

引用格式: MA Dina, CHENG Hua, TIAN Jianguo, et al. Inverse Design Methods and Applications of Photonics Devices (Invited)[J]. Acta Photonica Sinica, 2022, 51(1):0151110

玛地娜,程化,田建国,等. 人工光子学器件的逆向设计方法与应用(特邀)[J]. 光子学报, 2022, 51(1):0151110

# 人工光子学器件的逆向设计方法与应用(特邀)

玛地娜<sup>1</sup>,程化<sup>1</sup>,田建国<sup>1</sup>,陈树琪<sup>1,2,3</sup>

(1 南开大学 物理科学学院,泰达应用物理研究院,弱光非线性光子学教育部重点实验室,天津 300071)

(2 山西大学 极端光学协同创新中心,太原 030006)

(3 山东师范大学 光场调控及应用协同创新中心,济南 250358)

**摘要:**人工设计的光子学器件在超分辨、生物传感、光通信等领域都取得了卓越的成就。传统光子学器件的设计往往是通过分析物理模型和建立数值模拟方法实现的,但是基于数值模拟方法的结构设计很大程度上依赖于经验模型,同时在结构优化的过程中需要计算大量的参数组合,因此通常只能在有限的参数空间得到次优的结果。光子学器件的逆向设计有效的解决了上述问题。逆向设计方法可以在更广阔的参数空间寻找最优结构分布,还可以设计人脑无法直观设计的不规则结构,这使得光子学器件的性能更接近极限。本文介绍了光子学器件逆向设计的常用方法及基于逆向设计的几个重要应用。逆向设计方法有望促进集成光学及光场调控领域的发展。

**关键词:**梯度下降算法;遗传算法;深度学习;拓扑优化;相位设计

中图分类号:O439

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20225101.0151110

## 0 引言

人工光子学器件通过对结构的有序设计可以实现光场振幅、相位和偏振等多个维度的调控,在现代光学工程领域有广阔的应用前景<sup>[1-3]</sup>。光子学器件的传统设计方法常采用有限元法,有限时域差分法等电磁场数值模拟方法<sup>[4-7]</sup>。采用数值模拟方法设计复杂光子学结构时通常需要先给定结构的几何形状与材料参数,并经过多次模拟计算对结构参数进行微调。在优化过程中,结构的初始几何形状与材料参数通常是经验模型给定的,因此结构可优化的参数维度是有限的。除此之外,调参过程中需要多次迭代计算,这也增加了计算成本与时间成本。为了有效解决上述问题,光子学器件的智能优化方法应运而生。光子学器件的优化可以概括为三个方面,分别是尺寸优化<sup>[8-10]</sup>,形状优化<sup>[11-13]</sup>与拓扑优化<sup>[14-16]</sup>。尺寸优化和形状优化是通过优化光子学器件的几何参数(周期,厚度等)与几何形状来提高器件性能的,而拓扑优化是通过优化结构中的布局,即结构中不同性质材料的分布来实现器件性能的优化的,因此拓扑优化对比其它两类优化方式具有更高的自由度。上述三类优化方式被广泛的应用于光子学器件的设计中。近些年,随着计算机运算能力的提高和多种算法的提出,光子学器件的逆向设计也得到了快速发展。常见的逆向设计方法可以分为梯度下降算法与遗传算法两大类。梯度下降算法利用梯度信息指导结构的优化,由于该算法给定了明确的优化方向,因此优化速度较快<sup>[17-18]</sup>。而对于梯度信息未知的问题,可以采用遗传算法。遗传算法通过模拟生物“优胜劣汰”的进化过程来寻找全局最优值,因此无需梯度信息,且具有全局搜索能力<sup>[19]</sup>。两类算法都已经成功的用于光子晶体<sup>[20-21]</sup>,超构光栅<sup>[22-23]</sup>,超透镜<sup>[24-25]</sup>等光子学器件的设计当中。近些年,随着人工智能技术的发展,深度学习算法在诸多领域备受关注。在光子学器件的设计中,深度学习模型已被证实可以表征光子结构与其光学特性之间的物理关系<sup>[26-28]</sup>,并且已经成功用于隐身斗篷<sup>[29]</sup>、编码超表面<sup>[30-32]</sup>、模数转换器<sup>[33]</sup>

**基金项目:**国家重点研发计划(Nos. 2021YFA1400601, 2017YFA0303800),国家杰出青年科学基金(No. 11925403),国家自然科学基金(Nos.12122406, 12192253, 11974193),天津市杰出青年科学基金(No. 18JCJQC45700)

**第一作者:**玛地娜(1995—),女,博士研究生,主要研究方向为基于智能算法的光场调控。Email: madina@mail.nankai.edu.cn

**导师(通讯作者):**陈树琪(1979—),男,教授,博士,主要研究方向为人工微结构光场调控。Email: schen@nankai.edu.cn

**收稿日期:**2021-10-18; **录用日期:**2021-12-15

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

等器件的设计中。多个研究工作也证实,对比传统设计方法,逆向设计算法得到的器件拥有了更复杂抽象的形态,性能上也大有突破<sup>[34-39]</sup>。

本文对人工光子学器件的逆向设计工作进行了总结。分别介绍了基于梯度下降算法,遗传算法和深度学习的逆向设计方法及逆向设计方法在光谱设计,相位设计和非线性光学中的相关应用。

## 1 逆向设计方法介绍

基于智能算法的光子学器件逆向设计是当前光场调控领域的研究热点。图1总结了常见的逆向设计方法和具体应用。1.1节将介绍基于梯度下降算法的逆向设计方法,其中重点介绍基于拓扑优化的光子学器件逆向设计,除以之外,还介绍了遗传算法的基本思路,并通过一个典型的逆向设计实例展示了它在逆向设计中的作用。在1.2节将详细介绍不同优化目标下的深度学习学习方法。

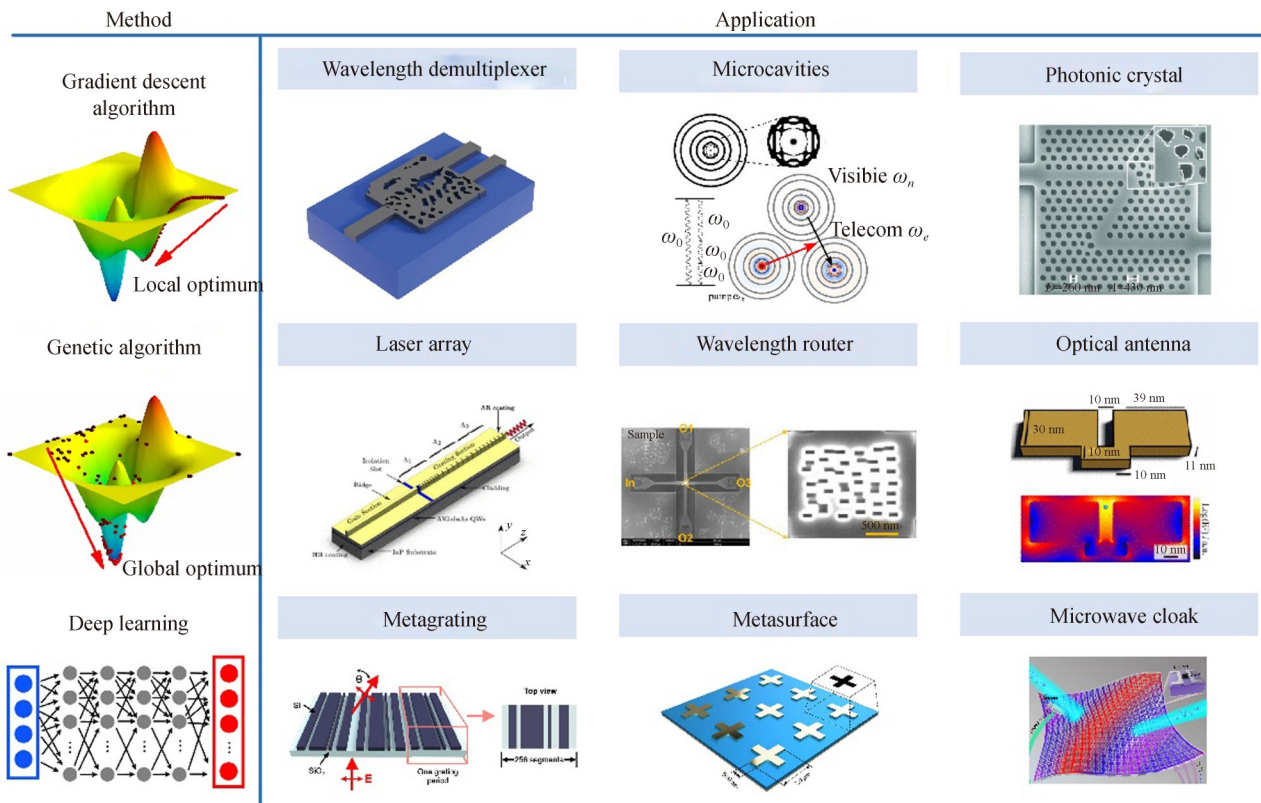


图1 逆向设计方法与应用

Fig.1 Inverse design methods and their applications in photonics

### 1.1 基于梯度下降算法与遗传算法的结构逆向设计

光子学器件的逆向设计依赖于智能算法与数值仿真技术。在逆向设计的过程中,通用的方法是给定初始结构,利用电磁场数值仿真计算目标函数,通过目标函数的反馈来更新结构,并多次迭代上述过程实现结构的设计。梯度下降算法利用目标函数的梯度信息来提供反馈。拓扑优化算法是梯度下降算法中较常用的一类算法,它会根据给定的目标函数与约束函数,在给定的设计区域对材料分布进行优化。拓扑优化算法中,目标函数的梯度常用伴随方法计算<sup>[40]</sup>。伴随方法的主要构成为参数变量 $p$ ,与 $p$ 相关的场变量 $x$ ,目标函数 $f(x, p)$ ,约束函数 $g(x, p)=0$ 。伴随方法通过引入拉格朗日乘子 $\lambda$ ,将目标函数转化为

$$\mathcal{L}(x, p, \lambda) = f(x, p) + \lambda g(x, p) \quad (1)$$

计算目标函数对于参数变量 $p$ 的梯度,则有

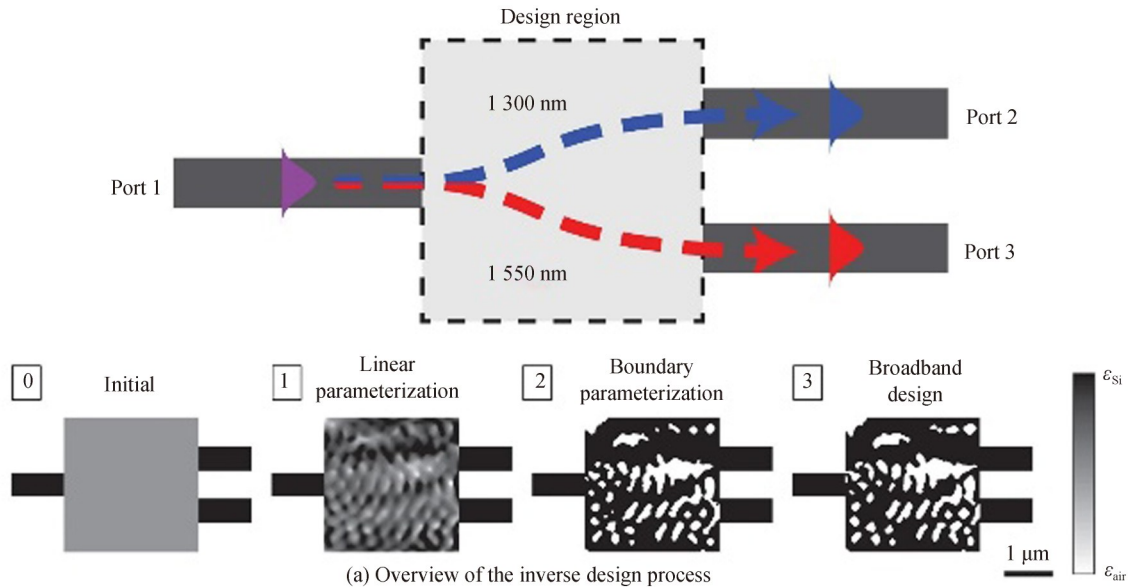
$$\frac{dL}{dp} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} + \lambda \left( \frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial g}{\partial p} \right) = \left( \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x} \right) \frac{dx}{dp} + \left( \frac{\partial f}{\partial p} + \lambda \frac{\partial g}{\partial p} \right) \quad (2)$$

