超材料吸波器逆设计方法降低了对设计人员的电磁学理论及仿真经验的要求, 设计出的微腔结构超材料吸波器比使用连续介质层的超材料吸波器具有更好的传感性能。基于粒子群算法的超材料吸波器逆设计方法为超材料吸波体传感器的设计提供了新的思路, 具有广阔的应用前景。

关键词 传感器; 太赫兹; 超材料吸波器; 粒子群算法; 超材料逆设计

中图分类号 O436 文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL202249.1714001

1 引言

超材料传感器具有检测周期短、操作简单、样品需求量少、不改变样品性质等特点, 在医疗诊断、食品安全、农药检测等领域应用广泛, 可实现对待测样品的无标记、快速检测^[1-2]。

太赫兹波段位于 0.1~10 THz 之间, 其光子能量小, 不易对待测生物分子造成电离损伤, 且由于大量分子的转动和振动能级位于太赫兹波段, 可采用太赫兹波对其进行特异性识别^[3-5]。因此, 开发设计具有优越传感特性的太赫兹超材料具有重大意义, 可广泛应用于生物、医学等传感领域。

传统超材料设计主要以阻抗匹配、等效电路理论为基础, 通过模型设计、参数扫描和手工优化进行设计, 需要进行成百上千次的参数扫描操作, 耗费大量计算机资源。该设计方法对设计人员的电磁学理论与仿真经验有较高的要求, 且严重依赖于设计者的超材料设计经验和直觉^[6-9]。采用传统方式往往难以快速设计出“最优”的超材料。因此, 迫切需要开发一种快速、自动的超材料设计方法。

近年来, 随着数据科学的发展, 人工智能技术深度融入多个领域, 并取得良好的发展成果^[10-11]。在超材料设计领域, Qiu 等^[12]提出“REACTIVE”方法, 使用

倒谱分析、自编码器、多层感知机技术实现超材料金属谐振层的自动设计, 并通过对比“REACTIVE”法和常规法的设计时间、迭代次数等, 证明基于人工智能的超材料设计的可行性。Shi 等^[13]提出“AMID”方法, 使用卷积神经网络、自编码器和改进的支持向量机技术进行超材料金属谐振层的自动设计, 该算法的平均分类准确率约为 81.6%。截至目前, 超材料与人工智能结合的逆设计方法大多采用深度学习、神经网络的技术, 先将大量的超材料样本输入神经网络进行训练, 再使用训练好的模型进行超材料逆设计预测^[14-21]。这些方法往往需要 2000 组以上的超材料训练样本, 准备样本数量较多; 对于不同尺寸及材料的底层金属板和中间介质层不具有普适性, 更换尺寸和材料后需要重新准备训练集, 训练新的神经网络模型, 耗费大量的计算机资源。这些方法容易陷入局部最优, 对于较复杂的超材料金属谐振层泛化性能较差。对于设计人员而言, 输入量为电磁曲线, 意味着设计者需要先准备一个具有 1000 个点的 S 曲线进行输入, 对其仿真经验要求较高。

邵天宇等^[22]使用粒子群算法(PSO)对导模谐振滤波器的结构参数进行设计, 与使用电磁场仿真软件 CST 和严格耦合波分析法(RCWA)对比, 对硅光栅及超材料光栅的关键参数进行寻优, 验证了自动化设计

收稿日期: 2021-11-25; 修回日期: 2021-12-18; 录用日期: 2021-12-31

基金项目: 国家自然科学基金(51965047)、内蒙古自然科学基金(2021MS06012)、内蒙古自治区科技攻关项目(2020GG0185)

通信作者: *wangjunlin@imu.edu.cn; **mems_wang@163.com

方法的可行性。此类自动设计方法均为将优化算法应用于关键结构参数的寻优,设计自由度低,适用场景单一,需要解决不同的设计问题时仍然依赖于人工设计。

Zhang 等^[23]提出一种基于粒子群算法的超材料设计方法,用于固定反射相位的编码单元设计。该方法通过改变超材料编码矩阵实现了超材料快速设计,但对于超材料吸波器设计并不适用,且没有对粒子群算法进行优化,设计时间较长。

为了减少超材料金属谐振层的设计时间、降低对科研人员超材料设计经验的要求,本文提出一种基于改进粒子群算法的超材料金属谐振层逆向设计方法。与现有的超材料金属谐振层设计方法相比,所提出的方法具有更强的适应性,减少了设计时间,同时完全避免了对设计人员的设计经验和电磁学知识的要求,在探究超材料机理及应用设计方面具有重大意义。

本文针对折射率传感器的应用需求,使用所提出的方法设计了一款超材料吸波器,并继续深入研究了其传感特性。为了进一步提升超材料的传感性能,分析了使用微腔结构代替中间介质层的影响,得出使用微腔结构代替中间介质层可以有效提高超材料传感性能的结论。

2 基于改进粒子群算法的超材料吸波器逆设计方法

2.1 方法研究

本文基于权重线性递减的粒子群算法(PSO-W)实现超材料吸波器的快速设计,方法流程如图 1 所示。设计人员输入超材料结构单元周期、厚度、介电常数等设计参数,使用粒子群优化算法自动进行寻优迭代计算,输出符合条件的“最优”超材料吸波器设计结果。

