

基于生成神经网络的自适应热控薄膜设计

陈嘉诚^{1,2}, 马蔚³, 朱虹雨^{1,2}, 周玉晟^{1,2}, 詹耀辉^{1,2*}, 李孝峰^{1,2**}¹苏州大学光电科学与工程学院, 江苏 苏州 215006;²江苏省先进光学制造技术重点实验室暨教育部现代光学技术重点实验室, 江苏 苏州 215006;³浙江大学信息与电子工程学院, 浙江 杭州 310027

摘要 自适应温度调控器件以其智能开关特性而逐渐成为研究焦点,但是一方面其特殊的光谱要求使得器件设计过程复杂且周期冗长,另一方面器件热控性能亟待提高以满足更加严苛的应用场景。针对以上问题,提出一种深度生成神经网络模型来执行上述复杂的优化任务,该网络模型的更新不依赖于数据集,而是将生成神经网络与传输矩阵方法(TMM)相结合,通过TMM返回的梯度信息指导产生符合预期的多层膜结构,并自动优化膜层厚度和材料种类。作为网络优化能力的验证和演示,本课题组使用该方法设计了一种基于二氧化钒的自适应热控器件,实现了高温太阳吸收比低于0.2、高温发射率高于0.9、发射率差值大于0.8的优异性能。与传统的优化算法相比,生成神经网络以高自由度和更快的速度寻找最优解,与普通神经网络相比,全局优化网络考虑整体的优化目标,通过全局搜索寻找全局最优解,设计结果也证明了该方法在复杂设计任务中的实用性。

关键词 薄膜; 多层膜; 神经网络; 自适应温度调控; 二氧化钒

中图分类号 TB64; TB61

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS231814

1 引言

制热和制冷是社会热能利用的两种重要方式,通过调节制热和制冷平衡满足人们的各种需求的技术被称为热调控技术^[1-2]。热调控与我们的日常生活息息相关,例如:建筑的供暖和制冷占建筑能耗的近48%,成为最大的能源消耗。各种能源消耗的增加和大量的二氧化碳排放导致了难以解决的全球变暖问题^[3],为缓解日益加剧的能源压力和环境问题,响应可持续发展战略,依靠可再生清洁能源实现自适应热调控的技术已经引起了科学和工程领域的极大关注,因为其在全球节能和缓解温室效应方面具有巨大潜力。

为了实现自适应热调控,除了要保证热发射器的中红外发射率可调,同时还要考虑太阳光加热的影响,本质上讲就是要实现对光波的准确控制^[4-7]。在众多可供选择的光子器件结构中,多层膜结构以其结构简单、加工方便的特点而被广泛应用于辐射冷却器件、滤波器、太阳能电池等^[8-11]。目前已有很多工作介绍了由不同材料设计的多层膜结构,例如Ramzan等^[12]设计并制备出一种透明导电氧化物多功能多层薄膜; Zambrano-Mera等^[13]设计出一种TiO₂/SiO₂/TiO₂/Si-

Zr-X多层膜结构沉积在太阳能电池玻璃基板上,以改善其光学和力学性能。这些多层膜结构每层的材料和厚度都需要进行精心的设计以达到预期的效果,基于经验的设计随着膜层数量和种类的增加变得难以扩展,设计速度也迅速降低。多层膜结构的动态热调控器件从本质上讲是一种多目标分类优化问题^[14],"多目标"指的是该系统涉及多个同时优化的目标函数,例如自适应热调控涉及太阳光和中红外两个波段;"分类"是指某个变量具有多个离散的取值,例如多层膜器件中每层可有多个材料类型进行选择,这显然是一种离散的变量。使用全局优化网络设计出一种高效的用于自适应热控的多层膜结构,其结果表明,借助于人工智能算法,可以在不依赖经验的情况下快速设计出符合特定光谱响应的结构^[15-18]。与普通神经网络和传统的优化算法(遗传算法、蒙特卡罗方法等)相比,全局优化网络考虑整体的优化目标,通过全局搜索寻找最优解,避免陷入局部最优解,并且以梯度为指导,优化结果更加精细可靠,优化速度也得到了很大提升。

2 基本原理

自适应温度调控的关键是要设计一个能够根据环

收稿日期: 2023-11-21; 修回日期: 2023-12-26; 录用日期: 2024-01-11; 网络首发日期: 2024-02-20

基金项目: 国家自然科学基金(62175174)、国家重点研发计划(2022YFB4200904)、江苏省自然科学基金(BK20221357)

通信作者: *yhzhan@suda.edu.cn; **xfli@suda.edu.cn

境温度开启和关闭辐射冷却的系统,当环境炎热时开启辐射冷却,当温度低于临界温度时关闭辐射冷却^[19-21]。为了实现这些功能,需要“开”和“关”状态的不同光谱特征。当系统处于“开启”状态时,系统需要满足日间辐射冷却的要求,其要在红外大气透明窗口(8~13 μm)波长范围内最大限度地提高发射率,以有效地向外层空间散热^[22],同时通过抑制太阳光波段

(0.3~2.5 μm)的吸收来最大限度地减弱太阳的加热效果[图 1(a)]。另一方面,当系统温度低于期望温度时,冷却功能被关闭,该状态下,系统表现出最低的热发射率以保持表面温度[图 1(b)]。以上讨论表明,自适应温度调控是由两个波长范围内的光吸收决定的:太阳能吸收和大气窗口吸收。器件在不同状态下的理想光谱如图 1(c)所示。

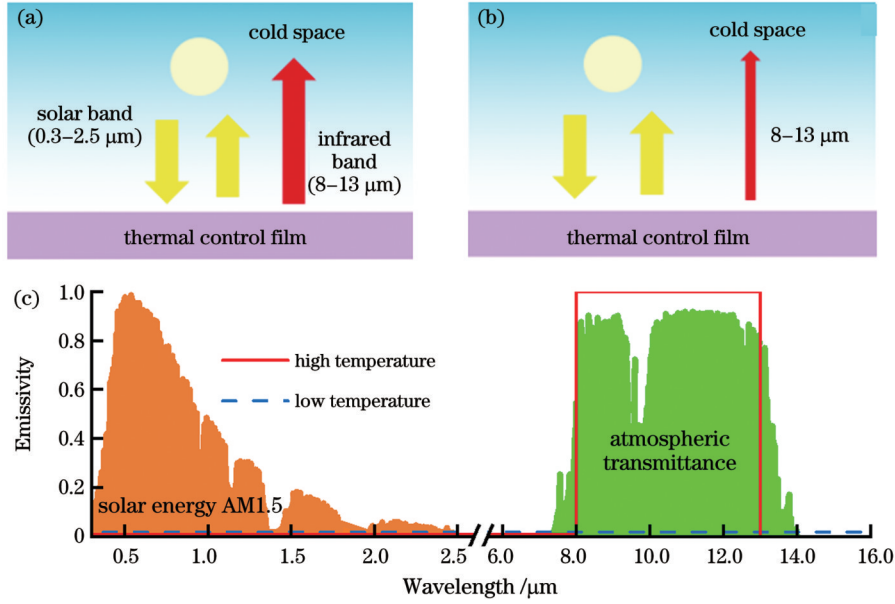


图 1 工作原理示意图。(a)高温时器件的工作原理;(b)低温时器件的工作原理;(c)高温和低温状态下器件的目标光谱

Fig. 1 Schematic diagrams of working principles. (a) Operating principle of device at high temperature; (b) operating principle of device at low temperature; (c) target spectrum of device at high and low temperatures