令

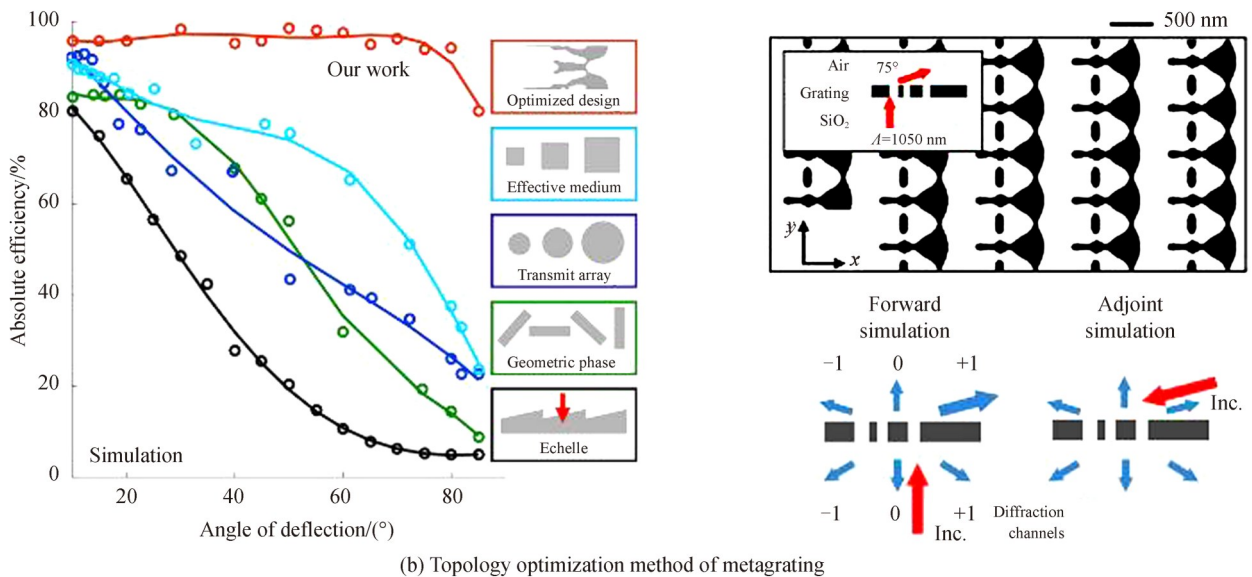
$$\frac{\partial f}{\partial x} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

就得到了目标函数对参数  $p$  的梯度值  $\frac{dL}{dp} = \frac{\partial f}{\partial p} + \lambda \frac{\partial g}{\partial p}$ 。实际应用中需要用原方程的解向量与伴随方程(式(3))的解向量来计算目标函数的梯度,在计算过程中无论变量多少,都仅需求解两个等大小的方程,对计算量没有显著的影响,因此该方法在大规模变量的优化中有广泛的应用。

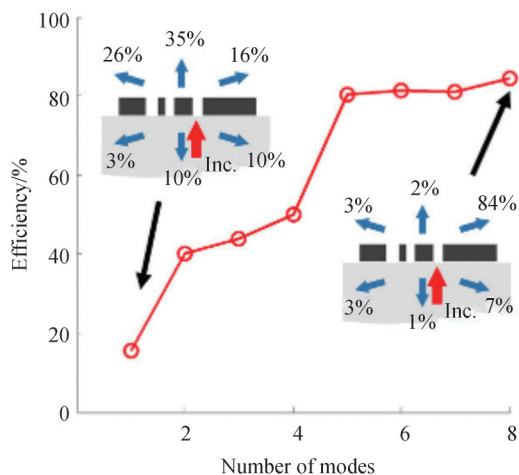
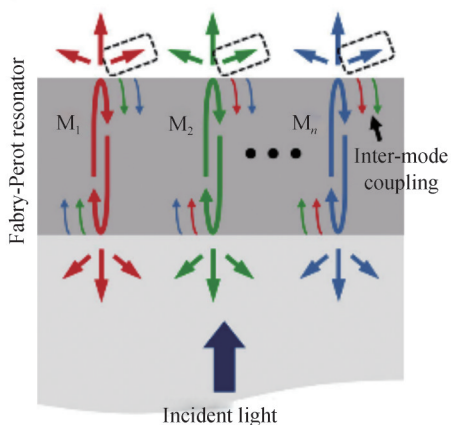
PIGGOTT A Y 等<sup>[17]</sup>提出了基于拓扑优化的自动化逆向设计方法,该方法只需指定设备所需的功能便可以实现自动化设计,全程无需人工干涉。以波分复用器的设计为例(图2(a)),第一步设定一个初始材料分布,长方形设计区域的材料介电常数允许在硅和空气的介电常数之间连续变化;第二步将离散的介电常数分布转化为二值化水平集表示;第三步使用正向模拟与伴随模拟计算梯度方向,沿梯度下降方向更新结构参数,使该结构的输出波可以在不同工作波长下耦合到指定的端口。将上述过程迭代一定的次数直到结构满足输出条件,就可以得到最终优化的结构。梯度下降方法得到的优化结果实际上是参数范围内的局部最优值,若能给定一个合理的初始结构分布,则算法更容易收敛到全局最优值。理想的初始结构分布常由目标优先方法给定。目标优先方法中,入射模式产生的电磁场需要满足目标方程,但允许违反麦克斯韦方程,后续需要利用梯度下降算法优化结构,使其电磁场分布满足麦克斯韦方程。从图2(a)看出,利用梯度下



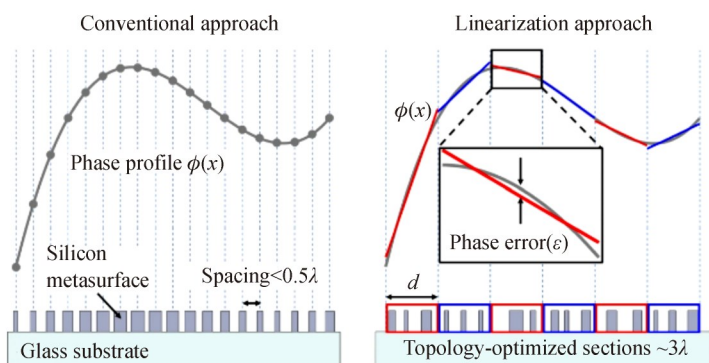
(a) Overview of the inverse design process



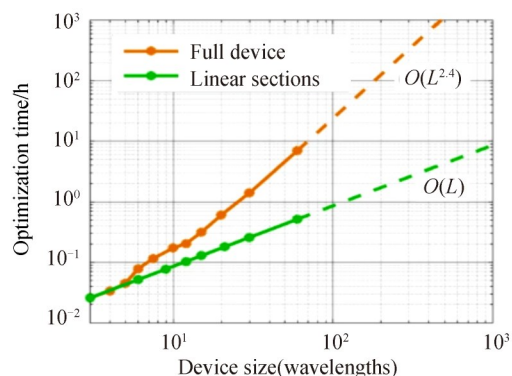
(b) Topology optimization method of metagrating



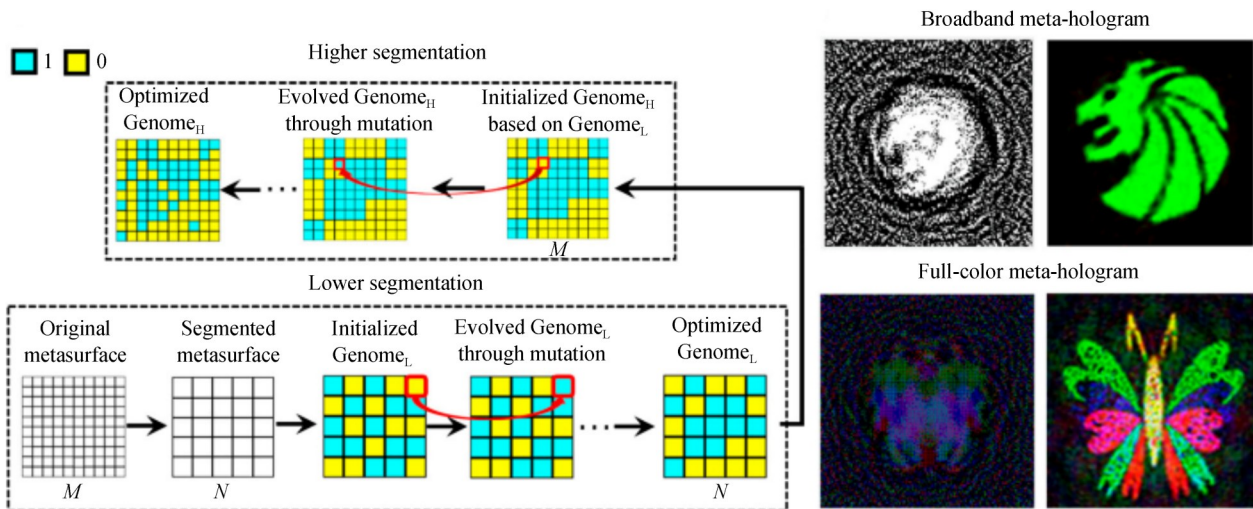
(c) Theoretical metagrating mode analysis



(d) Introduction of section optimization method



(e) Optimization time of two optimization methods



(f) Description of segmented hierarchical evolutionary algorithm

图2 基于梯度下降算法与遗传算法的结构逆向设计方法

Fig. 2 Structural inverse design methods based on gradient descent algorithm and genetic algorithm

降算法逆向设计的结构具有抽象的分布,这是人脑难以直接设计的,且该结构对比传统结构具有更高的鲁棒性,更小的面积,更低的串扰与更宽的带宽。

SELL D等<sup>[41]</sup>利用拓扑优化的方法设计了大角度、多功能的超构光栅,如图2(b)所示,该结构由非直观的纳米级图形构成。在结构优化过程中,仍采用一个初始的随机连续体分布,并利用正向模拟与伴随模拟计算梯度,多次迭代更新每个位置的介电常数,从而优化整个结构的偏转效率。对比其它透射类光栅,拓扑