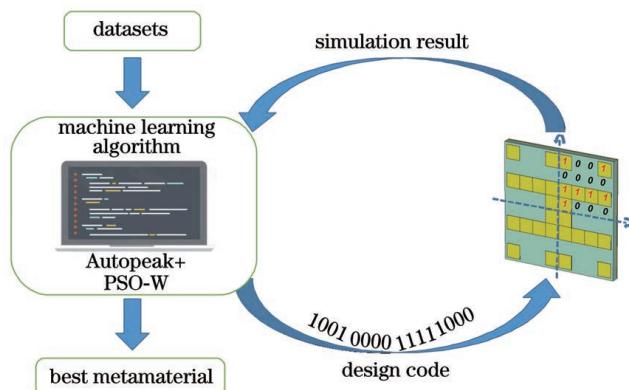


图 1 基于粒子群算法的超材料快速设计方法流程

Fig. 1 Flowchart of the rapid design method of metamaterials based on particle swarm optimization

超材料吸波器的电磁特性主要取决于金属谐振层的设计。本文基于 CST-MATLAB 联合仿真技术实现超材料谐振层的编程化自动仿真,提出了一种超材料吸波器设计结构。该超材料为三层式结构,由下至上分别为金属层、中间介质层、金属谐振层。本文提出

了一种将金属谐振层矩阵化的编程方法,金属谐振层四周各空出 $5 \mu\text{m}$ 宽度,其余部分分为 8×8 的金属小方格,采用两次轴对称设计,即上下左右均为对称图形。因此,在计算机编程中,可以使用 4×4 的 0-1 矩阵描述金属谐振层,将矩阵中“1”定义为该部分被金属覆盖,“0”定义为空白。

仿真结果中的每个吸收率曲线包含 1000 个点,且数据中包含大量随机噪声,部分吸收率曲线还存在多峰、重峰及弱峰的情况。对于超材料设计者而言,一般只关注峰值与半高宽(FWHM)。本文提出一种快速寻峰方法,使用滑动滤波方式进行滤波,减少信号噪声对寻峰的影响。该方式可以有效地抑制随机噪声并保留陡峭边沿,并能有效滤除高频噪声。使用一阶导数下过零的方式确定峰址,相比直接比较法,该方法能减少对弱峰和重峰的错误判断,具有更高的灵敏度和灵活性。

超材料吸波器的谐振层逆设计是寻找最优 4×4 矩阵的过程。本文使用超材料吸波器中的吸收率和品质因数 Q 作为目标值,即寻找吸收峰最高耸且陡峭的超材料吸波器对应的矩阵。采用粒子群算法作为超材料金属谐振层的设计寻优算法。粒子群算法是群智能算法的一种,通过适应度函数评价粒子,并改变粒子的速度,在迭代中更改粒子的编码,寻找最优解。粒子群算法流程图如图 2 所示。

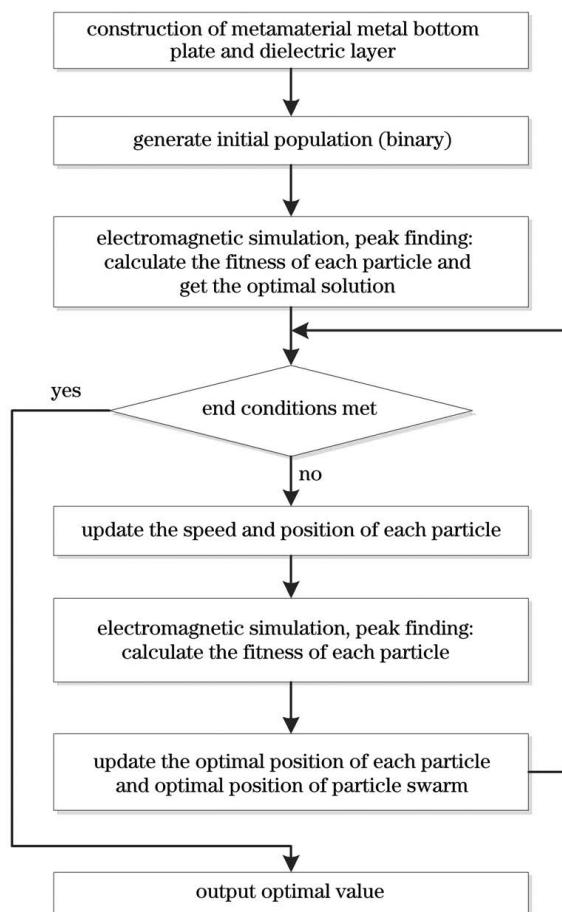


图 2 粒子群算法流程

Fig. 2 Particle swarm optimization process

经典粒子群算法速度及位置的变化是由粒子的惯性速度、该粒子的历史最优位置以及所有粒子的历史最优位置共同决定的,即:

$$\begin{aligned} v_i = & \omega \times v_i + c_1 \times \text{rand}() \times (\text{pbest}_i - x_i) + \\ & c_2 \times \text{rand}() \times (\text{gbest}_i - x_i), \end{aligned} \quad (1)$$

式中: ω 为惯性因子,其大小决定了算法的全局搜索能力和局部搜索能力;pbest 为该粒子的历史最优位置;gbest 为所有粒子的历史最优位置; c_1, c_2 分别表示个体学习因子和社会学习因子。