以二氧化钒(VO_2)为代表的相变材料被广泛应用于实现上述的自动开关功能,它在临界温度 T_c (本征 VO_2 的临界温度为 68°C) 下经历了可逆的金属-绝缘体转变,该转变的发生伴随着光学性能的急剧变化^[23-25],它将 VO_2 从红外无损“绝缘体态”($T < T_c$) 转换为红外有损“金属态”($T > T_c$),这为自适应热调控的实现提供了可能。由于该转变对太阳波段光学性能影响不大,因此图 1(c)中低温状态下的太阳波段光谱与高温状态下一致,不需要再单独进行优化。为保证后续设计优化的方便性,使用 $\Delta\epsilon$ 和 α 来描述所提出自适应热控器件的性能,其具体定义如下:

$$\alpha = \frac{\int_{0.3 \mu\text{m}}^{2.5 \mu\text{m}} I_{\text{AM1.5}}(\lambda) A(\lambda) d\lambda}{\int_{0.3 \mu\text{m}}^{2.5 \mu\text{m}} I_{\text{AM1.5}}(\lambda) d\lambda}, \quad (1)$$

$$\epsilon_{\text{H/L}} = \frac{\int_{8 \mu\text{m}}^{13 \mu\text{m}} I_{\text{BB}}(T, \lambda) A(T, \lambda) d\lambda}{\int_{8 \mu\text{m}}^{13 \mu\text{m}} I_{\text{BB}}(T, \lambda) d\lambda}, \quad (2)$$

$$\Delta\epsilon = \epsilon_{\text{H}} - \epsilon_{\text{L}}, \quad (3)$$

式中: $I_{\text{AM1.5}}$ 为 ASTM G173-03 的太阳光谱; $A(\lambda)$ 为器件的光谱吸收率; $I_{\text{BB}}(T, \lambda)$ 为温度为 T 的标准黑体发

射的光谱强度。设计优化的目标为:在高温下通过最小化 α 来减弱太阳光的加热效果并通过最大化高低温发射率差值 $\Delta\epsilon$ 来提高器件的可调谐性。

3 设计优化方法

3.1 待优化结构

为了执行复杂的全局优化,基于一种全局优化神经网络来设计光子器件的复杂结构。该网络是一个基于梯度的优化器,并且无需训练数据集,通过将生成网络与电磁模拟器相结合来执行设计优化,优化结果经生成网络采样并经由梯度指导产生^[26-27]。假设自适应热控器件由 N 层薄膜结构组成,每层结构需要优化材料种类和厚度两个变量,如图 2 所示。整个薄膜结构可由各膜层的材料种类向量 \mathbf{n} 和厚度向量 \mathbf{t} 来表示。材料种类向量可用其折射率 \mathbf{n} 来表示,其中 $\mathbf{n} = [n_1(\lambda) + ik_1(\lambda), n_2(\lambda) + ik_2(\lambda), \dots, n_N(\lambda) + ik_N(\lambda)]^T$, 为不失一般性,折射率为复数且表示为波长的函数,以表明材料是色散的。薄膜厚度向量 \mathbf{t} 可以表示为 $\mathbf{t} = [t_1, t_2, \dots, t_N]^T$, 材料库由 M 种材料组成并记为 $[m_1(\lambda), m_2(\lambda), \dots, m_M(\lambda)]$ 。其中, \mathbf{n} 中的元素为分类变量,是从材料数据库中选择的,而 \mathbf{t} 中的元素可以选

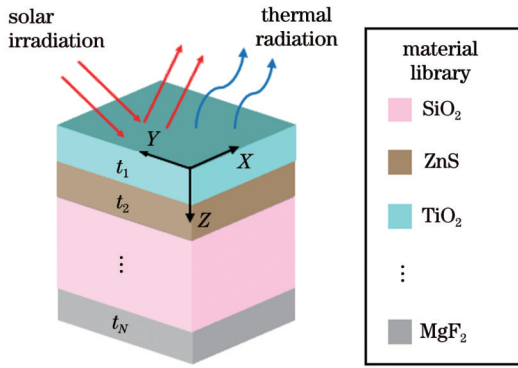


图 2 用于自适应热调控的多层膜系统示意图,每层材料从材料库中选择并执行相关的厚度优化

Fig. 2 Schematic of multilayer film system for self-adaptive thermal control, with each layer of material selected from the material library and related thickness optimization performed

择指定区间内的连续值,是一个连续变量。

3.2 传输矩阵求解器

理想的薄膜结构可能是由具有不同厚度的多种材料薄膜堆叠组成。具有多变量的复杂薄膜结构的设计和优化存在计算量很大的问题^[18-30],目前研究人员仍在积极研究中。为了使用神经网络等先进技术实现快速且简单的优化,将传输矩阵方法(TMM)作为传统电磁求解的替代方法是一个不错的选择。光学中的传

输矩阵算法是一种数学上方便的形式^[31],作为一种用于薄膜系统的全解析高速求解器,被用于确定线性材料无限延伸平面的波反射和透射特性。该方法中,入射平面波的传播方向和偏振状态可以是任意的,其特点是计算速度快且准确度高。为了使神经网络能利用TMM求解过程中的梯度信息,文中基于pytorch实现了TMM,这允许我们使用Autograd直接计算相关梯度^[32-33],因此可以将其集成到高级的神经网络中,通过反向传播更新网络模型参数,并在必要时进行GPU加速。

3.3 全局优化网络

全局优化网络的结构如图3所示,由一个残差生成网络G和电磁求解器TMM组成。图3中生成神经网络G对随机分布 z 进行采样并将其映射到膜层结构参数空间,传输矩阵用于评估生成膜层的性能并将其应用于损失函数,概率矩阵 P 将材料折射率限定为离散值。全局优化网络先从先验分布 p_z 对隐藏变量 $z \sim p_z$ 进行采样,然后通过生成网络G获得生成样本 n 和 t ,其中隐藏变量 z 服从的先验分布 p_z 可以假设为某种已知的分布,比如正态分布 $z \sim N(0, 1)$ 。生成网络得到的材料折射率是从材料库中选取的一系列离散值,而厚度则是规定区间内的连续变量。最后使用TMM求解器得到生成结构的光谱并通过计算损失函数来反向更新网络参数,直到网络收敛。