优化光栅在大角度偏转中( $40^\circ$ 到 $80^\circ$ )展现了极高的效率。该单层超构光栅结构可以看作一个垂直取向的法布里-珀罗谐振腔(Fabry-Perot cavity, F-P cavity),衬底与光栅和空气与光栅的交界处相当于腔镜。当平面波入射时,腔内会激发多种模式,这些模式传播到界面处时会反射,并与其它模式耦合,再散射到几个离散的衍射通道。当所需衍射通道中所有布洛赫模式的外耦合平面波相长干涉时,可在所需衍射通道中实现高效率光束偏转(图2(c)左)。以图2(b)中的光栅结构为例,当外耦合平面波中仅包含一个模式时,光束的偏转效率仅为16%,当模式数增加到8时,偏转效率也增加至84%。这说明拓扑优化后的结构可以支持多种模式的激发与耦合,使器件的性能更接近极限。尽管拓扑优化方法已被用于诸多光学器件的设计,但是优化算法中的正向模拟和伴随模拟过程仍会增加结构的优化时长,尤其是大尺寸光子学器件的优化问题,就算采用GPU加速等方法仍无法将优化时间压缩在理想的范围。PHAN T等<sup>[24]</sup>利用分段优化的方法有效的解决了这个难题。图2(d)中展示了分段优化方法的主要思路,首先将所需的相位分布离散为一系列波长尺度的线性部分,接下来利用拓扑优化分别设计每个部分,使得各个部分的相位分布接近期望值,最后再将所有优化后的元素组合在一起,形成一个完整的结构。图2(e)对比了直接优化方法与分段优化方法的计算时间,可以发现利用分段优化方法可以在一天内产生毫米级拓扑优化超表面(使用个人笔记本电脑),而直接优化大约需要一年的时间。基于这个思路,局域周期性近似的思想在大尺寸结构的拓扑优化中被广泛的采用。除了拓扑优化方法外,还有许多基于梯度下降方式的结构设计算法,如牛顿法<sup>[42]</sup>和移动渐近线法<sup>[43]</sup>等。现在COMSOL Multiphysics, CST STUDIO SUITE等数值模拟软件包含了多种逆向设计算法,无需编写额外的程序便可以实现自动寻参,有效缩短了参数优化时间。

基于梯度下降的优化方法是局域参数空间内的优化,在全局优化问题中,常利用遗传算法。遗传算法是一套模拟生物进化的优化算法<sup>[44]</sup>,该方法主要有四个主要步骤。第一步:生成初始种群分布;第二步:种群中个体的基因通过交叉互换生成子代;第三步:子代中的基因随机变异,该过程是为了模拟生物进化过程中的基因随机突变;第四步,计算种群中所有个体的适应性函数,并按照函数得分排序。最终淘汰适应性差的个体,剩余的个体组成新的种群,并开始新一轮进化。将上述四个步骤迭代一定的次数,便可以使种群整体朝期望的方向进化。由于初始种群的参数分布并不局限于特定区域,因此进化算法可以在全局中搜索可能的参数分布,且种群数越大,越容易得到最优解。遗传算法不依赖于初始值的给定,因此无需人工干涉便可以在全局内自动寻找最优解,基于这个特点,它常被用于设计初始形态未知的器件。有多种类似遗传算法的优化算法,如多目标优化遗传算法<sup>[45]</sup>,协方差矩阵自适应进化策略<sup>[46]</sup>等,它们已成功用于波束整形,热学斗篷等方向。图2(f)展示了一种用来优化大尺寸结构的分阶段遗传算法<sup>[47]</sup>,待优化的超表面由诸多像素构成,每个像素包含“1”和“0”两种状态,其中“1”状态表示该像素参与了远场图样的构成,“0”状态则相反。第一阶段,将整个大的超表面分割成等尺寸的小面积超表面,然后每个小结构中的像素按照只变异的形式进行进化(即“0”与“1”之间转换)。当第一进化阶段的适应性方程满足收敛条件后,将第一阶段的最终优化结果整合,并将其作为第二阶段的初始结构。第二阶段中,整体的超表面结构按照仅变异的形式进化,直到最终达到阈值后输出最优结果。从实验结果中可以看出(图2(f)右),两种全息图(宽带全息图与彩色全息图)都可以按照设定的目标产生期望的远场图样,这证明了分阶段遗传算法的有效性。值得一提的是,该方法通过分阶段,分块优化的方式显著提高了大型光学元件的逆向设计速度。尽管遗传算法在一些光子学器件的设计中表现出色,但它仍存在一些问题,如优化变量有限,参数敏感,优化时间长等。当需要优化的变量过多时,遗传算法较难得到理想的结果,同时它非常依赖参数的设置,如变异强度和种群数目的大小都会影响算法最终的结果,并且算法在每一次迭代中都需要计算所有个体的电磁场分布,这也导致优化过程将耗费大量的时间与计算内存。因此在大尺寸结构优化中,拓扑优化方法仍更受青睐。

粒子群算法也常用于光子学器件的设计。粒子群算法是模仿鸟类觅食行为的一种全局搜索算法,该算法通过在解空间中移动粒子来寻找最优解<sup>[48]</sup>。粒子群算法的思路与遗传算法相似,但它们最大的区别是,粒子群算法中每个粒子在解空间中会单独搜寻最优解,并根据适应性函数的个体极值与全局极值来更新自己的速度与位置。在光栅结构的参数优化中常用到粒子群算法<sup>[49]</sup>。经过粒子群算法优化后的非晶硅光栅在可见光波段可以实现宽带,偏振不敏感的光吸收,且吸收效率高于80%。van DIJK L等<sup>[50]</sup>将粒子群算法

应用于等离子体散射反射器的参数优化中,优化后的器件可以产生尖锐的吸收峰并且结构的外量子效率得到了提升。在原有结构基础上,电流吸收率提高了32%。但是粒子群算法的局限性与遗传算法是相似的,变量个数,参数设置,时长等问题在粒子群算法中仍存在。因此在优化变量较少的情况下,遗传算法与粒子群算法可以指导参数优化的方向,但高自由度优化问题上仍需要更多高效灵活的设计方法。

## 1.2 基于深度学习的逆向设计方法

多层神经网络是一类简单的深度学习模型,该模型包含一个输入层与一个输出层,输入层与输出层之间包含多个隐藏层<sup>[51]</sup>。输入层的每个节点代表需要训练的特征,隐藏层中的每个节点均通过带权重的连接与上一层的节点相连。层与层之间的信息有两种传播方法,分别是正向传播与逆向传播,在正向传播过程中,每一个节点都接受了上一层节点的输出,并通过激活函数处理,继续传播至下一层。逆向传播过程中,网络计算结果与真实数据间的误差依照链式法则层层逆向传播,并对每一层的权重进行更新,通过一定次数的迭代,整个网络就可以完成训练。深度学习可以在大量的数据中有效的提取特征,但是单一的深度学习模型并不是万能的,不同的问题与不同的数据集需要选择适用的网络模型<sup>[52-54]</sup>。在光子学器件的设计优化上,许多的复合模型都被用于解决复杂的光学问题<sup>[55-57]</sup>。人工神经网络常被用于处理已知形状结构的尺寸优化问题。以多层薄膜结构的优化为例,该薄膜由多个二氧化硅与氮化硅层构成,每一层的厚度为待优化的参数变量,优化的目标是,给定目标的透射谱分布,快速得到结构每层的厚度。此类问题可以归类为回归问题,解决回归问题通常需要先训练结构参数到谱线的映射网络,网络的损失函数常选用网络的输出与真实谱线数据的均方差(或者平均绝对误差)。训练后的网络可以在几秒内得到任意结构的透射谱线,其计算速度远快于数值模拟方法。在实际应用中,存在多组参数数据对应一组谱线的情况,因此在逆向设计中,若简单的训练谱线对应参数的映射网络,往往很难收敛,因此LIU D等<sup>[58]</sup>提出了串联网络的设计思路。串联网络结构如图3(a)所示,首先固定参数与谱线之间的映射网络的权重值,并将该映射网络的输入层作为串联网络的中间层,再将目标谱线作为串联网络的输入,目标谱线与预测谱线的均方差作为损失进行训练。该方法将谱线对结构的映射问题转化成谱线与谱线之间的映射,提高了网络的收敛性。在实际训练神经网络的过程中,网络的结构和超参数的设置决定了网络的性能,而超参数的设置过程需要大量的调试,因此若能快速准确给定超参数,可以提高网络的收敛速度,改善网络的预测性能。为了有效解决上述问题,ZHANG T等<sup>[59]</sup>提出利用遗传算法设置多层神经网络的超参数。如图3(b)所示,一个简单的人工神经网络的结构由层数,每层节点数,激活函数,优化器等决定,将它们看作遗传算法中的优化变量,并通过多次重生成子代,变异,淘汰等过程,便可以得到最终的超参数分布。从图3(c)中可以看出,随着一代一代的进化,不同超参数网络的适应性函数得分逐步提高,且最终趋于稳定。采用优化后的超参数分布后,网络的训练仅需几分钟便可完成,有效提高了训练效率。

当面对形状优化问题和拓扑优化问题时,需要选用更加复杂的深度学习模型。图3(d)给出了一个对抗网络的三个基本组成部分,分别是生成器、模拟器与评价器<sup>[60]</sup>。生成器接受期望的透射谱与噪声,并生成可能的结构图案分布。模拟器是一个已完成训练的网络,它接受给定的图案,并生成图案对应的透射光谱。评价器负责评估生成器输出的图案与给定的数据库中的图案的差异。这三个网络各自有着不同的作用,其中模拟器是最早需要训练的网络。模拟器将不同图案的结构与对应的谱线作为输入与输出进行训练,训练后的模拟器可以以高精度实现谱线的预测。生成器接受期望谱线与噪声后会产生预测的图案,将此图案输入模拟器可得到预测谱线。生成器最终通过期望谱线与预测谱线的误差来完成训练。评价器则通过生成器的预测图案与数据集中给定的理想图案的误差来完成训练。它的主要作用是使最终得到的结构分布更为紧凑,更易于制备。通过对比对抗网络与简单的多层神经网络可以发现,随着网络结构的改变,网络能实现的功能也日益多样化,基于深度学习的逆向设计并不再局限于结构几何参数的设计,而是可以实现像素级的结构设计。

除了常见的网络结构外,深度学习方法还可以与其它算法结合实现更灵活的结构设计。ZHU D等<sup>[61]</sup>提出了一种混合深度学习框架(图3(e)),有效拓展了逆向设计的自由度。该框架由生成器、模拟器与优化器构成,其中生成器是一个合成图案生成网络,它可以解码一批向量并生成相应的纳米结构。模拟器输入纳米结构,并生成对应的光谱分布。优化器是一个基于进化算法的选择器件,它通过无梯度的全局搜索寻找