标准粒子群算法的 ω 选择难以兼顾全局搜索和局部搜索,当 ω 较大时,全局寻优能力较强,局部搜索能力较差,而选择较小的 ω 时,全局搜索能力减弱,局部搜索能力较强。因此,本文使用权重线性递减的粒子群算法,模拟人工设计超材料时,不断扫参寻优过程。权重线性递减的粒子群算法中的惯性因子 $\omega^{(t)}$ 随着迭代次数的增多而减小,在迭代初期有较强的全局搜索能力,在迭代后期有较强的局部搜索能力,有效防止局部最优问题,也减少了实验时间。 $\omega^{(t)}$ 表达式为

$$\omega^{(t)} = (\omega_{\text{ini}} - \omega_{\text{end}})(G_k - g)/G_k + \omega_{\text{end}}, \quad (2)$$

式中: G_k 为最大迭代次数; g 为当前迭代次数; ω_{ini} 为初始的惯性权重; ω_{end} 为最终惯性权重。

适应度是粒子群优化算法的目标值。在超材料设计中,超材料吸波器的吸收率曲线由 $A(\omega) = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2$ 得出,其中 S_{11} 和 S_{21} 分别表示结构的反射曲线和透射曲线。太赫兹超材料吸波器的传感特性主要的参数指标为:吸收峰的吸收率、品质因数 Q 、折射率灵敏度 S_f 、优良系数(FOM)值等。品质因数 $Q = f_0/\omega_{\text{FWHM}}$,即吸收峰频率 f_0 与半高宽 ω_{FWHM} 的比值。 Q 值代表了传感器吸收率曲线中吸收峰的尖锐程度,当吸收峰的频率确定时, Q 值主要由吸收峰的半高宽决定。折射率灵敏度 S_f 反映了传感器的灵敏程度,是不同待测分析物频率偏移量 Δf 和折射率差值 Δn 的比,即 $S_f = \Delta f / \Delta n$,主要与中间介质层设计有关。FOM 值反映了传感器的整体性能,是折射率灵敏度和半高宽的比,即 $c_{\text{FOM}} = S_f / \omega_{\text{FWHM}}$ 。本文使用吸收峰的吸收率和品质因数 Q 作为评价传感器的参数指标。

表 1 基于粒子群算法的超材料逆设计、基于深度学习的超材料逆设计以及人工超材料设计用时对比

Table 1 Comparison of time consumption of metamaterial inverse design based on particle swarm optimization, metamaterial inverse design based on deep learning and manual metamaterial design

Design result parameters	Design method		
	PSO-W	Deep learning	Manual design
Simulation times	480	2000	1000
Time required for completing design / min	380	1600	800

权重线性递减的粒子群算法在迭代前期具有更好的全局搜索能力,在迭代后期具有更好的局部搜索能力,因此比经典粒子群算法收敛速度更快。在第 24 次迭代后,粒子群算法收敛,得到 Q 值为 43.73 的太赫

2.2 逆设计实验

为了验证本方法的可行性,使用如下参数进行实验:将电导率为 $5.8 \times 10^7 \text{ S/m}$ 的金属铜作为底层金属板和金属谐振层材料,底层金属板厚度为 $2 \mu\text{m}$,金属谐振层厚度为 $0.3 \mu\text{m}$,结构单元大小为 $250 \mu\text{m}$,每个正方形的小单元边长为 $15 \mu\text{m}$,中间介质层采用相对介电常数为 3.5 的柔性聚酰亚胺,厚度为 $15 \mu\text{m}$ 。此外,对于粒子群算法,设置初始种群个数为 20,最大迭代次数为 100。使用相同参数、相同初始种群的经典粒子群算法和权重线性递减的粒子群算法的适应度变化曲线如图 3 所示。

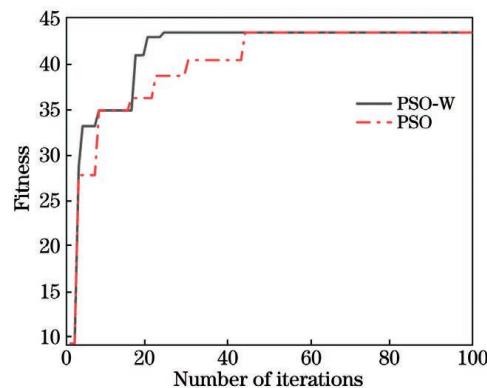


图 3 经典粒子群算法(PSO)和权重线性递减的粒子群算法(PSO-W)的适应度变化曲线

Fig. 3 Fitness curves of classical particle swarm optimization (PSO) and particle swarm optimization algorithm with linearly decreasing weight (PSO-W)

表 1 所示为基于粒子群算法的超材料逆设计、基于深度学习的超材料逆设计以及人工超材料设计所需时间和仿真次数对比。基于粒子群算法的超材料逆设计所需仿真次数为 480 次,用时约 380 min,仿真全程无需人员干预,降低了设计难度,减少了用于思考、计算和修改相关参数的时间。基于深度学习的超材料逆设计方法虽然只需要 1 次迭代就可以输出最终结果,但训练集在准备阶段及测试阶段需要 2000 组以上的仿真数据,总体仿真次数大于基于粒子群算法的超材料逆设计。可见基于粒子群算法的超材料设计具有效率更高、时间更短、设计难度低的特点。