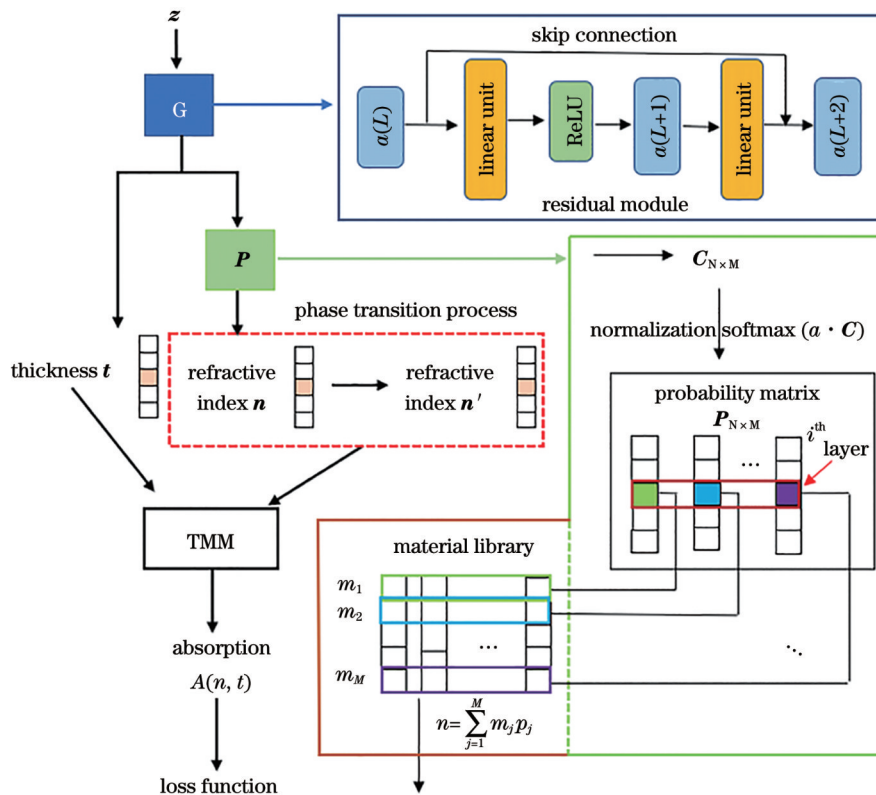


图 3 全局优化网络的结构示意图

Fig. 3 Schematic of global optimization network

由于多目标分类任务的复杂性,网络在优化过程中容易出现梯度消失问题,深度网络的训练过程通常存在困难。除了使用适当的优化器和激活函数,残差网络结构被认为是解决该问题的有效方法^[34],该结构相当于给输入端的网络层与输出端的网络层提供了一个直连操作。在反向传播计算时,该结构缩短了梯度传播路径的长度,解决了网络层数的增加带来的梯度消失问题,残差网络通过这种数据的跳跃连接方式让网络更新变得更加有效^[35-36],使得网络在实际中变得更容易优化。除此之外,本文还应用了自适应学习率衰减、提前停止等训练策略使得网络优化更加高效。

3.4 材料类别约束

网络各膜层的材料生成需要进行特定的限制,否则网络会通过任意生成折射率值来最小化损失函数,而我们希望利用网络选择材料库中的材料来实现对应的功能,即将材料优化空间限定为指定材料库中的有限材料属性,这就使得材料优化成为一种分类问题,即折射率不是连续函数,无法直接计算光谱对其的梯度。为解决上述问题,使用一种重参数化技巧将折射率放宽为连续值,并随网络更新将其限定到连续区间上的指定位置。具体做法是:网络首先将随机采样的向量 \mathbf{z} 生成一个 $N \times M$ 的矩阵 \mathbf{C} , 矩阵 \mathbf{C} 的值可以为任意实数,然后使用分类问题中常用的激活函数 softmax 函数作用于矩阵 \mathbf{C} 的所有行,生成取值范围为 0~1 的概率矩阵 \mathbf{P} , 且 \mathbf{P} 矩阵每行值的和为 1。 \mathbf{P} 矩阵的意义在于:以概率的形式给出了各层膜取材料库中每一种材料的可能性,材料库中的材料表示为 $M \times Q$ 的复数矩阵, Q 为材料折射率在波长范围内离散点的个数。比如: \mathbf{P} 矩阵的第 i 行是一个 $1 \times M$ 的向量,这 M 个值分别代表了第 i 层取 $[m_1(\lambda), m_2(\lambda), \dots, m_M(\lambda)]$ 这 M 种材料的概率,此时,该层折射率可以表示为 $n_i(\lambda) = \sum_{j=1}^M p_{ij} m_j(\lambda)$ 。这样在后续网络传播计算中,折射率 \mathbf{n} 就被作为连续值计算,同时 TMM 中所有计算也都是可导的,这样使得梯度信息可以反向传播,进而使得网络参数得到更新。

另一个问题在于,虽然折射率被放宽为连续值处理,梯度变得容易计算,但这并不意味着折射率取值可以是连续区间上的任意值,因此限制折射率只能选取材料库中提供的材料折射率。上述问题的解决办法是使用一个超参数 β 来调控 softmax 函数的锐度,通过训练迭代缓慢增加 \mathbf{P} 矩阵每行的最大值,以此来限制材料库中各种材料对指定层的贡献率,矩阵 \mathbf{C} 在 softmax 函数作用下的具体形式为

$$P_{ij} = \frac{\exp(\beta C_{ij})}{\sum_{j=1}^M \beta C_{ij}} \quad (4)$$

起初 β 值为 1, 第 i 层膜的折射率通过概率矩阵被

设置为所有材料库中材料的加权平均。随着网络迭代次数 k 的增加, β 按照 $\beta = 1 + (k\beta)^2$ 的变化方式逐渐增大, 以使第 i 层材料收敛于某种特定材料, 即概率矩阵中第 i 行的最大值接近 1, 材料折射率的贡献几乎完全来自材料库中的某种材料。

3.5 损失函数设计

为保证网络朝着正确的方向优化, 需要设置一个合理的损失函数来指导网络更新。如果简单地将损失函数设置为 $L_{\text{oss}} = (1 - \Delta\epsilon) + \theta\alpha$, 试着保证减少 α 并增大 $\Delta\epsilon$, 其中 θ 用来控制太阳波段对整个损失的贡献权重, 则会出现如图 4(a) 所示的问题。网络不会在膜层任何位置使用 VO_2 , 器件高低温光谱一致, 则器件不具备动态特性, 因此 $\Delta\epsilon$ 等于零。网络会在太阳波段使用透明材料, 并且厚度设置为最小以尽可能地反射太阳光, 这样 α 也降低了。但是, 可以看出, 网络没有朝着我们期望的方向优化。为了避免上述问题, 可以将损失函数设置为 $L_{\text{oss}} = 1/\Delta\epsilon + \theta\alpha$, 中红外反比例函数使得在 $\Delta\epsilon$ 趋近 0 时, 损失函数会趋于无穷, 这虽然可以有效避免上述网络不使用 VO_2 的问题, 但又带来如图 4(b) 所示的问题, 网络会将 $\Delta\epsilon$ 优化为负数以减小损失函数的取值, 即使太阳波段的损失较大, 由于红外波段损失为负数, 也可以很大程度上减小总体损失函数的值, 因此也不可行。为了同时克服以上两个问题, 将