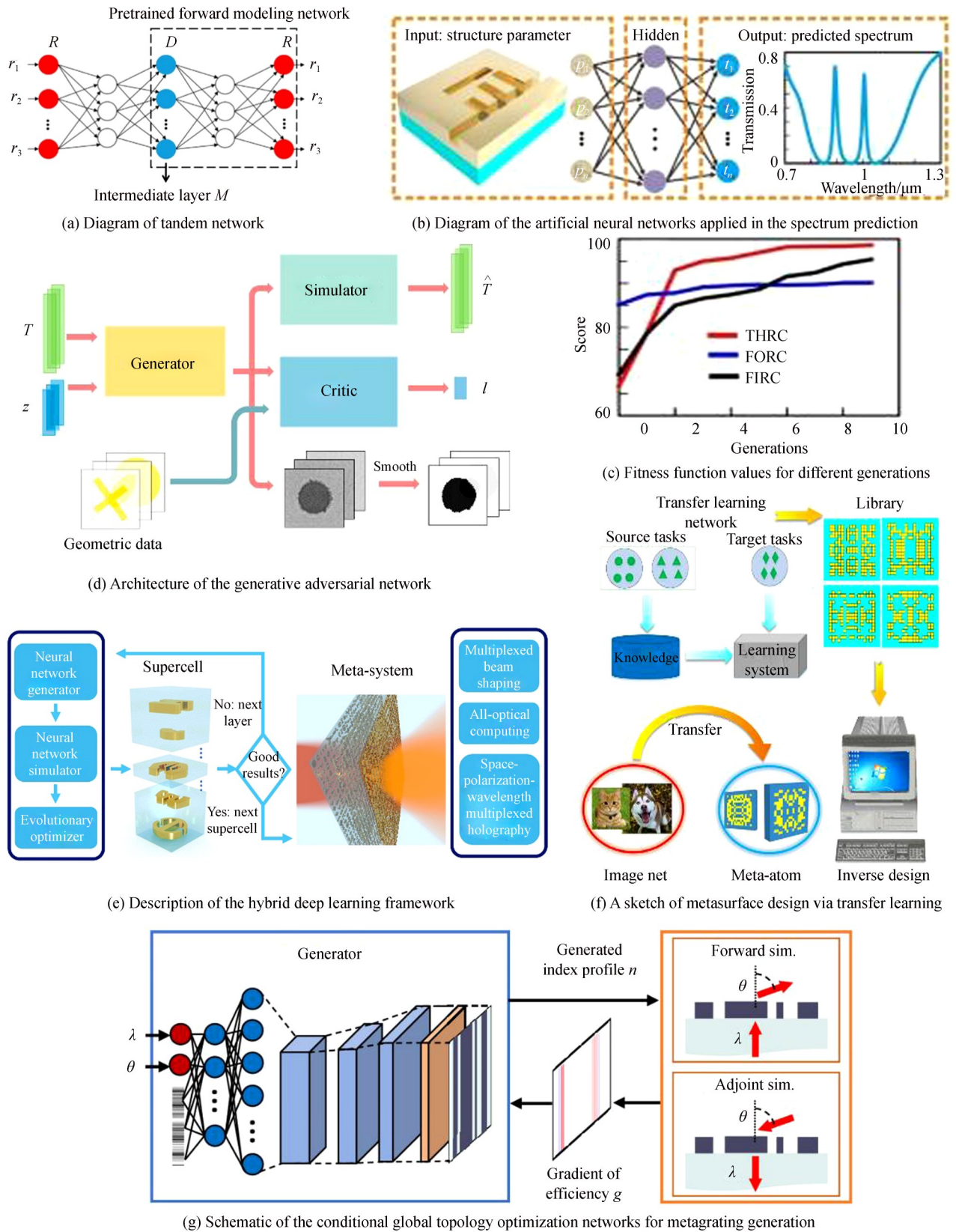


图3 基于深度学习的结构逆向设计

Fig. 3 Structural inverse design methods based on deep learning

满足期望的最优编码向量。进化算法与深度学习的结合可以很大程度的解决进化算法计算规模大,计算速度慢等问题,同时进化算法无需梯度的特点也可以使得该框架更容易找到全局最优的结果。另外,在此工

作中,研究者利用散射矩阵链式计算的方法将单层结构推广到少层结构,少层结构相较于单层结构具有很多优势,而且可以实现单层结构较难实现的功能。利用散射矩阵的计算方法没有引入更多的模拟过程,缩短了少层结构的设计时间。这套设计框架无需人工干预,具有高效率、高精度、数据需求少等卓越的特点,同时也为少层超表面的设计提供了思路。复杂的网络结构可以有效的解决多种的物理问题,但是一个复杂网络模型的训练通常需要大量的数据,而且随着问题复杂度的提高,网络的训练时间也会随之增加。在计算机科学中,为了减少计算成本,常利用迁移学习的方法来训练数据。迁移学习是将其它数据集上已经训练好的网络作为起点训练的一种网络训练方式,它可以有效缩短新网络的训练时间<sup>[62-63]</sup>。ZHU R等<sup>[64]</sup>将迁移学习的思想引入了超表面的设计当中。如图3(f)所示,预训练的Inception V3模型常用于处理图像分类问题<sup>[65]</sup>,但经过迁移,该模型可以将图像识别功能迁移到相位预测功能。该网络以随机不规则图形为输入,预测的相位分布为输出进行训练。训练后的网络结构可以按照90%的精确率实现相位预测。利用该网络建立结构库,则可以实现任意相位所对应的结构的快速搜索,能有效降低结构的设计成本,提高多功能器件设计的灵活性。迁移学习可以有效减少网络训练所需的数据量,也可以减少前期数据准备时间与计算机的运算成本。

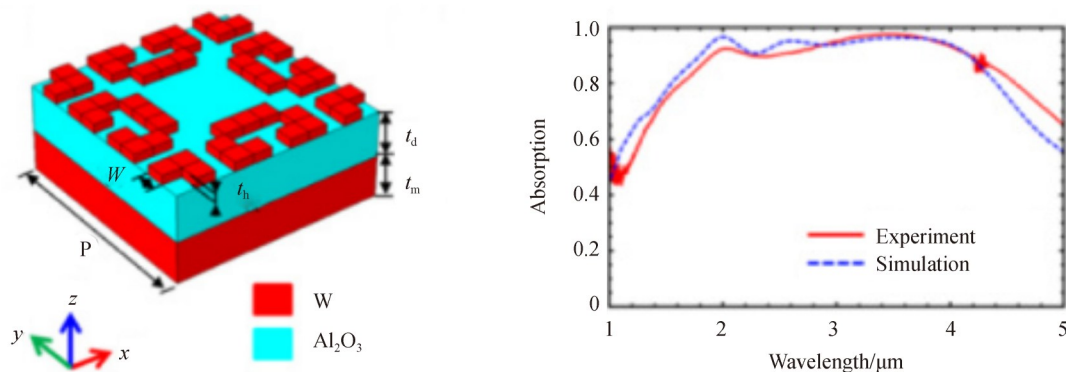
深度学习除了通过训练多种图形数据集来实现拓扑优化外,还可以与其它梯度下降方法结合实现拓扑优化。JIANG J等<sup>[66]</sup>将伴随方法与生成网络结合,提出了一种新型的全局拓扑优化网络(图3(g))。该网络由全连接层、反卷积层与高斯滤波器构成,网络的输入为设备的工作波长,偏转角度与噪声矢量,网络的输出是设备的折射率分布,网络的最后一层加入了高斯滤波器,可以用于消除小像素级的特征,使网络生成的结构不会过于离散化。该网络的训练目标是利用多次迭代,更新网络的参数,使特定波长与出射角度下的衍射效率最大化。与其它基于深度学习的逆向设计工作不同的是,该拓扑优化网络无需训练集,这是因为整个训练过程是直接通过数值模拟方法计算的结构的衍射强度,误差反馈过程中的梯度的计算也是通过伴随方法实现的,因此整个网络的训练仅需要物理梯度信息。对比1.1节介绍的普通的拓扑优化方法,通过全局拓扑优化网络生成的器件效率高于(或相当于)基于伴随方法的拓扑优化结构,且计算的成本更少,这也说明生成网络与伴随方法的结合能为拓扑优化方法带来革新。

## 2 逆向设计算法的应用

逆向设计的方法多样,且相较于传统的设计方法具有更高的灵活度。逆向设计方法可以将单个或多个光学参量作为目标进行设计,从而实现振幅、相位、偏振等参量的调控。近年来逆向设计方法在光谱设计、相位设计与非线性光学中取得了卓越的成就,因此本节着重介绍逆向设计在这三个方向上的主要应用,我们相信这些工作会为未来光子学器件新颖设计提供新的灵感。

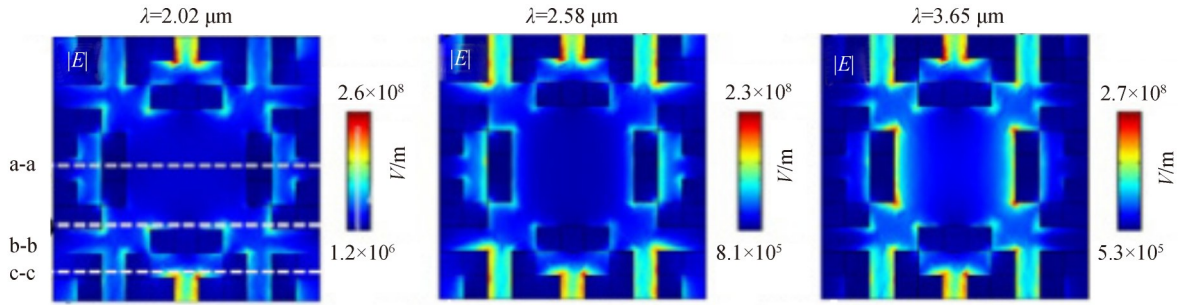
### 2.1 基于逆向设计方法的光谱设计

光谱设计在光学领域有着重要的意义,例如结构色光谱设计问题,若结构出射光谱改变,结构透射(或反射)光的颜色也会随之改变<sup>[67-69]</sup>。而对完美吸收器件而言,宽带、高效率的吸收光谱是器件设计的首要目标<sup>[70-72]</sup>。此类器件的设计中,期望的光谱是清晰明确的,但是依靠已知的光谱分布逆向寻找结构是困难的,因此逆向设计算法常被用于光谱设计问题。LI Z等<sup>[73]</sup>结合微型遗传算法和数值模拟方法,成功设计了中红外波段的宽带吸收器件。如图4(a)所示,该结构由顶部离散的钨结构、中部的氧化铝层和底部的钨层构成。顶部的钨结构被分为 $11 \times 11$ 个像素阵列,每个像素位置的材料可以用二进制状态表示(‘1’代表钨结构,‘0’