兹超材料吸波器。该超材料如图 4 所示。金属谐振层为类“工”字形结构,在传统的人工超材料设计方法中,“工”字形结构也是一种常见的超材料金属谐振层结构,本方法设计出的“工”字形结构较传统“工”字形结

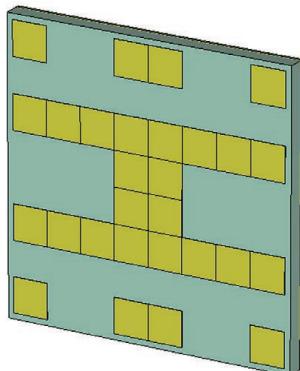


图 4 自动设计出的超材料吸波器结构示意图

Fig. 4 Structure diagram of automatically designed metamaterial absorber

构在四周和上方多出了一些矩形谐振层。

超材料吸波器吸收谱如图 5 所示,在 0.3122 THz 处产生吸收率为 99.08%,半高宽为 7.14 GHz 的吸收峰,该吸波器的 Q 值为 43.73。可见该超材料吸波器在 0.3122 THz 处实现了对入射太赫兹波的近乎完美的吸收,吸收峰较窄,具有较高的频率选择特性。相比于人工设计中常见的四周没有矩形金属谐振层的“工”字形结构,本结构四周的小矩形金属谐振层使谐振频率由 0.3116 THz 蓝移至 0.3122 THz,吸收峰半高宽由 7.26 GHz 减少至 7.14 GHz,进而将 Q 值由 42.92 提升至 43.73。由此可以说说明,基于粒子群算法的快速设计方法可取得与人工设计相似的金属谐振层设计,在高 Q 值吸波器设计中具有较好的优化能力,从而证明了基于粒子群算法的快速设计方法的可行性。

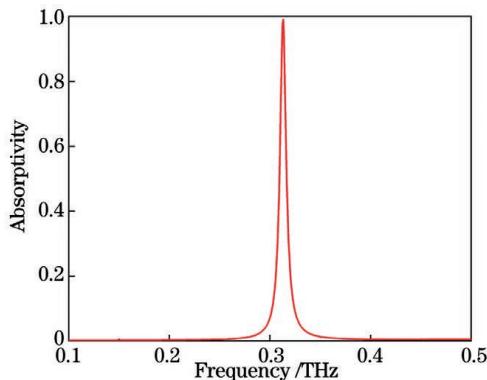


图 5 具有连续介质层的太赫兹超材料吸波器的吸收特性仿真曲线

Fig. 5 Simulation curve of absorption characteristics of terahertz metamaterial absorber with continuous dielectric layer

3 基于连续介质层的超材料吸波器设计方案

将折射率 n 在 1.0~2.0 之间的不同待测分析物覆盖在超材料表面,进行传感性能分析,仿真结果如图 6 所示。由图 6 可见,谐振频率随着折射率的增加而发生明显红移,而谐振吸收率几乎没有改变。说明

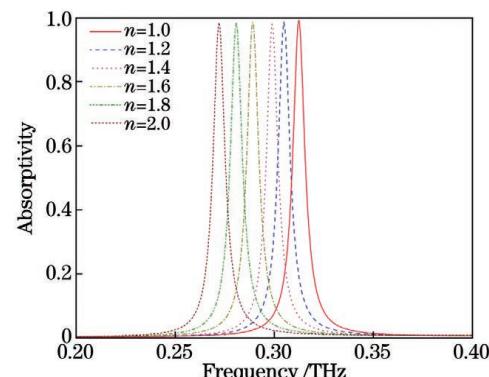
图 6 待测分析物折射率 n 为 1.0~2.0 时太赫兹超材料吸波器的吸收特性仿真曲线

Fig. 6 Simulation curve of absorption characteristics of terahertz metamaterial absorber when the refractive index of the analyte to be measured changes from $n = 1.0$ to $n = 2.0$

该超材料吸波器在传感过程中一直具有较强的频率选择特性,在不同的待测分析物覆盖时可以表现出不同的电磁特性。

为了研究超材料吸波器被不同待测分析物覆盖时的谐振频率偏移情况,使用厚度为 40 μm 、折射率 n 在 1.0~2.0 之间的不同待测分析物覆盖超材料吸波器,得到谐振频率变化及其拟合曲线,如图 7 所示。由图 7 可知,曲线的斜率即传感器灵敏度 S_f 为 45.18 GHz/RIU, FOM 值约为 6.51。由此可以说明,该超材料传感器的线性度较好,灵敏度较强,可以作为折射率传感器使用。

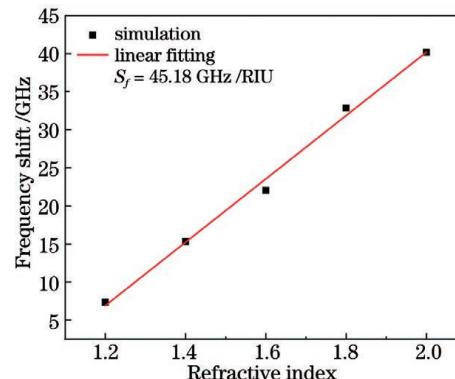
图 7 当覆盖待测分析物的厚度为 40 μm 时不同折射率的待测分析物覆盖的超材料吸波器谐振频率变化及其拟合曲线