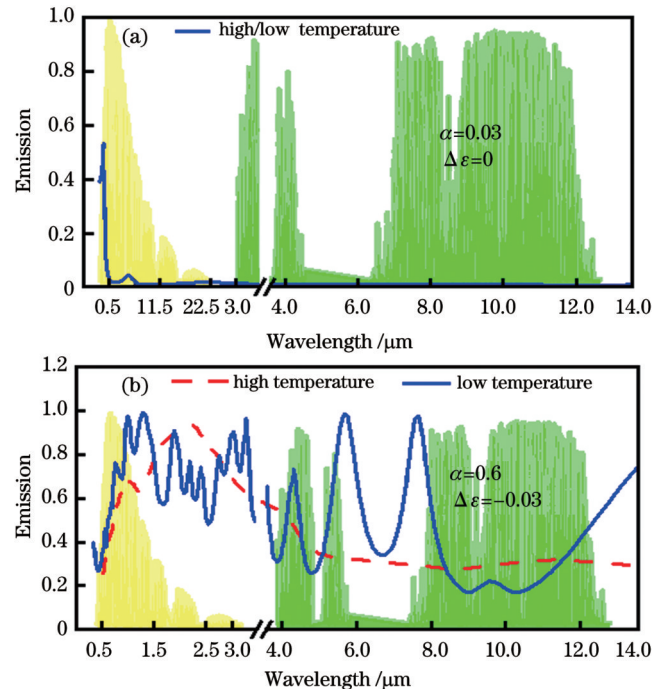


图 4 网络使用不同损失函数时出现的不同问题。(a) 使用损失函数 $L_{\text{oss}} = (1 - \Delta\epsilon) + \theta\alpha$ 时, 网络优化出现的问题; (b) 使用损失函数 $L_{\text{oss}} = 1/\Delta\epsilon + \theta\alpha$ 时, 网络优化出现的问题
Fig. 4 Problems that occur when networks use different loss functions. (a) Problem of network when $L_{\text{oss}} = (1 - \Delta\epsilon) + \theta\alpha$ is used for optimization; (b) problem of network when $L_{\text{oss}} = 1/\Delta\epsilon + \theta\alpha$ is used for optimization

损失函数设置为 $L_{\text{oss}} = 2^{\beta \alpha} + F(\Delta\epsilon)$ (θ 用于调整各部分贡献的超参数), 损失函数的指数形式用来控制降低的太阳吸收比。后半部分用于中红外波段, 它被设计为一个分段函数:

$$F(\Delta\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\epsilon}, & \Delta\epsilon > 0 \\ (-\gamma\Delta\epsilon)^2, & \Delta\epsilon < 0 \end{cases}, \quad (5)$$

式中: $\Delta\epsilon = \epsilon_{\text{H}} - \epsilon_{\text{L}} + 0.0001$; γ 为用于调整各部分贡献的超参数。分段函数的作用体现在两个方面: 1) 反比例函数用于强制在随机膜层结构中加入至少一层的 VO_2 层来保证器件具有可调谐性; 2) 当 $\Delta\epsilon < 0$ 时, 损失函数值会快速变大, 以防止出现 $\Delta\epsilon < 0$ 的器件结构。

3.6 参数 β 的影响

参数 β 用来控制网络生成的材料折射率收敛于材料库中指定类型材料的一个关键参数。图 5(a) 以优化 10 层膜结构为例, 一个合理的 β 值需要在保证网络性能的同时使得概率矩阵 \mathbf{P} 每行只有一个值为 1, 其余全为 0, 其意义是使得每层材料的折射率只来自一种材料的贡献, 即保证了材料收敛于材料库。图 5(b)

则是一种材料不收敛的典型情况, 某些行存在多个非零值, 那么该层的折射率来自这些位置索引所代表材料折射率的加权和。为了探索 β 对网络性能的影响, 研究了不同 β 值时材料收敛的平均速度以及网络的平均损失状况, 其结果如图 5(c) 所示, 结果表明, 不同 β 的取值影响每次优化中材料的收敛速度, 随着 β 值的增大, 材料收敛的速度越来越快, 但网络损失呈现出先减小后增大的趋势。这是由于一旦 β 值过大, 网络每次迭代变化过快, 不利于精细的调整和更新, 因此实际优化中取 $\beta = 0.95$ 比较合理。图 5(d) 显示了当 β 取 0.95 时, 网络优化迭代 200 次的工作流程。在训练过程中, 每一次网络优化的结果都将被输出, 可以发现经过 27 次迭代后网络输出的结构信息基本不再变化, 只有每层的厚度在变, 其折射率已经可以收敛于材料库中指定的材料, 即在最开始, 网络虽然都会优化材料和厚度, 但主要用来保证材料收敛。之后, 网络主要通过调节各层厚度来减小损失函数, 在迭代 126 次后, 网络的损失连续几轮不再下降。此时, 设置的提前停止优化策略发挥作用, 网络提前结束本轮优化, 这一策略大大提高了实际中网络的工作效率。

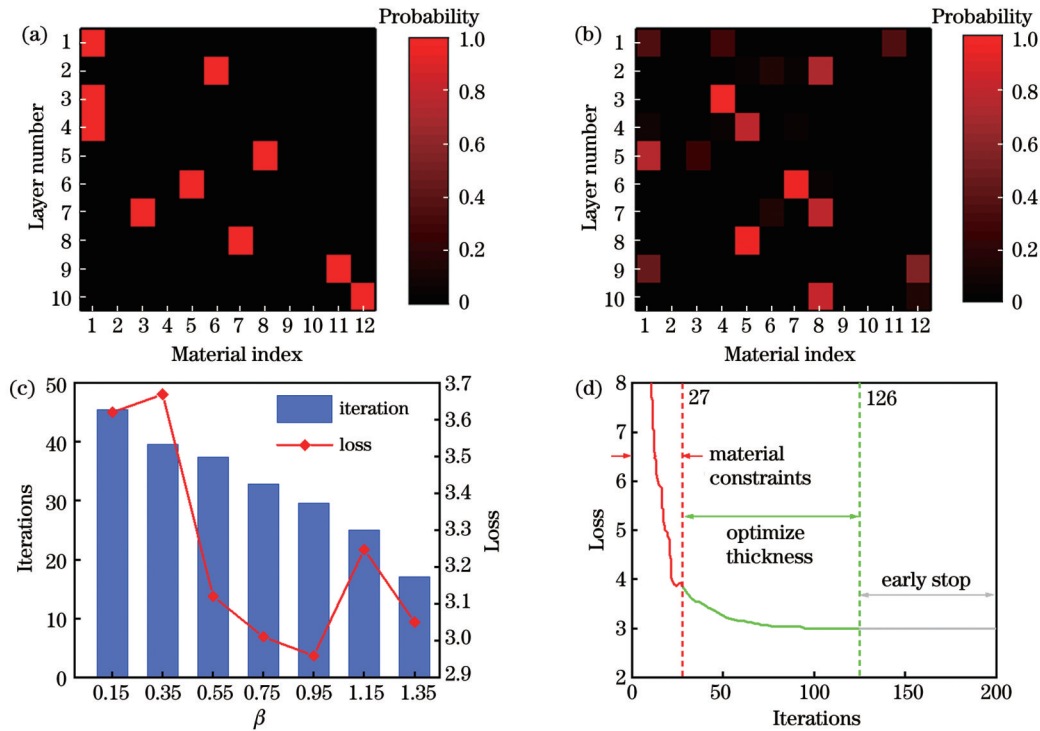


图 5 参数 β 对网络性能的影响。(a) 概率矩阵 \mathbf{P} 的理想取值情况; (b) 材料不收敛时概率矩阵 \mathbf{P} 的取值情况; (c) 参数 β 对收敛迭代次数和网络损失的影响; (d) $\beta = 0.95$ 时网络的工作流程