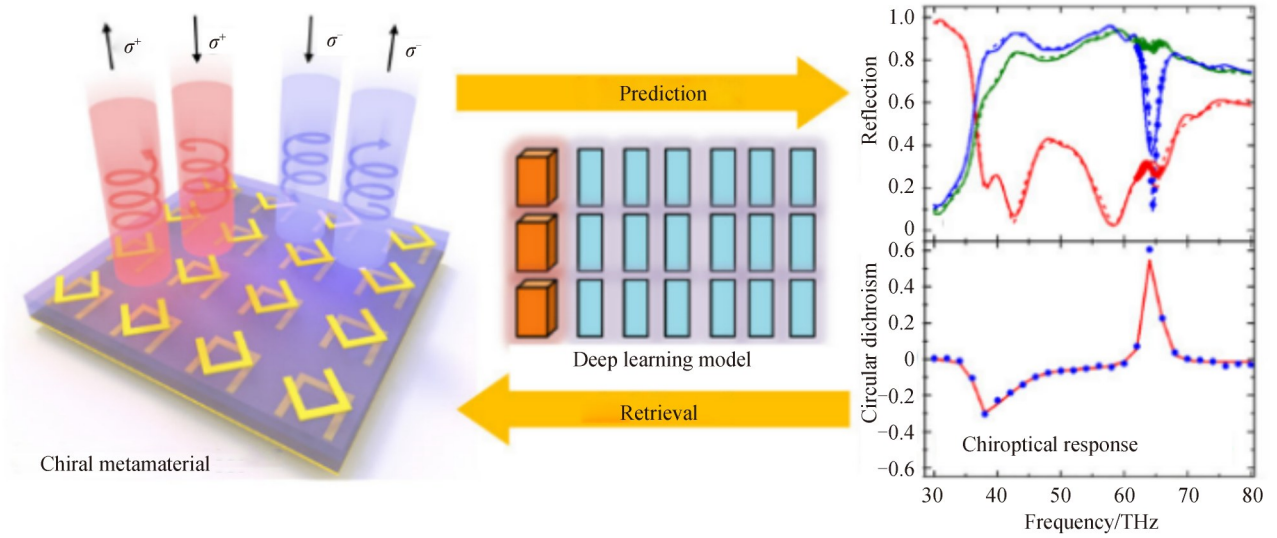


(a) Schematic and absorption spectra of the optimized unit cell

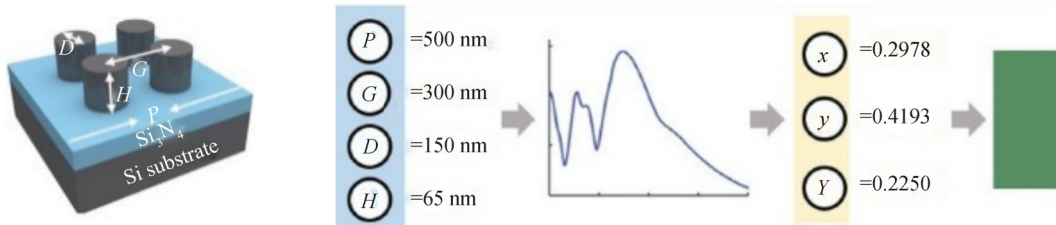




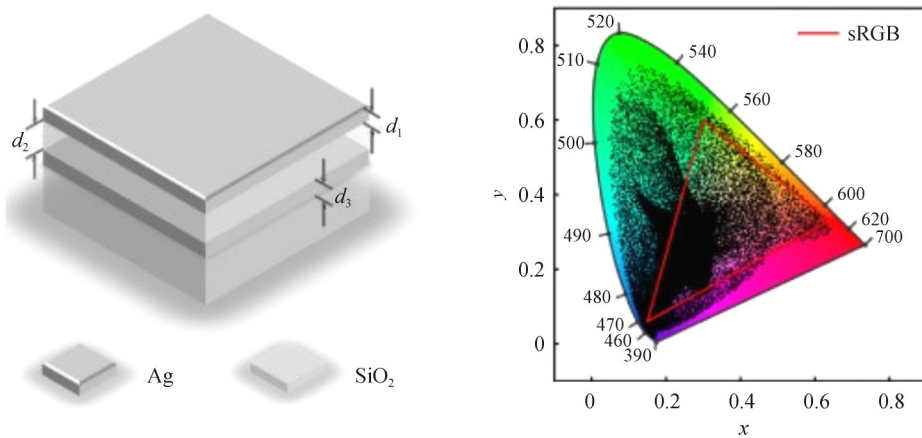
(b) Top view of the electric field distributions at the top surface



(c) Diagram of the deep learning model for designing chiral metamaterials



(d) Schematic of the silicon nanostructure and the optimization process for designing structural colors



(e) Schematic of the color filter and the dataset plotted in a CIE 1931-xy chromaticity diagram

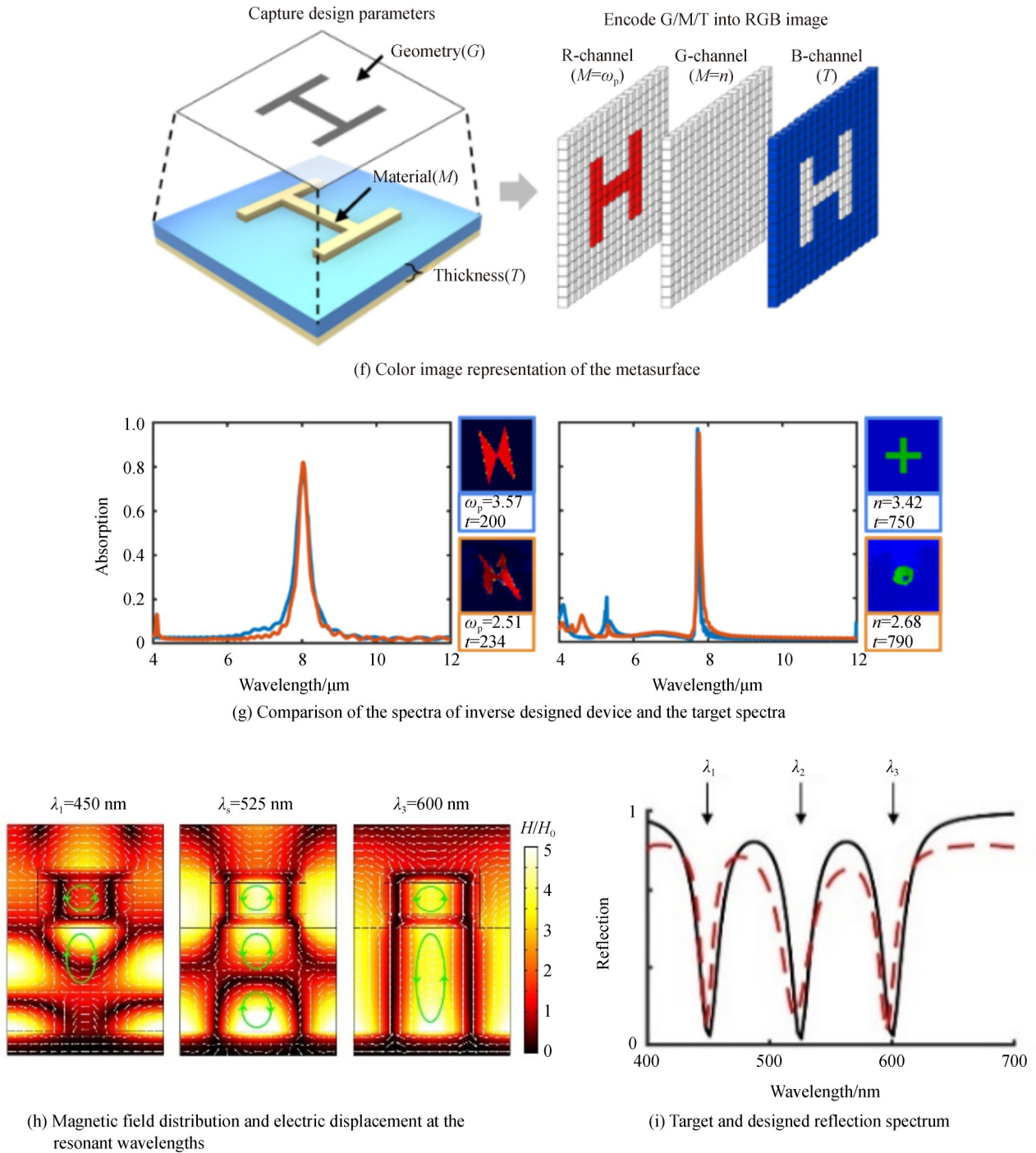


图4 逆向设计方法在光谱设计中的应用  
Fig. 4 Applications of inverse design methods in spectra design

代表空气)。该算法可以在35代内收敛到理想值。实验测量谱线与模拟谱线也证明逆向设计得到的结构可以实现宽带的高效吸收。观察不同波长下的电场分布,可以发现,逆向设计得到的结构对电场有增强作用(图4(b)),这也说明,逆向设计算法可以对一些光学现象的深度物理机制进行挖掘。在光谱设计领域,深度学习凭借其出色的拟合谱线的能力脱颖而出。在手性结构的设计中,基于结构的几何特征,两个环形开口环谐振器的堆叠可以实现手性镜子的作用,但通过微调谐振器的几何参数得到理想光谱是困难的,因此可以结合逆向设计实现期望的光谱与实际结构参数的一一对应。MA W等<sup>[74]</sup>利用双向神经网络实现了该功能。如图4(c)所示,该网络具有谱线正向预测与结构逆向设计两个功能,谱线正向预测中,输入几何参数,网络可以在0.0008的均方误差范围内精确的预测谱线。在基于深度学习的逆向设计问题中,输出结构的性

能与谱线预测网络的性能密不可分。此案例中,正向预测网络的预测精度很高,因此,逆向设计过程中仅需使用卷积加全连接层的结构提取目标光谱特征,并与正向网络相连接形成一个完整的逆向设计系统。值得一提的是,光谱的设计方法十分灵活,网络训练过程中可以将多组反射光谱数据或圆二色性光谱数据作为目标进行训练,两种训练方式都可以高效快速的实现结构逆向设计。