Fig. 7 Variation and fitting curve of resonant frequency of metamaterial absorber covered by analytes with different refractive indices. The depth of the covering analyte to be tested is 40 μm

4 基于微腔结构的超材料吸波器设计方案

4.1 传感机理研究

为了探究超材料吸波器的谐振传感机理,对谐振

频率处的表面、 $x=0$ 截面及 $y=0$ 截面的电场及磁场分布进行仿真。如图 8 所示,金属谐振层的表面电流主要集中分布在“工”字的中心位置,电场集中分布于上下两端,说明电偶极子的谐振导致了该谐振峰。如

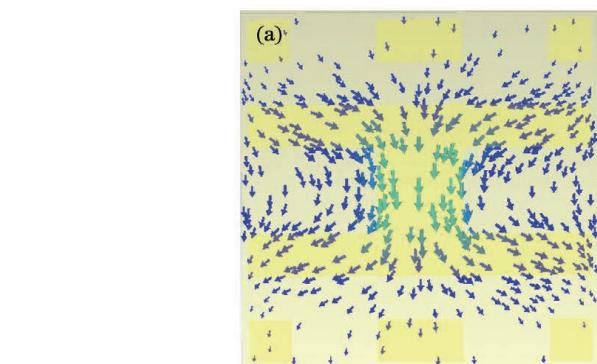


图 8 超材料谐振点处表面电流及电场分布。(a) 表面电流分布;(b) 表面电场分布

Fig. 8 Surface current and electric field distributions at the resonance point of the metamaterial. (a) Surface current distribution; (b) surface electric field distribution

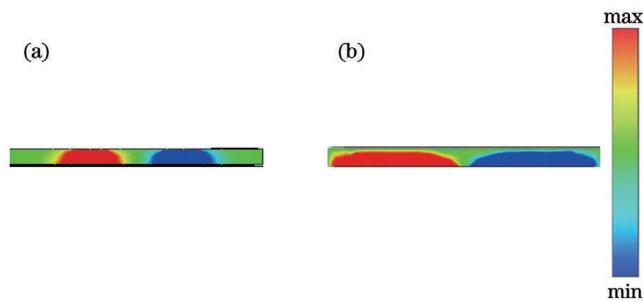


图 9 超材料谐振点处电磁场分布。(a) $y=0$ 截面电场分布; (b) $x=0$ 截面磁场分布

Fig. 9 Electromagnetic field distributions at the resonance point of the metamaterial. (a) Electric field distribution at the $y=0$ section; (b) magnetic field distribution at the $x=0$ section

4.2 结构设计与仿真

基于上述对超材料电磁特性的分析,考虑进一步加强谐振电磁场与待测分析物的相互作用,获得更好的折射率灵敏度,降低设计过程复杂度。为此提出一种具有微腔结构的超材料吸波体传感器,该结构自上而下分别为顶部支撑层、金属谐振层、微流通道、金属板、基底。图 10 为具有微腔结构的超材料吸波器示意图,将待测分析物放置于原有的中间介质层的位置,超材料金属谐振层部分与图 4 所示的超材料结构相同。

当微腔结构中不填充任何待测分析物时,超材料吸波器吸收谱如图 11 所示,在 0.5145 THz 处产生吸收率达到 81.02%,半高宽为 14.98 GHz 的吸收峰。可知由于中间介质层处于真空状态,电磁场无法有效传递,从而减弱了超材料的谐振特性。

当待测分析物折射率 $n=2.0$ 时,待测分析物的介电常数与设计时使用的聚酰亚胺相近,超材料吸波器实现了对太赫兹波的“完美”吸收。如图 12 所示,当

图 9 所示,大部分的谐振电场分布于中间介质层中,而具有连续介质层的超材料吸波器用于传感时,是将待测分析物恰好覆盖金属谐振层,谐振磁场难以与其充分耦合。

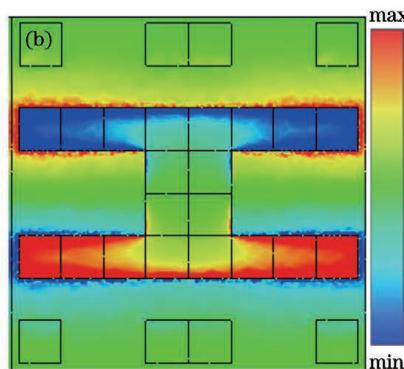


图 10 具有微腔结构的超材料结构示意图

Fig. 10 Schematic diagram of metamaterial structure with microcavity structure

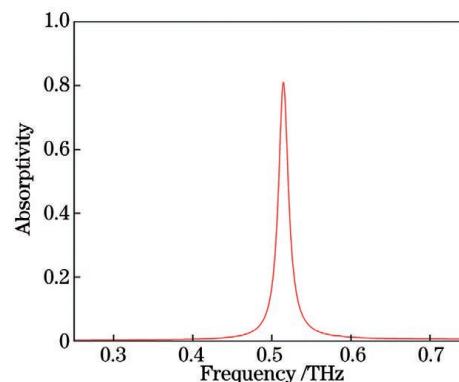


图 11 具有微腔结构的超材料未填充待测分析物时的吸收特性仿真曲线

Fig. 11 Simulation curve of absorption characteristics of metamaterials with microcavity structure without filling any analyte to be measured