Fig. 5 Influence of parameter β on network performance. (a) Ideal value of probability matrix \mathbf{P} ; (b) value of probability matrix \mathbf{P} when material does not converge; (c) influence of parameter β on number of convergent iterations and network loss; (d) working process of network when $\beta = 0.95$

4 优化结果和讨论

实现自适应热调控的条件之一是实现对光波的准

确控制。为此, 根据材料的波长、吸收系数、折射率和透过率选择了 Si、 SiO_2 、 VO_2 (高温态)、 Al_2O_3 、 HfO_2 、 MgF_2 、 ZnO 、 ZnS 、 Si_3N_4 、 SiC 、 TiO_2 、 ZnSe 总共 12 种材

料加入到材料库中。这 12 种材料不仅能够实现对可见光波段和中红外波段的准确控制,还涵盖各种我们需要的特性,每种特性的材料都有多种,这使得建立的网络对材料的选择余地足够,不至于因材料数目太多而导致优化时间过长。使用材料库中的 12 种材料在 500 nm 的 Ag 衬底上设计优化用于自适应热控的多层膜器件。每种材料的折射率在 $0.3\sim 2.5\ \mu\text{m}$ 范围内以 2 nm 为间隔离散为 1101 个点,在 $8\sim 13\ \mu\text{m}$ 以 $0.1\ \mu\text{m}$ 为间隔分成 51 个点。网络隐藏变量是从 20 维随机高斯分布中采样得到,并通过生成网络产生每层厚度 t 和折射率 n 。网络输出 t 的分支通过在最后一层使用自定义激活函数 $|t| = [\tanh(t) + 1](t_{\max} - t_{\min})/2 + t_{\min}$ 实现对膜层厚度范围的约束, $[t_{\min}, t_{\max}]$ 为规定的每层膜的厚度区间。

为了探索网络对复杂问题的适用性,使用以上介绍的神经网络优化一个用于自适应热调控的器件。其中, $t_{\min} = 5\ \text{nm}$ 和 $t_{\max} = 200\ \text{nm}$ 分别为每层膜厚度的上下限。网络从随机分布中采样 100 次,相当于优化了 100 个器件,每个器件总共优化 200 轮,从这 100 个器件中选择性能最好的器件作为最终的优化结果。优化过程中,网络在输出 n 时会记录 VO_2 (高温态) 层的位置,并通过将其替换成绝缘态的 VO_2 来新建一个低温

响应下的器件模型,利用传输矩阵可计算不同状态下器件的发射率以完成损失函数的计算。使用上述配置首先优化一个 10 层的自适应热控器件,由于优化过程中可能会出现相邻两层为同一种材料的情况,因此实际器件的层数可能小于设定值。100 个器件优化的最优结果如图 6(a) 所示,器件的太阳吸收比 $\alpha = 0.19$, 高低温发射率差值 $\Delta\epsilon = 0.79$ 。为进一步提高器件的性能,将膜层数设置为 60,其他参数值不变,结果如图 6(c) 所示,优化得到器件 $\alpha = 0.17$, $\Delta\epsilon = 0.82$ 。由此可以看出,增加膜层数,在一定程度上会提高器件的性能,但同时其优化难度和时间也会增加。此外,图 6(b)、(d) 分别显示了在 $\lambda = 9\ \mu\text{m}$ 时,10 层膜结构在高温态和低温态下的标准化电场 $|E/E_0|$ (E 为薄膜内部的电场强度, E_0 为入射电场强度),对于处在高温状态下的薄膜,电场强度沿 Z 轴(即入射方向)单调减小,薄膜此时自上而下的吸收,导致几乎观察不到入射波和反射波之间的干涉。而对于处于低温状态的膜层来说,整个膜系变为半透明,在图 6 中可以观察到入射波和反射波之间的强干涉。优化得到的 10 层膜结构见表 1,该 10 层结构材料均是常规容易制备的氧化物、氟化物、氮化物和硫系红外材料。以上所有原始代码见 <https://github.com/baoren-ning/multilayers>。

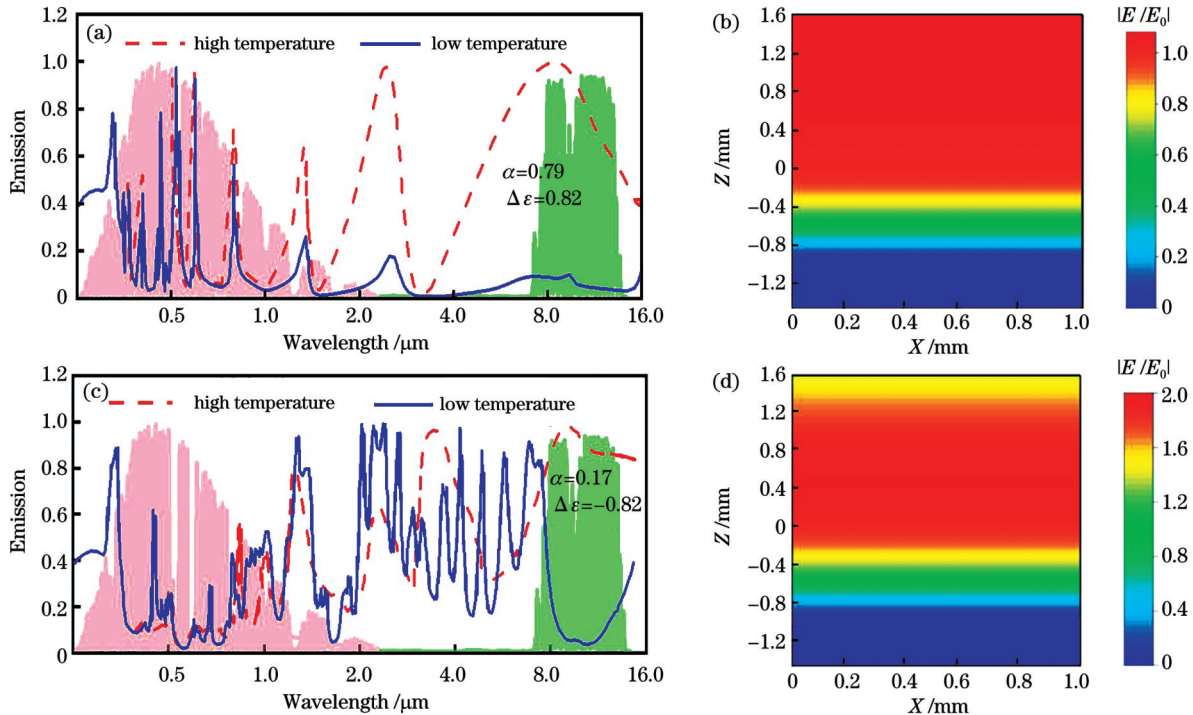


图 6 优化得到的光谱发射率及场分布。(a)膜层数为 10 时,优化得到的光谱发射率;(b)对应于图 6(a)中高温状态下的场分布;(c)膜层数为 60 时,优化得到的光谱发射率;(d)对应于图 6(a)中低温状态下的场分布