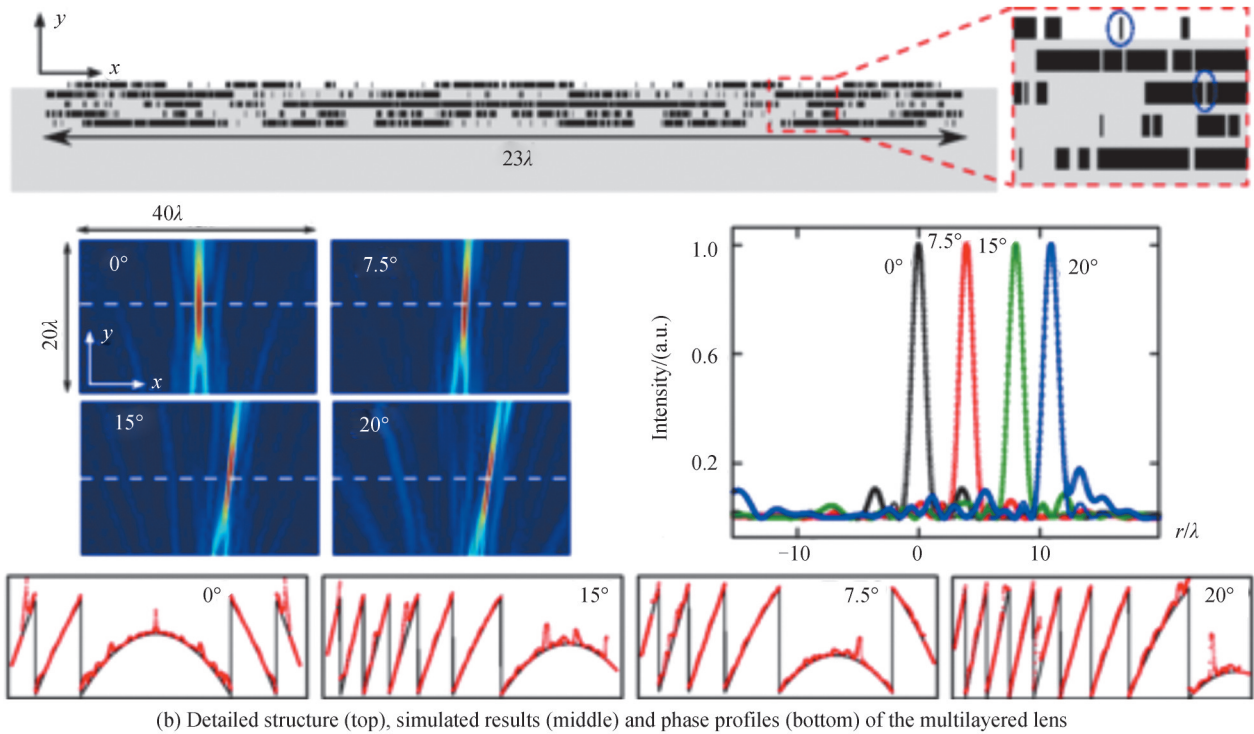
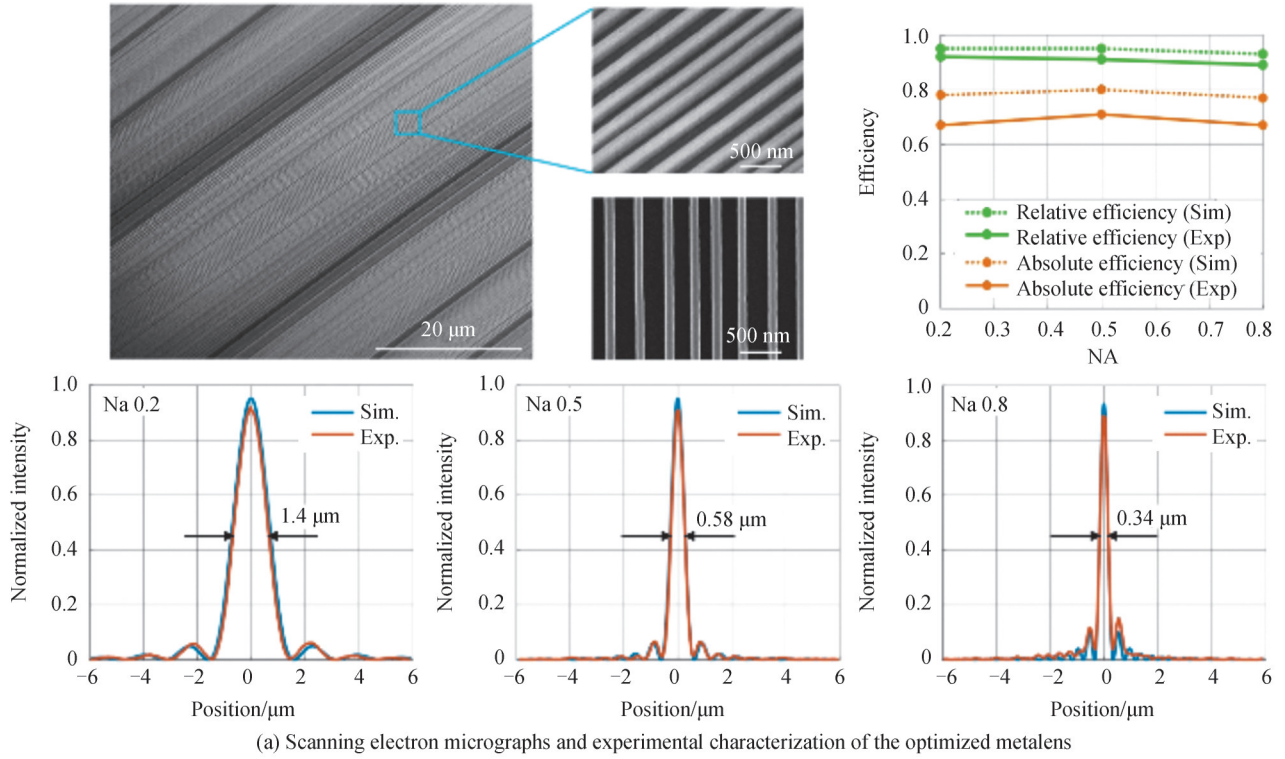
在结构色器件设计中,深度学习也起到了至关重要的作用。色坐标在色度学中具有重要的意义,若可以控制色坐标分布,则可以任意设计颜色的色相,明亮与饱和度。在实际应用中,色坐标是由结构的反射/透射光谱计算得到的,因此可通过光谱设计实现色坐标的任意设计。GAOL等<sup>[75]</sup>利用串联网路实现了色坐标与结构色器件几何参数的映射(图4(d))。计算结果显示该网络可以以95%的精确度实现色品图中100万种不同的颜色,这是传统设计方法难以实现的。DAIP等<sup>[76]</sup>利用双向深度学习模型实现了F-P腔彩色滤波器的逆向设计(图4(e))。该双向网路具有很高的色彩设计精度,在CIE 1976-Lab颜色空间中,训练集的平均 $\Delta E_{2000}$ 值低于1.2。从色品图数据可以看出,该结构可实现的颜色覆盖了215%的sRGB色彩空间。对比其它设计方法,基于深度学习的逆向设计具有高速,高效等优势。深度学习在结构色器件设计中展现了巨大的前景,但是大多数器件的设计仍局限于尺寸优化,若在设计中引入更高的自由度,相信可以实现更高性能的颜色显示。

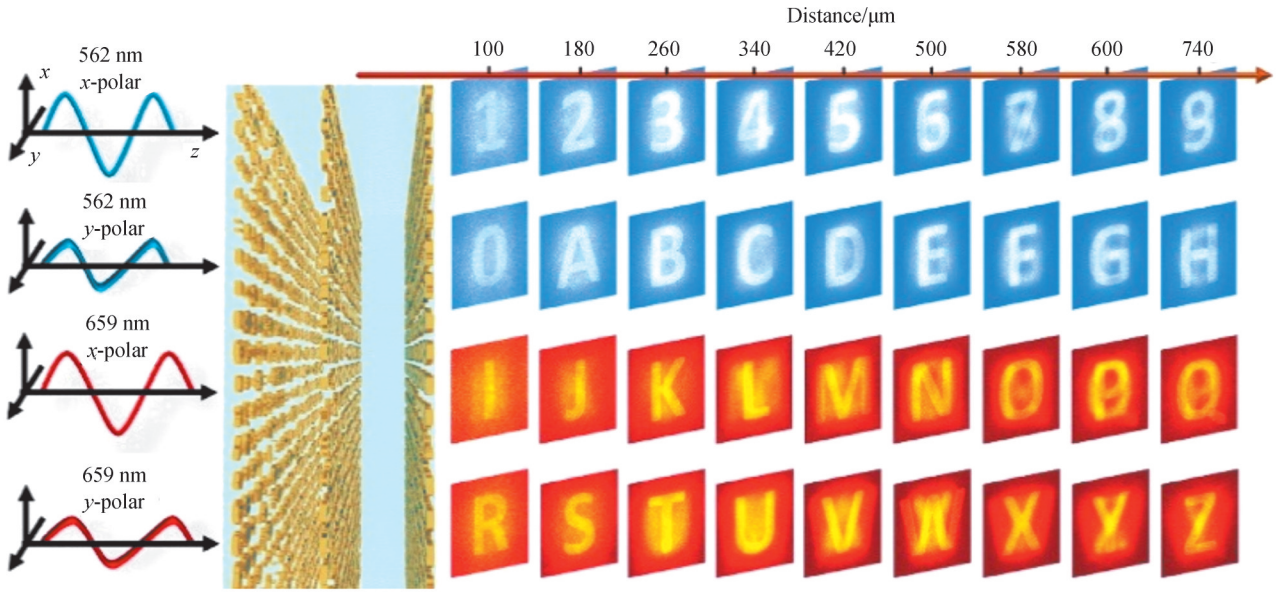
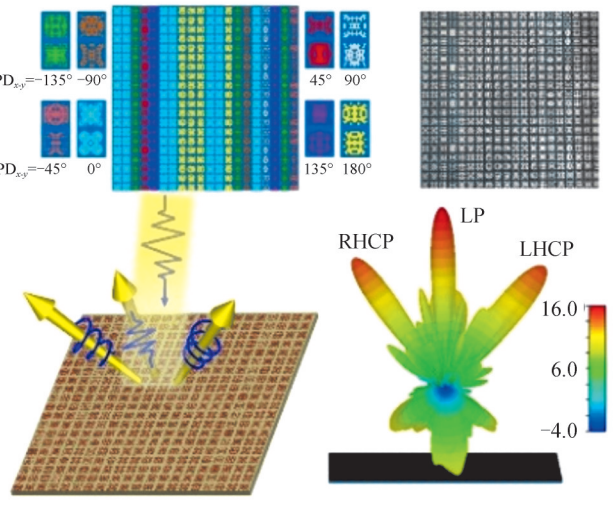
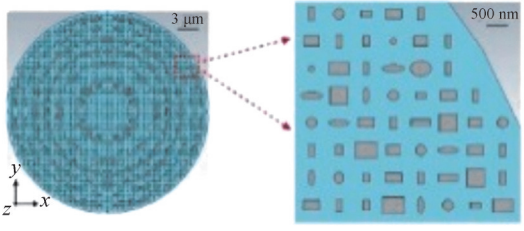
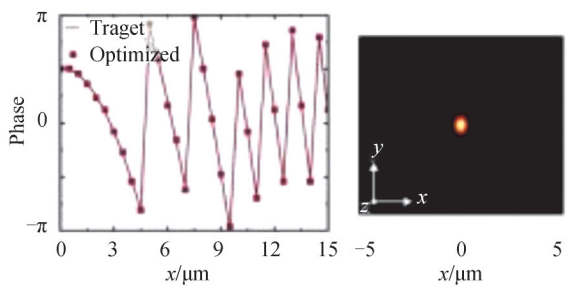
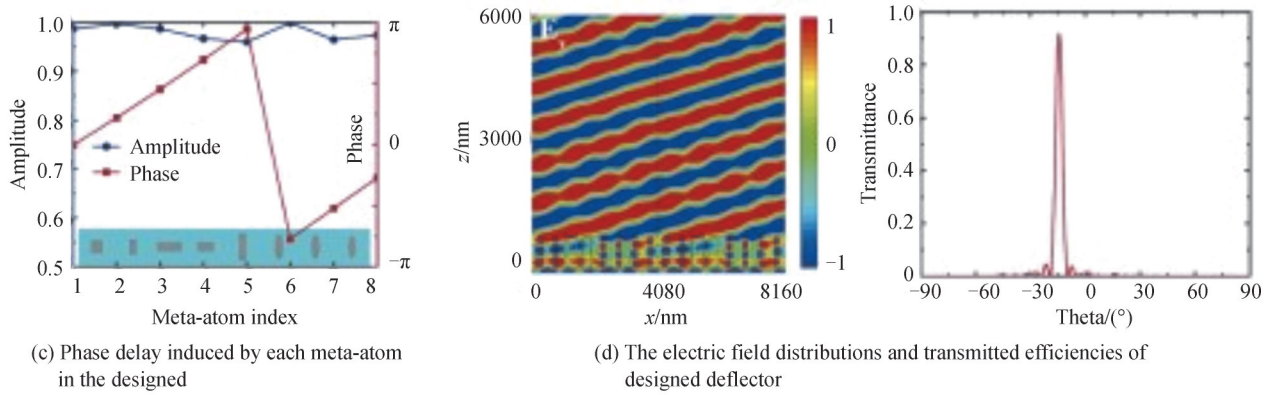
除了结构色以外,光谱设计在共振器件的设计中也有重要的作用。多数谱线的正向预测网络都存在一个缺点,它们对于极窄带宽的谱线数据的拟合误差较大,这主要是因为谱线极窄带宽处的采样数不足。YEUNG C等<sup>[77]</sup>通过特殊的折射率编码方式,设计了窄带谱线的全局逆向设计框架。由卷积网络的工作原理可知,卷积网络更易于从RGB图片中提取特征,因此本案例中研究者将金属-绝缘体-金属结构与单层电介质结构的材料、几何形状与厚度编码到RGB通道中,其中R通道代表金属谐振器的等离子体频率和形状,G通道代表单层电介质结构的实际折射率和形状,蓝色通道代表电介质层厚度(图4(f))。由逆向设计得到的结构的模拟谱线可知,该模型可以根据期望谱线准确的生成所需结构的厚度等参数,并且对于单个目标可以得到多个结构参数分布,满足不同的制备要求(图4(g))。SO S等<sup>[78]</sup>借助串联网路设计了一种在可见光范围内光谱敏感的多波段吸收材料。该串联网路的输入为目标光谱与共振波长,输出为结构的预测光谱,中间层为结构的几何参数。训练后的网络可以实现谱线与结构参数的一一对应。反射谱线的反射效率与共振波长可以通过期望谱线的形态来任意控制,如图4(i)所示,期望的谱线在450,525,600 nm波长下反射率接近0,经过逆向设计得到的结构的模拟光谱与目标光谱基本一致。结构的电位移图说明(图4(h)),三个波长处存在不同模式的耦合,当结构的尺寸改变时,结构内产生的模式也会随之改变。为了进一步了解多波段吸收结构的机制,SO S等将目标谱线逐步红移,最终得到了结构的尺寸优化方向。这也说明,深度学习方法可以分析数据间的关系从而指导特定器件的设计。