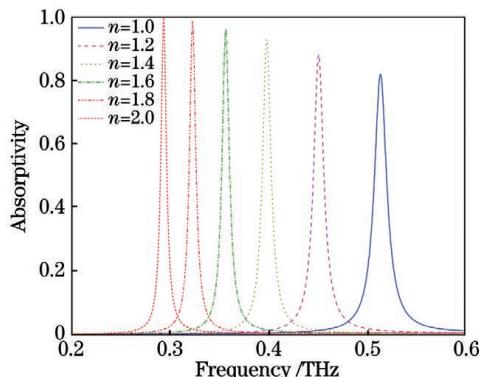


图 12 待测分析物折射率 n 为 1.0~2.0 时具有微腔结构的超材料吸波器的吸收特性仿真曲线

Fig. 12 Simulation curve of absorption characteristics of metasurface absorber with microcavity structure when the refractive index of the analyte to be measured changes from $n=1.0$ to $n=2.0$

使用不同的待测分析物时,吸收率谐振峰没有重合,传感性能远远高于使用中间介质层的超材料吸波器。如图 13 所示,该超材料吸波器的传感灵敏度 $S_f=220.8 \text{ GHz/RIU}$,FOM 值约为 14.77。使用待测分析物代替中间介质层,并使待测分析物完全覆盖超材料金属谐振层,可以使待测分析物与超材料吸波器的谐振磁场耦合,进而提高超材料的传感性能。

表 2 具有连续介质层与具有微腔结构的超材料吸波器参数对比

Table 2 Comparison of parameters of metasurface absorbers with continuous dielectric layer and microcavity structure

Sensing characteristic parameters of metasurface absorber	Dielectric layer morphology	
	Dielectric layer	Microcavity structure
Resonant frequency / THz	0.3122	0.5145
Absorptivity / %	99.08	81.02
FWHM / GHz	7.14	14.95
Quality factor Q	43.73	34.83
Sensitivity S_f / (GHz · RIU ⁻¹)	45.18	220.80
FOM	6.51	14.77

将所提出的连续介质层传感器和微腔结构传感器与相似频段的其他超材料吸波体传感器进行对比,结果如表 3 所示。由表 3 可见,对比相似结构的微腔结构传

表 3 本文提出的传感器与文献中的传感器性能对比

Table 3 Comparison of performances of the sensors proposed in this paper and those in the literature

Method	Frequency / THz	Sensitivity / (GHz · RIU ⁻¹)
Method in Ref. [24]	1.00~1.20	192.00
Method in Ref. [25]	0.40~0.70	153.17
Method in Ref. [26]	—	220.00
Our method A (dielectric layer)	0.25~0.35	45.18
Our method B (microcavity structure)	0.25~0.55	220.80

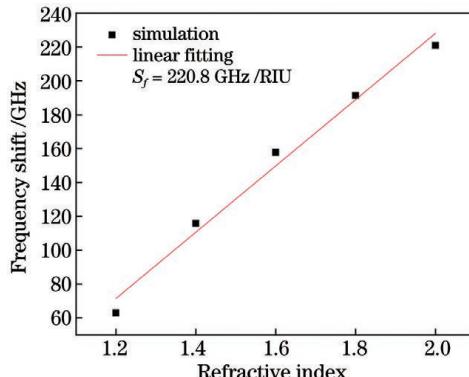


图 13 不同折射率的待测分析物覆盖的具有微腔结构的超材料吸波器谐振频率变化及其拟合曲线

Fig. 13 Variation and fitting curve of resonant frequency of metasurface absorber with microcavity structure covered by analytes to be measured with different refractive indices

表 2 比较了使用连续介质层和微腔结构的超材料吸波器的传感性能参数。由表 2 可知,相较使用连续介质层的超材料吸波器,使用微腔结构的超材料吸波器在谐振峰半高宽、吸收率等方面表现较差,但在传感器的折射率灵敏度方面有较高提升,且对于超材料的快速、自动逆设计而言,使用微腔结构的超材料吸波器设计可以减少设计过程的参数输入,简化设计过程。

表 2 具有连续介质层与具有微腔结构的超材料吸波器参数对比

Table 2 Comparison of parameters of metasurface absorbers with continuous dielectric layer and microcavity structure

Sensing characteristic parameters of metasurface absorber	Dielectric layer morphology	
	Dielectric layer	Microcavity structure
Resonant frequency / THz	0.3122	0.5145
Absorptivity / %	99.08	81.02
FWHM / GHz	7.14	14.95
Quality factor Q	43.73	34.83
Sensitivity S_f / (GHz · RIU ⁻¹)	45.18	220.80
FOM	6.51	14.77