Fig. 6 Results of optimized spectral emissivity and field distributions. (a) Spectral emissivity when number of layers is 10; (b) field distribution in high temperature state corresponding to Fig. 6(a); (c) spectral emissivity when number of layers is 60; (d) field distribution in low temperature state corresponding to Fig. 6(a)

本文网络之所以能寻找全局最优解,一方面得益于神经网络使用的随机梯度下降技术,随机性一定程

度上保证了网络具有避开或跳出局部最优值的可能性^[37]。除此之外,网络还使用了自适应学习率衰减策

表 1 膜层数设置为 10 时优化得到的结构

Table 1 Optimized structure when number of layers is set to be 10

Layer	Material	Thickness / nm
1	Si	29
2	Al ₂ O ₃	53
3	VO ₂	15
4	Si	74
5	MgF ₂	150
6	ZnS	103
7	HfO ₂	150
8	TiO ₂	147
9	ZnO	15
10	SiO ₂	141

略,这种方法在有效保证网络收敛速度的同时避免了较高学习率可能陷入局部最小值的问题^[38]。另一方面,从网络结构上说,使用残差网络结构可有效避免局部最小值处可能存在的梯度消失问题。除以上原因外,本文网络之所以能寻找全局最优解,还在于生成网

络的优化方式,每轮优化是从给定的概率分布中进行采样,这就相当于每次网络优化的起点是不同的。而在一般的神经网络中,由于其存在庞大的数据集,无法使用一次优化来完成模型参数的准确更新,所以下次优化更新往往是在上一次优化的基础上进行的。在非凸优化问题中,初始值不同往往会对优化结果产生较大影响^[39-40],初始值的随机性在一定程度上保证了网络会在某次优化过程中产生较好的结果。为了表明优化方法的有效性,将本文的优化方法与传统神经网络优化方法进行了对比,记录膜层数为 10 时,优化的 100 个器件损失的直方图分布情况,如图 7(a)所示,优化后的多层膜损失范围很大,将其分成 10 个区间,每个区间的起始值作为 X 轴,从图 7 可以看出优化后大部分器件的损失值落在图上中间区域,少数落在图中最左侧区间,这部分器件有效避开了局部最优解,得到了继续优化,这也体现出随机优化起点的有效性。图 7(b)以更加直观的方式体现了全局优化网络相比于传统网络的优势,对于传统优化方式来说,由于每次优化是在上一次的基础上进行的,因此损失函数值是连续降低的,并且在约优化 20 次时停止下降,这说明传统方法

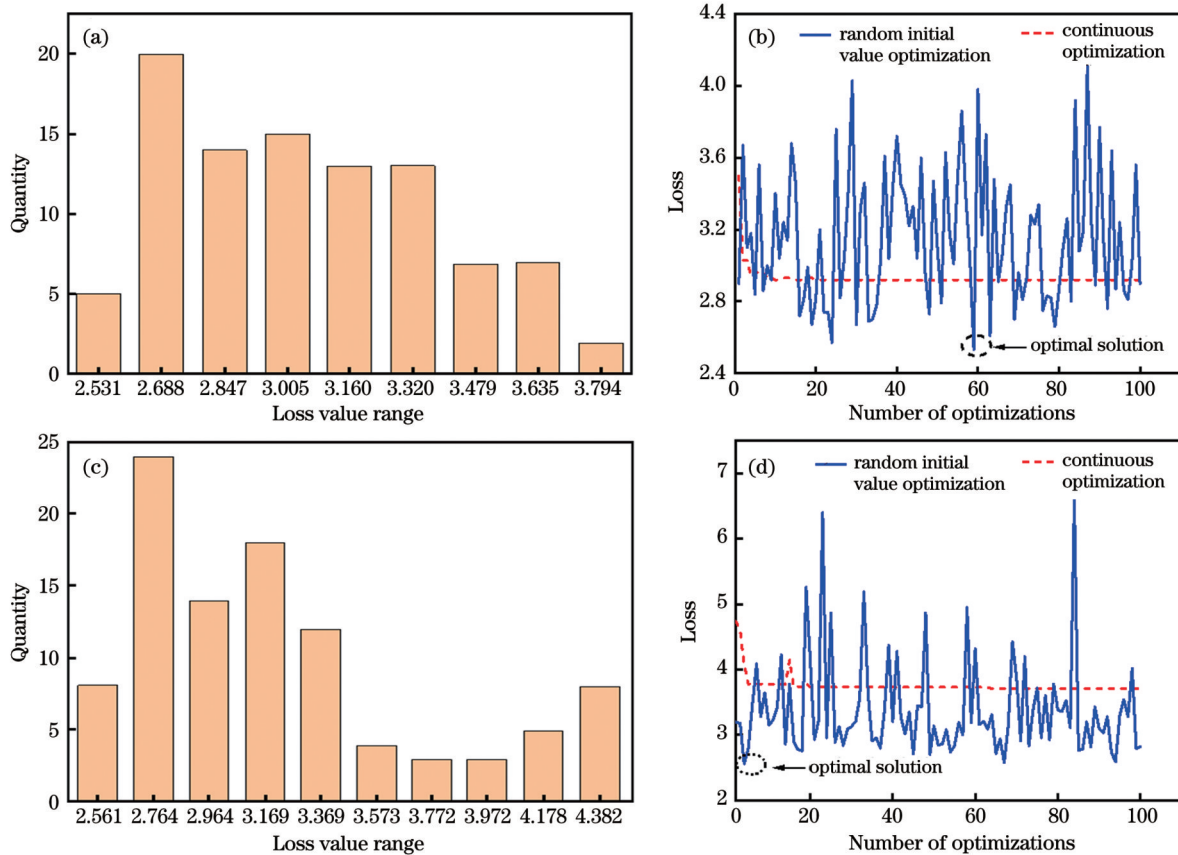


图 7 不同网络优化方式对比。(a)10层膜时网络生成的 100 个器件的损失分布直方图;(b)膜层数为 10 时不同优化方式损失的变化情况;(c)60层膜网络生成的 100 个器件的损失分布直方图;(d)膜层数为 60 时不同优化方式损失的变化情况

Fig. 7 Comparison of different network optimization modes. (a) Histogram of loss of 100 devices generated from neural network when number of layers is 10; (b) variation of loss when number of layers is 10 for different optimization methods; (c) histogram of loss of 100 devices generated from neural network when number of layers is 60; (d) variation of loss when number of layers is 60 for different optimization methods

很容易陷入局部最优解进而导致梯度消失问题,网络在这种情况下无法继续进行优化。反观全局优化网络,由于每次优化的起点都不同,因此网络的结构参数也不同,损失值出现跳变情况,并且优化过程中会有跳出局部最优解的结构产生,在优化第 60 次时出现全局最优解,即损失函数最小的时候。对于膜层为 60 层的更为复杂情况来说,全局优化网络仍有少量解可以跳出局部最优解并到达图 7(c)的最左侧区间,图 7(d)则说明随着自由度的增加,随机优化起点的优势越来越明显,其更多的结果跳出了局部最小值,而连续优化的方式则更容易陷入局部最优,在 10 轮优化后损失不再有效地下降。以上分析表明,全局优化网络相比于传统神经网络可以更有效地搜寻全局最优解,避免网络产生局部最优解。