## 2.2 基于逆向设计算法的相位设计

相位调控一直是光场调控的重点,相较于其它光场参量的调控,相位调控的应用领域极为多样,但它的实现方式也相对复杂<sup>[79-83]</sup>。图5(a)中展示了由分段拓扑优化方法得到的大面积、高数值孔径的超透镜<sup>[24]</sup>。1.1节中介绍了分段拓扑优化方法的原理,该方法的实质是分别优化每段结构的振幅与相位。由理论分析可知,当分割长度小于某个极限值时( $4.4\lambda$ ),结构的焦平面场强分布将非常接近理想透镜。图5(a)给出了拓扑优化得到的不同数值孔径透镜的实验分析结果,可以看出所有透镜的相对效率均高于89%,绝对效率均高于67%,其中数值孔径为0.8的透镜可以实现640 nm波长光束的高效聚焦,且束腰直径仅为0.34  $\mu\text{m}$ 。然而拓扑优化并不局限于单层结构,对于多层结构,拓扑优化依然有效。LIN Z等<sup>[84]</sup>设计了一个数值孔径为0.35,焦距为 $30\lambda$ 的多层透镜。该透镜由五层非周期分布的硅光栅构成,每层的厚度为 $0.2\lambda$ ,每层的硅光栅都是经过拓扑优化得到的,因此没有特定的分布规律(图5(b))。数值模拟得到的远场图样与焦平面的场强图都证明该透镜基本接近理想的像差矫正透镜。尽管多层结构在实际制备与优化计算中存在加工难度大等问题,但器件的多层设计能增加结构的调控维度,因此多层、易制备器件的逆向设计仍是个重要的研究方向。

与拓扑优化方法不同,基于深度学习的逆向设计具有灵活、快速、便捷等优势,因此常被用于相位设计的工作当中。深度学习拟合相位信息通常有两种方法,第一种方法是先拟合 $S$ 参数的实部与虚部,再通过实





(h) Simulated performances of the inverse designed space-polarization-wavelength multiplexed hologram

图5 逆向设计方法在相位设计中的应用  
Fig.5 Applications of inverse design methods in phase design

部虚部的数据计算相位分布;第二种是将相位预测问题转化为分类问题(每个角度为一个类,共360类)。第一种方法的网络结构一般较为简单,因此易于构建。但是曲线拟合问题存在一定的弊端,如曲线预测上若存在一些细小的误差,则有可能导致相位预测上有较大的误差。第二种分类问题的网络模型一般比较复杂,但其相位预测精度相对较高,因此在实际应用中可以根据相位预测精度的需要,采用合理的模型进行特征学习。图5(c)到5(f)展示了曲线拟合方法实现的相位设计结果<sup>[85]</sup>。此案例中研究者利用多层神经网络实现了透射系数实部与虚部的正向预测,并利用遗传算法实现了结构的逆向设计。透射系数的拟合除了可以计算相位信息外还可以计算振幅信息,利用遗传算法全局搜索目标振幅与相位对应的结构并生成相应的结构表后,就可以根据期望的振幅、相位分布来排列不同结构单元,从而实现偏转器、透镜等多种器件的逆向设计。图5(g)展示了由分类网络设计的编码超表面<sup>[86]</sup>,该网络可以以1.493°的平均误差实现相位的精准预测。由三维全波模拟结果可以看出,编码超表面可以按照期望的辐射角辐射不同偏振态的波束,这种高效的相位设计方法也使得多功能集成器件的设计更加灵活。1.2节中介绍了一种复合深度学习框架,它可以利用散射矩阵和无梯度的遗传算法在整个参数空间中寻找多层结构的最优参数分布。ZHU D等<sup>[61]</sup>利用该框架实现了多种功能器件的设计,如偏振复用光束发生器、全光学计算器件、空间偏振波长复用全息图等(图5(h))。以空间偏振波长复用全息图的设计为例,第一步需要确定目标图像与全息图到平面的距离;第二步向每个目标图像添加随机相位;第三步通过衍射公式计算不同图像在全息图平面的振幅和相位分布,计算加权叠加后对振幅进行归一化,并对振幅和相位进行离散化。得到目标振幅与相位后,便可以利用复合深度学习框架逆向寻找对应的结构单元。该方法还可以扩展到更多的波长与距离,这为信息光学器件的设计带来了更多的可能。

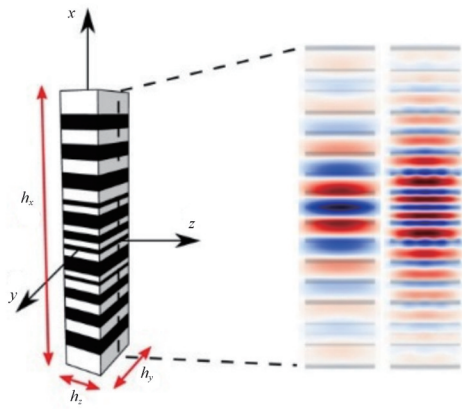
### 2.3 基于逆向设计方法的非线性器件设计

自激光器问世以来,非线性光学得到了快速发展,它在脉冲整形<sup>[87]</sup>,光谱学<sup>[88]</sup>,量子光学<sup>[89]</sup>,非线性编码<sup>[90-91]</sup>等领域都有重要应用。在传统器件中,非线性效应通常是很弱的,常用的增强非线性效应的方式是利用谐振腔结构长时间限制光束,从而增强非线性相互作用<sup>[92-94]</sup>。理想的谐振腔结构需要同时满足几个条件,包括相位匹配<sup>[95]</sup>、大的非线性耦合系数<sup>[96]</sup>和长辐射寿命<sup>[97]</sup>。传统优化方法在实现多目标问题优化时通常会耗费大量的时间与计算机资源。逆向设计方法,不仅可以实现多目标问题的优化,而且适用于大尺寸元件的设计,因此常被用于谐振腔结构设计。考虑一个可以产生二倍频的谐振腔结构,它的非线性重叠因子 $\bar{\beta}$ (也称非线性耦合系数)可以由基频与倍频的空间重叠积分给出,表达式为

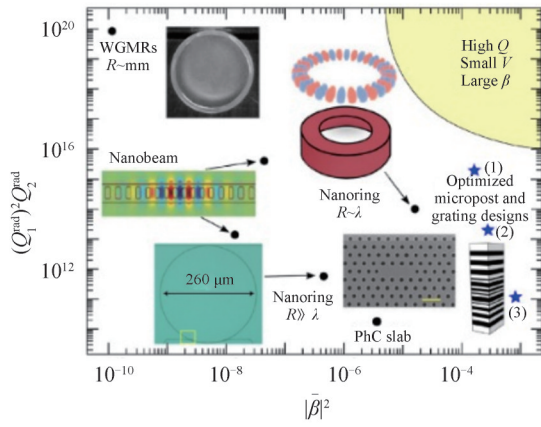
$$\bar{\beta} = \frac{\int d\mathbf{r} \bar{\epsilon}(\mathbf{r}) E_2^* E_1^2}{\left( \int d\mathbf{r} \epsilon_1 |\mathbf{E}_1|^2 \right) \left( \int \sqrt{d\mathbf{r} \epsilon_2} |\mathbf{E}_2|^2 \right)} \sqrt{\lambda_1^3} \quad (4)$$

在逆向设计过程中最大化 $\bar{\beta}$ 是增强二倍频强度的首要目标。常规的优化算法通常要求解两个频率下独立的散射问题。但是LIN Z等<sup>[98]</sup>通入引入扩展源 $J_2$ 将问题简化为组合辐射功率优化问题。若假设在 $\omega_2$ 频率下存在一个电流密度为 $E_1^2$ 的场源,则可以通过该场源辐射功率 $f = -\text{Re} \left( \int d\mathbf{r} J_2^* E_2 \right)$ 的优化,实现非线性重叠因子的最大化。确定了优化目标后,可以利用基于梯度下降的优化方法实现微腔结构的逆向设计。在整个优化过程中,需要同时满足两个频率下的麦克斯韦方程。优化过程从一个全真空(或全电介质)板出发,利用梯度下降的方法优化该结构在 $x$ - $z$ 平面上的分布,经过多次迭代计算可得到最终的结构。

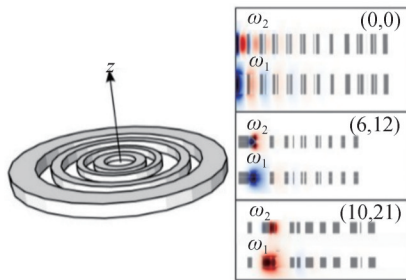
图6(a)展示了利用上述优化方法设计的多层微阵列结构,该结构由交替分布的铝砷化镓(AIGaAs)层/氧化铝层构成,当AIGaAs的晶体平面取向在(111)方向时,可以耦合基波与二次谐波模式的 $E_y$ 分量。该结构具有寿命长、体积小和重叠因子大等特点,因此与传统的结构(如微环、纳米环谐振器、光子晶体板和纳米束腔等)相比,可以将二倍频的效率提高几个数量级(图6(b))。这也说明,拓扑优化后,结构的非周期排列和亚波长级的特征可以细致的消除干扰,因此可以实现精确的频率匹配和最佳的非线性模式重叠。该课题组利用相同的思路设计了环形谐振腔结构<sup>[99]</sup>,该结构确保了频率匹配,且具有长辐射寿命和小体积限制,对二倍频信号有可观的增强作用(图6(c))。这套逆向设计方法对于超表面结构依然适用。图6(d)给出了一个有限厚度的正方形栅格超表面<sup>[100]</sup>,逆向设计得到的结构可以在特定入射角度下产生高强度的二次谐波。



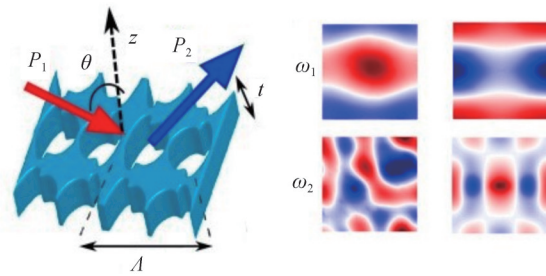
(a) Schematic illustration of the micropost cavity and  $E_y$  components of two localized modes