感器及相似频段的连续介质层传感器,本文设计出的具有微腔结构的超材料传感器具有更高的折射率灵敏度,且实现 0.25~0.55 THz 的微流道折射率传感。

5 结 论

本文提出了一种基于粒子群算法和自动寻峰算法的超材料快速逆设计方法。以所提方法设计出的超材料结构为例,提出了基于微腔结构的超材料吸波器设计方案,并进行深入的仿真研究。结果显示,快速设计方法不仅能节约超材料金属谐振层设计时间,简化设计流程,还可设计出与人工设计类似的超材料结构。在 0.3122 THz 的谐振点处产生吸收率为 99.08%,半高宽为 7.14 GHz 的吸收峰,具有优越的频率选择特性。当使用连续介质层的超材料吸波器结构时,传感器灵敏度 S_f 为 45.18 GHz/RIU, FOM 值约为 6.51;在使用微腔结构代替中间介质层后,传感器灵敏度 S_f 为 220.8 GHz/RIU, FOM 值约为 14.77。基于粒子群算法的超材料吸波器逆设计方法相比传统设计方法,避免了对设计人员的知识和经验的严苛要求。本文研究的超材料快速设计方法为后续人工智能技术应用于超材料设计提供了技术基础,对未来的超材料吸波器机理分析和传感器设计具有指导意义。微腔结构的超材料与传统结构的超材料相比,虽然吸收率、谐振频率、半高宽等参数表现不够理想,但具有更加优越的传感特性,并且简化了超材料设计流程,更符合传感器设计需求。微腔结构的超材料结构为后续超材料吸波器应用设计提供了新的解决方案。

参 考 文 献

- [1] Xu W D, Xie L J, Ying Y B. Mechanisms and applications of terahertz metamaterial sensing: a review[J]. *Nanoscale*, 2017, 9(37): 13864-13878.
- [2] Tantiwachapan K, Durmaz H. Herbicide/pesticide sensing with metamaterial absorber in THz regime[J]. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2021, 331: 112960.
- [3] 王鑫, 王俊林. 基于三维开口谐振环阵列和微流通道的太赫兹超材料吸收体传感器[J]. 光学学报, 2020, 40(19): 1904001. Wang X, Wang J L. Terahertz metamaterial absorber sensor based on three-dimensional split-ring resonator array and microfluidic channel[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(19): 1904001.
- [4] Ren A F, Zahid A, Fan D, et al. State-of-the-art in terahertz sensing for food and water security: a comprehensive review[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2019, 85: 241-251.
- [5] Gallot G. Terahertz sensing in biology and medicine [J]. *Photoniques*, 2020(101): 53-58.
- [6] Qi L M, Liu C, Shah S M A. A broad dual-band switchable graphene-based terahertz metamaterial absorber[J]. *Carbon*, 2019, 153: 179-188.
- [7] Duan G W, Schalch J, Zhao X G, et al. A survey of theoretical models for terahertz electromagnetic metamaterial absorbers[J]. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2019, 287: 21-28.
- [8] Mishra R, Sahu A, Panwar R. Cascaded graphene frequency selective surface integrated tunable broadband terahertz metamaterial absorber[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2019, 11(2): 18593180.
- [9] Xiong H, Tang M C, Li M, et al. Equivalent circuit method analysis of graphene-metamaterial (GM) absorber[J]. *Plasmonics*, 2018, 13(3): 857-862.
- [10] Massa A, Marcantonio D, Chen X D, et al. DNNs as applied to electromagnetics, antennas, and propagation: a review [J]. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2019, 18(11): 2225-2229.
- [11] Khatib O, Ren S M, Malof J, et al. Deep learning the electromagnetic properties of metamaterials: a comprehensive review[J]. *Advanced Functional Materials*, 2021, 31(31): 2101748.
- [12] Qiu T S, Shi X, Wang J F, et al. Deep learning: a rapid and efficient route to automatic metasurface design[J]. *Advanced Science*, 2019, 6(12): 1900128.
- [13] Shi X, Qiu T S, Wang J F, et al. Metasurface inverse design using machine learning approaches[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2020, 53(27): 275105.
- [14] Jiang J Q, Fan J A. Simulator-based training of generative neural networks for the inverse design of metasurfaces[J]. *Nanophotonics*, 2019, 9(5): 1059-1069.
- [15] Ma J, Huang Y J, Pu M B, et al. Inverse design of broadband metasurface absorber based on convolutional autoencoder network and inverse design network[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2020, 53(46): 464002.
- [16] Zhu R, Qiu T, Wang J, et al. Phase-to-pattern inverse design paradigm for fast realization of functional metasurfaces via transfer learning[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 2974.
- [17] 贾宇翔, 王甲富, 陈维, 等. 基于智能算法的超材料快速优化设计方法研究进展[J]. 雷达学报, 2021, 10(2): 220-239. Jia Y X, Wang J F, Chen W, et al. Research progress on rapid optimization design methods of metamaterials based on intelligent algorithms[J]. *Journal of Radars*, 2021, 10(2): 220-239.
- [18] Hou Z Y, Tang T T, Shen J, et al. Prediction network of metamaterial with split ring resonator based on deep learning[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2020, 15(1): 83.
- [19] Ghorbani F, Beyraghi S, Shabaniour J, et al. Deep neural network-based automatic metasurface design with a wide frequency range[J]. *Scientific Reports*, 2021, 11: 7102.
- [20] Zhang Q, Liu C, Wan X, et al. Machine-learning designs of anisotropic digital coding metasurfaces[J]. *Advanced Theory and Simulations*, 2019, 2(2): 1800132.
- [21] Zhang H J, Wang Y, Zhao H G, et al. Accelerated topological design of metaporous materials of broadband sound absorption performance by generative adversarial networks[J]. *Materials & Design*, 2021, 207: 109855.
- [22] 邵天宇, 谷建强, 师文桥. 太赫兹导模谐振滤波器的自动化设计方法研究[J]. 中国激光, 2021, 48(20): 2014001. Shao T Y, Gu J Q, Shi W Q. Automated design study of guided-mode resonance filters working at terahertz frequencies[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2021, 48(20): 2014001.
- [23] Zhang Q, Wan X, Liu S, et al. Shaping electromagnetic waves using software-automatically-designed metasurfaces [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7: 3588.
- [24] 张赟佳, 王少飞, 钟高超, 等. 微流控-超材料集成多带太赫兹传感器[J]. 中国激光, 2019, 46(6): 0614038. Zhang Y J, Wang S F, Zhong G C, et al. Metamaterial-based terahertz multi-band sensors integrated with microfluidic channels[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(6): 0614038.
- [25] 张玉萍, 李彤彤, 吕欢欢, 等. 工字形太赫兹超材料吸波体的传感特性研究[J]. 物理学报, 2015, 64(11): 117801. Zhang Y P, Li T T, Lü H H, et al. Study on sensing characteristics of I-shaped terahertz metamaterial absorber[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(11): 117801.
- [26] Hu X, Xu G Q, Wen L, et al. Metamaterial absorber integrated microfluidic terahertz sensors[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2016, 10(6): 962-969.