5 结 论

本文设计了一个全局优化网络框架,该网络可用于复杂多层膜结构的光子学器件设计。网络通过使用概率矩阵来解决材料的分类问题,使用残差模块可使网络的优化变得更加容易。基于该网络设计了一种基于相变材料 VO₂ 的自适应热控多层膜结构,该结构可以根据环境温度自动开启和关闭辐射冷却,而无需任何额外的能量输入。该方法不仅能用来设计热控系统,还可以满足其他不同功能的光子学设计,并可根据设计经验进行灵活调节。除此之外,可以使用训练好的神经网络代替 TMM,进而将该方法推广到 3D 光子学结构,这为设计更复杂的光子学器件提供了可能,同时也有望成为其他领域材料设计的一种有效方法。

参 考 文 献

- [1] Mandal J, Jia M X, Overvig A, et al. Porous polymers with switchable optical transmittance for optical and thermal regulation [J]. *Joule*, 2019, 3(12): 3088-3099.
- [2] So S, Yang Y, Son S, et al. Highly suppressed solar absorption in a daytime radiative cooler designed by genetic algorithm[J]. *Nanophotonics*, 2022, 11(9): 2107-2115.
- [3] Raman A P, Anoma M A, Zhu L X, et al. Passive radiative cooling below ambient air temperature under direct sunlight[J]. *Nature*, 2014, 515(7528): 540-544.
- [4] Ito K, Watari T, Nishikawa K, et al. Inverting the thermal radiative contrast of vanadium dioxide by metasurfaces based on localized gap-plasmons[J]. *APL Photonics*, 2018, 3(8): 086101.
- [5] Kim H, Cheung K, Auyeung R C Y, et al. VO₂-based switchable radiator for spacecraft thermal control[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 11329.
- [6] Kim M, Lee D, Yang Y, et al. Switchable diurnal radiative cooling by doped VO₂[J]. *Opto-Electronic Advances*, 2021, 4(5): 200006.
- [7] Sun K, Xiao W, Wheeler C, et al. VO₂ metasurface smart thermal emitter with high visual transparency for passive radiative cooling regulation in space and terrestrial applications [J]. *Nanophotonics*, 2022, 11(17): 4101-4114.
- [8] Santamouris M, Feng J. Recent progress in daytime radiative cooling: is it the air conditioner of the future? [J]. *Buildings*, 2018, 8(12): 168.
- [9] Gentle A R, Smith G B. Radiative heat pumping from the Earth

- using surface phonon resonant nanoparticles[J]. *Nano Letters*, 2010, 10(2): 373-379.
- [10] 白金林,姜玉刚,王利栓,等. 超低面形宽带高反射薄膜设计及制备技术研究[J]. *红外与激光工程*, 2021, 50(2): 20200413. Bai J L, Jiang Y G, Wang L S, et al. Study on the design and preparation technology of ultra-low profile wideband high reflection thin films[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2021, 50(2): 20200413.
 - [11] 肖友鹏,王杯平. 硫化锡同质结薄膜太阳能电池设计与缺陷分析 [J]. *光学学报*, 2022, 42(23): 2331002. Xiao Y P, Wang H P. Design and defect analysis of Sb₂S₃ homojunction thin film solar cells[J]. *Acta Optica Sinica*, 2022, 42(23): 2331002.
 - [12] Ramzan M, Imran M, Ullah S, et al. Fabrication and characterization of multifunctional thin multi-layer films for transparent conducting oxides[J]. *Progress in Organic Coatings*, 2020, 149: 105976.
 - [13] Zambrano-Mera D F, Espinoza-González R, Villarroel R, et al. Optical and mechanical properties of Zr-oxide doped TiO₂/SiO₂ anti-reflective coatings for PV glass covers[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2022, 243: 111784.
 - [14] 邓德伟,江浩,李振华,等. 基于 BP 神经网络的激光熔覆参数多目标优化[J]. *激光与光电子学进展*, 2023, 60(17): 1714001. Deng D W, Jiang H, Li Z H, et al. Multi-objective optimization of laser cladding parameters based on BP neural network[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2023, 60(17): 1714001.
 - [15] Hemmatyar O, Abdollahramezani S, Kiarashinejad Y, et al. Full color generation with Fano-type resonant HfO₂ nanopillars designed by a deep-learning approach[J]. *Nanoscale*, 2019, 11(44): 21266-21274.
 - [16] Liu Z C, Zhu D Y, Rodrigues S P, et al. Generative model for the inverse design of metasurfaces[J]. *Nano Letters*, 2018, 18(10): 6570-6576.
 - [17] Shastri B J, Tait A N, de Lima T F, et al. Photonics for artificial intelligence and neuromorphic computing[J]. *Nature Photonics*, 2021, 15(2): 102-114.
 - [18] 陈蓓,张肇阳,戴庭舸,等. 光学神经网络及其应用[J]. *激光与光电子学进展*, 2023, 60(6): 0600001. Chen B, Zhang Z Y, Dai T G, et al. Photonic neural networks and its applications[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2023, 60(6): 0600001.
 - [19] Sun K, Riedel C A, Urbani A, et al. VO₂ thermochromic metamaterial-based smart optical solar reflector[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(6): 2280-2286.
 - [20] Wang W L, Zhao Z P, Zou Q X, et al. Self-adaptive radiative cooling and solar heating based on a compound metasurface[J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2020, 8(9): 3192-3199.
 - [21] Ono M, Chen K F, Li W, et al. Self-adaptive radiative cooling based on phase change materials[J]. *Optics Express*, 2018, 26(18): A777-A787.
 - [22] Shrewsbury B K, Morsy A M, Povinelli M L. Multilayer planar structure for optimized passive thermal homeostasis[J]. *Optical Materials Express*, 2022, 12(4): 1442-1449.
 - [23] Wan C H, Woolf D, Hessel C M, et al. Switchable induced-transmission filters enabled by vanadium dioxide[J]. *Nano Letters*, 2022, 22(1): 6-13.
 - [24] Wan C H, Zhang Z, Salman J, et al. Ultrathin broadband reflective optical limiter[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2021, 15(6): 2100001.
 - [25] Long L S, Taylor S, Wang L P. Enhanced infrared emission by thermally switching the excitation of magnetic polariton with scalable microstructured VO₂ metasurfaces[J]. *ACS Photonics*, 2020, 7(8): 2219-2227.
 - [26] Jiang J Q, Fan J A. Global optimization of dielectric metasurfaces using a physics-driven neural network[J]. *Nano Letters*, 2019, 19(8): 5366-5372.
 - [27] Jiang J Q, Fan J A. Multiobjective and categorical global