Inverse Design of Metamaterial Absorber Sensor Based on Particle Swarm Optimization

Han Ding, Ma Ziyin, Wang Junlin^{*}, Wang Xin^{**}, Liu Suyalatu

College of Electronic Information Engineering, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, Inner Mongolia, China

Abstract

Objective It is of great significance to develop and design terahertz metamaterials with superior sensing characteristics, since such metamaterials can be widely used in the sensing fields of biology, medicine and so on. Traditional metamaterial design is mainly based on impedance matching and equivalent circuit theory. It is designed through model design, parameter scanning and manual optimization. It needs hundreds of parameter scanning operations and consumes a lot of computer resources. This design method has high requirements for the designers' electromagnetic theory and simulation experience, and it depends heavily on the designers' metamaterial design experience and intuition. In recent years, the metamaterial inverse design method based on artificial intelligence technology has developed rapidly. However, it is difficult for this method to deal with the design of different sizes, the optimization is easy to fall into the local optimal state, and there is no special design method for metamaterial absorber. To solve the above problems, a rapid design method of metamaterial absorber based on improved particle swarm optimization algorithm is proposed in this paper. The absorption characteristics of metamaterial absorber are automatically calculated by using automatic peak seeking technology, so as to realize the optimization and inverse design of metamaterial metal resonance layer.

Methods In this paper, the metamaterial metal resonance layer is expressed as a matrix, and the key parameters of the absorptivity curve of metamaterial are read by using the automatic peak seeking algorithm. The rapid design of metamaterial absorber is realized based on CST-MATLAB joint simulation technology and particle swarm optimization algorithm with linearly decreasing weight. During the use of the software, the designer inputs the design parameters such as the period, thickness and dielectric constant of metamaterial structural unit, and uses the particle swarm optimization algorithm to automatically carry out optimization iterative calculation, so as to output the qualified "optimal" metamaterial absorber design results. In order to further improve the sensing performance of metamaterials, taking the metamaterial structure designed by the method proposed in this paper as an example, a new scheme of metamaterial absorber based on microcavity structure is proposed, and in-depth simulation research is carried out.

Results and Discussions Compared with other design methods, the metamaterial rapid inverse design method proposed in this paper saves a lot of time and reduces manual participation (Table 1). The design results show that using the metamaterial rapid design method based on particle swarm optimization algorithm can design results similar to manual design (Fig. 4), and achieve almost perfect absorption of incident electromagnetic wave at 0.3122 THz (Fig. 5). It has high sensing performance (Fig. 6). By replacing the original intermediate dielectric layer with the analyte to be measured, the coupling between the analyte to be measured and the resonant magnetic field can be effectively strengthened, and the sensing characteristics of the metamaterial absorber are improved (Table 2).

Conclusions In this paper, a rapid inverse design method of metamaterial based on particle swarm optimization and automatic peak seeking algorithm is proposed. Taking the metamaterial structure designed by the method proposed in this paper as an example, the design scheme of metamaterial absorber based on microcavity structure is proposed, and in-depth simulation research is carried out. The results show that the rapid design method can not only save the design time of metamaterial metal resonance layer and simplify the design process, but also design a metamaterial structure similar to manual design results. Compared with the traditional design method, the inverse design method of metamaterial absorber based on particle swarm optimization avoids the requirements of designers' knowledge and experience. The metamaterial rapid design method studied in this paper provides a technical basis for the subsequent application of artificial intelligence technology in metamaterial design, and has guiding significance for the mechanism analysis and sensor design of metamaterial absorber in the future. Compared with the traditional structure metamaterials, although the absorptivity, resonant frequency, full-width at half-maximum and several other parameters are somewhat worse, the microcavity metamaterials have better sensing characteristics, simplify the metamaterial design process, and better meet the sensor design requirements. The metamaterial structure of microcavity structure provides a new solution to the application design of metamaterial absorber.

Key words sensors; terahertz; metamaterial absorber; particle swarm optimization; metamaterial inverse design