- optimization of photonic structures based on ResNet generative neural networks[J]. *Nanophotonics*, 2020, 10(1): 361-369.
- [28] Dinia A, Schmerber G, Ulhaq C, et al. Magnetic and transport properties of discontinuous metal-oxides multilayers[J]. *Materials Science and Engineering: B*, 2003, 97(3): 231-234.
- [29] Li Y, Polaczyk C, Kapoor J, et al. Reduced magnetization in Gd/W multilayers[J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1997, 165(1/2/3): 165-167.
- [30] 孙伟, 洪瑞金, 陶春先, 等. 大面积图案化电场增强薄膜的设计及制备研究[J]. *中国激光*, 2023, 50(23): 2303101.
Sun W, Hong R J, Tao C X, et al. Design and preparation of large-area patterned electric field enhanced films[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2023, 50(23): 2303101.
- [31] Jo J, Jung E, Park J C, et al. Comparative study of optical analysis methods for thin films[J]. *Current Applied Physics*, 2020, 20(2): 237-243.
- [32] Dai H L, Peng X, Shi X H, et al. Reveal training performance mystery between TensorFlow and PyTorch in the single GPU environment[J]. *Science China Information Sciences*, 2021, 65(1): 112103.
- [33] Lin R H, Zhai Y F, Xiong C X, et al. Inverse design of plasmonic metasurfaces by convolutional neural network[J]. *Optics Letters*, 2020, 45(6): 1362-1365.
- [34] Lu Z Y, Bai Y Z, Chen Y, et al. The classification of gliomas based on a pyramid dilated convolution resnet model[J]. *Pattern Recognition Letters*, 2020, 133: 173-179.
- [35] Zou X H, Wu C Y, Liu H E, et al. Improved ResNet-50 model for identifying defects on wood surfaces[J]. *Signal Image and Video Processing*, 2023, 17: 3119-3126.
- [36] Song P, Ma X, Li X, et al. Deep residual texture network for terrain recognition[J]. *IEEE Access*, 2019, 7: 90152-90161.
- [37] Li T Y, Chen A, Fan L J, et al. Photonic-dispersion neural networks for inverse scattering problems[J]. *Light, Science & Applications*, 2021, 10(1): 154.
- [38] Nadell C C, Huang B H, Malof J M, et al. Deep learning for accelerated all-dielectric metasurface design[J]. *Optics Express*, 2019, 27(20): 27523-27535.
- [39] Leardi R. Genetic algorithms in chemistry[J]. *Journal of Chromatography A*, 2007, 1158(1/2): 226-233.
- [40] Garcia-Martínez C, Lozano M, Rodríguez-Díaz F J. A simulated annealing method based on a specialised evolutionary algorithm[J]. *Applied Soft Computing*, 2012, 12(2): 573-588.

Design of Self-Adaptive Thermal Control Films Based on Generative Neural Networks

Chen Jiacheng^{1,2}, Ma Wei³, Zhu Hongyu^{1,2}, Zhou Yusheng^{1,2}, Zhan Yaohui^{1,2*}, Li Xiaofeng^{1,2**}

¹*School of Optoelectronic Science and Engineering, Soochow University, Suzhou 215006, Jiangsu, China;*

²*Key Lab of Advanced Optical Manufacturing Technologies of Jiangsu Province & Key Lab of Modern Optical Technologies of Education Ministry of China, Suzhou 215006, Jiangsu, China;*

³*College of Information Science & Electronic Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China*

Abstract

Objective Self-adaptive thermal control devices have become the research focus due to their adaptive characteristics. However, on one hand, the special spectral requirements lead to a complex and time-consuming design process, and on the other hand, the device performance needs to be optimized to meet special application scenarios. To this end, we propose a deep-generation network model to perform complex optimization tasks. Unlike traditional approaches relying on dataset updates, our model integrates a generated neural network with the transfer matrix method (TMM), which generates the expected multi-layer structure and automatically optimizes the material type and the thickness of each layer using the gradient information provided by TMM.

Methods Firstly, a neural network for global optimization is devised to intricately design the structure of photonic devices. The optimization network consists of a residual generation network and an electromagnetic solver TMM. The residual generation network obtains the refractive index and thickness of the material. The TMM solver is employed to derive the spectrum of the generated structure and compute the loss function for reverse parameter updates until the network converges. Secondly, the material categories are constrained, and the material optimization space is limited to a finite number of material properties in the specified material library. We adopt a reparameterization technique to relax the refractive index to a continuous value and restrict it to a specified position on the continuous interval with network updates. A hyperparameter is adopted to regulate the sharpness of the softmax function, thereby limiting the contribution of various materials in the material library to the specified layer. The influence of different loss functions and hyperparameters on network optimization is studied, the loss function is customized, and the best hyperparameters are selected to ensure that the network meets the requirements. Finally, a deep neural network model is utilized to optimize an adaptive thermal control device based on phase change material vanadium dioxide. The structures of 10-layer and 60-layer films are optimized, and their spectral and field distributions of the structure at high and low temperatures are studied to assess the

performance.

Results and Discussions The proposed global optimization network model eliminates the need for a dataset and can simultaneously optimize the design of material types and thicknesses. We employ 12 materials from the material library to automatically design and optimize multi-layer film devices for adaptive thermal control on a 500 nm Ag substrate. Firstly, a 10-layer adaptive thermal control device is optimized, and the film structure is shown in Table 1. The solar absorption ratio of this device is 0.19, and the difference in high- and low-temperature emissivity is 0.79. For thin films in a high-temperature state, the electric field intensity decreases monotonically along the incident direction. Due to the top-down absorption of the thin film at this time, almost no interference between the incident and reflected waves can be observed. For thin films in a low-temperature state, the entire film system becomes semi-transparent, and strong interference between the incident and reflected waves can be observed. Increasing the number of film layers to 60 can improve device performance, which leads to a solar absorption ratio of 0.17 and 0.82 respectively (Fig. 6). When the number of membrane layers is 10, the traditional neural network's loss value continuously decreases and stops decreasing after 20 optimizations, falling into the local optimal solution and causing the gradient to disappear. Meanwhile, the global optimization network exhibits a spike in the loss value attributable to varying initial points in each optimization run, which makes the structures deviate from local optimal solutions. As the number of membrane layers increases to 60, the global optimization network yields more instances where the results diverge from local minimum values. This characteristic enables the network to effectively explore global optimal solutions and mitigates the risk of the network converging to local optimal solutions (Fig. 7).

Conclusions We develop a global optimization network framework for designing optoelectronic devices with complex multi-layer film structures. The network solves the material classification problem by adopting probability matrices, and residual modules in the network are also leveraged to make optimization easier. As a validation and demonstration of network optimization capabilities, we adopt this method to design an adaptive thermal control device based on vanadium dioxide. This structure can automatically turn on and off radiative cooling according to environmental temperature without any additional energy input. Meanwhile, it yields excellent performance with a high-temperature solar absorption ratio below 0.2, a high-temperature emissivity greater than 0.9, and an emissivity difference greater than 0.8. Compared with traditional optimization algorithms, neural networks search for the optimal solution with high degrees of freedom and faster speed in searching for optimal solutions, underscoring the practicality of this method in complex design tasks. The results suggest the versatility of this method in designing various optoelectronic systems and highlight the potential extension of this approach to 3D photonic structures using trained neural networks, which offers possibilities for more intricate photonic device design and effective material design in diverse fields.

Key words thin film; multi-layer film; neural network; self-adaptive temperature control; vanadium dioxide