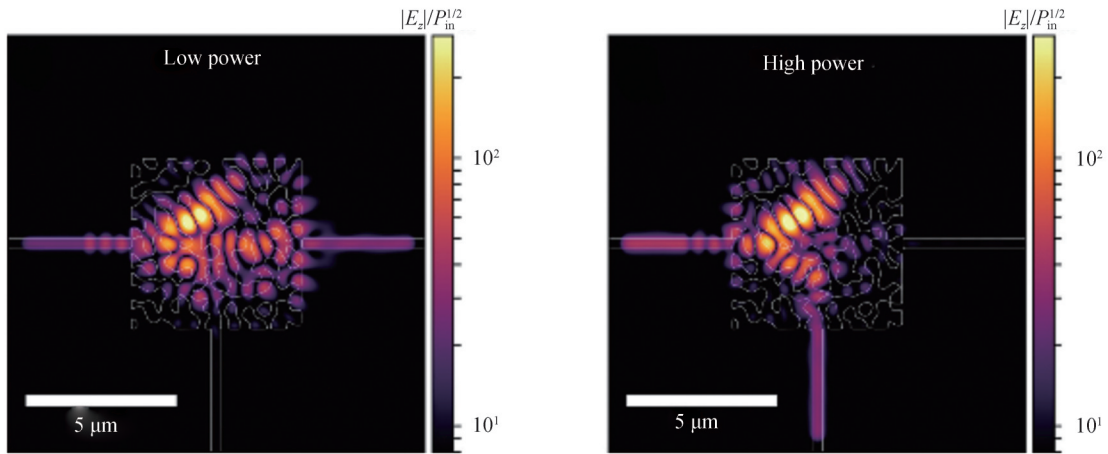
(b) The quality factor product and nonlinear overlap coefficient, compared with other devices



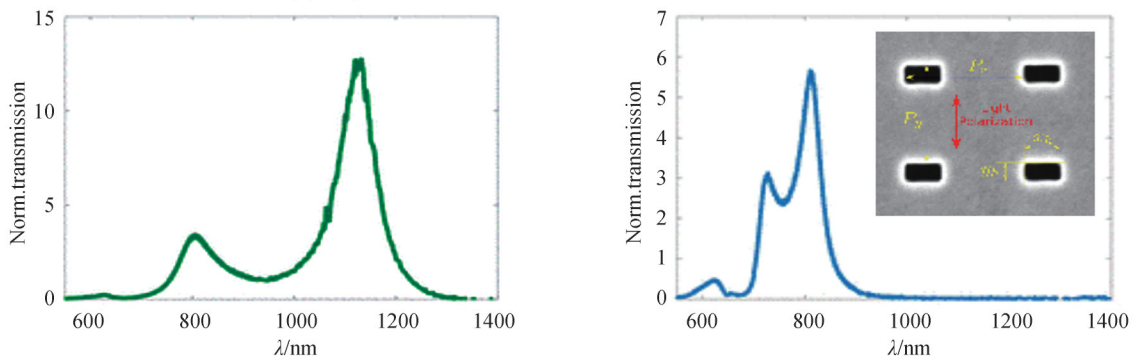
(c) Schematic illustration of multi-track ring resonators and the cross-sectional profiles of three ring resonators



(d) Schematic illustration of a square-lattice metasurface and the mode profiles corresponding to two inverse-designed metasurfaces



(e) Amplitude of the simulated electric field of the final structure



(f) Measured linear signals of two different configurations. Left: linear optimization. Right: direct optimization

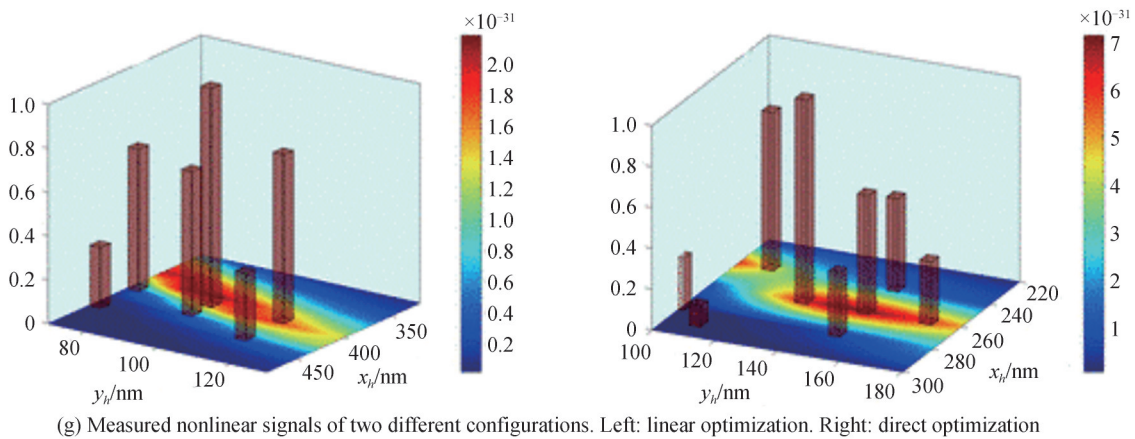


图6 逆向设计方法在非线性光学中的应用

Fig.6 Applications of inverse design methods in nonlinear optics

由电场截面图可以看出,此结构满足频率与相位匹配条件。HUGHES T W等<sup>[101]</sup>利用扩展的伴随法在频域空间中实现克尔非线性电磁系统的优化(图6(e))。如图所示,该系统的优化目标是,在线性状态,最大化右侧端口的传输系数;在非线性区域,最大化底部端口的传输系数。由最终结构的模拟结果可知,该方法可以通过离散无规则结构来实现高低功率脉冲的不同方向传播。该方法在新型非线性光子学器件的设计中有着很好的发展前景。

除了拓扑优化外,遗传算法与深度学习也可以实现非线性效应的增强<sup>[102-103]</sup>。如图6(f)所示,一个纳米孔阵列,它可以通过四个参数(长、宽与周期)的调节来增强结构的四波混频效应。由于可调变量少,因此可以利用遗传算法实现该结构的逆向设计。此案例中,研究者考虑了两种优化方式,分别是基于谱线的优化(线性优化)与直接计算非线性强度的优化(直接优化)。超表面可以通过局域场增强来实现非线性信号的增强,因此可以通过特定的线性谱线的设计来实现非线性效应的增强。图6(f)和6(g)中给出了通过两种方法得到的结构的线性透射谱与非线性信号强度,可以从实验结果看出,两种方法均可以有效的实现非线性信号的增强。

### 3 总结与展望

本文总结了基于梯度下降算法、遗传算法和深度学习的光子学器件逆向设计方法,并给出了这些方法在光谱设计、相位设计与非线性器件设计等领域的具体应用。基于智能算法的光子学器件设计是对传统设计方法的一个革新。所谓的传统设计方法实际上是需要人为优化参数的一类方法的统称。以电介质超表面的设计过程为例,电介质超表面操控光场主要是通过米氏共振实现的。电介质的米氏共振包含多个分量,如电偶极子、磁偶极子、电四极子与磁四极子共振等,这些分量的叠加影响着电介质结构近场与远场的光场分布。而结构的共振波长与有效折射率实际上是微结构几何参数的函数,因此在设计结构的过程中可以通过结构几何尺寸的调控来定制结构的散射特性。实际应用中,通常采用数值模拟的方法寻找结构的理想几何参数(或者实验测试),为了提高模拟计算的效率,需要选定合适的数值模拟方法并选用恰当的边界条件。模型建立好后,我们需要对结构的形状与参数进行优化从而得到理想的输出。人工参数优化需要按照遍历等方式计算调控范围内的多组参数,因此计算时长通常较长,但在参数范围较小的情况下效率仍是可观的。梯度下降方法与遗传算法实际上为参数优化提供了一个方向,因此有利于加速结构的设计。深度学习模型训练完成后虽然可以取代数值模拟过程,但是需要注意的是,深度学习并非是脱离物理模型的,它需要从模拟数据集(或实验数据集)中提取特征并学习。因此智能逆向设计方法是对传统方法的一个优化,它并不是独立于物理模型存在的。

传统的设计方法受到结构周期、材料分布、运算时间等因素限制,因此具有一定的局限性。逆向设计方法可以在全参数空间实现快速、高自由度的参数优化,更有可能得到接近极限性能的结构分布。通过对现有逆向设计工作的分析可知,逆向设计方法是灵活的,它可以随着优化目标的不同而改变,此外它还可以实



现多目标优化,因此利于设计高效率的多功能集成器件。我们还可以通过建立数据库等方式实现目标结构的快速检索,提高数据的利用效率。但是逆向设计方法并不是万能的,不同的设计方法具有不同的优势与局限性,如:

1)传统设计方法(人为调参):方式简单,无需建立复杂的算法模型,可通过物理模型的分析减少参数优化范围,对于小范围优化具有很好的效率。但待优化结构的形状通常是直观的图形,对于抽象图形的设计具有一定的局限性。当参数调控范围较大时,调参效率较低。

2)梯度下降算法:无需数据集,收敛速度快,调控变量个数不影响计算规模。但对于非凸函数无法保证收敛到全局最优值,初始值敏感。

3)遗传算法:无需数据集,具有全局搜索能力。但需要设置合适的算法参数,计算量大,能优化的变量数目有限。

4)深度学习算法:多数情况下需要数据集,调控方法灵活多变,易与多种算法结合。但针对不同的物理问题需要建立特异性的数据集,模型缺乏普适性,入门较难,复杂网络模型的建立与训练比较困难。

因此选择逆向设计方法时需要对物理模型的计算时间及优化维度进行评估。上述逆向设计算法都是依附物理模型存在的,以深度学习算法为例,基于深度学习的逆向设计方法对数据集存在依赖性,训练后的网络在给定范围的数据中具有较好的拟合效果,若数据范围改变,网络的泛化能力可能会下降,此时需要重新收集新的数据并建立新的模型。因此收集训练数据前需要给定合理的参数范围,这样有助于提高网络的训练与拟合效率。网络训练过程中需要的数据量通常较大( $10^3\sim 10^5$ 左右),因此在小范围优化问题中,效率可能低于传统方法。针对这些局限性,近几年产生了多种网络形式,如物理信息神经网络<sup>[104]</sup>等。物理信息神经网络在训练过程中遵守相同的偏微分方程与边界条件,因此缓解了网络对于数据的依赖性。除了采用单一的逆向设计方法外,多种方法的结合也有利于提高设计效率,提高数据的利用率。

随着计算机算法的日益丰富,光子器件的智能设计展现出了巨大的潜力,智能算法将纳米光子学与计算科学相结合,为研究者提供了一个高效的新型设计方法。未来可以通过智能逆向设计方法实现更多维度的光场调控,从而简化光场调控难度,提高光场调控效率,达到从需求出发设计各类高性能光场调控器件目的。

## 参考文献

- [1] LIU L, ZHANG X, KENNEY M, et al. Broadband metasurfaces with simultaneous control of phase and amplitude[J]. *Advanced Materials*, 2014, 26(29): 5031-5036.
- [2] ARBABI A, HORIE Y, BAGHERI M, et al. Dielectric metasurfaces for complete control of phase and polarization with subwavelength spatial resolution and high transmission[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(11): 937-943.
- [3] WEI Q, SAIN B, WANG Y, et al. Simultaneous spectral and spatial modulation for color printing and holography using all-dielectric metasurfaces[J]. *Nano Letters*, 2019, 19(12): 8964-8971.
- [4] DAI W, WANG Y, LI R, et al. Achieving circularly polarized surface emitting perovskite microlasers with all-dielectric metasurfaces[J]. *ACS Nano*, 2020, 14(12): 17063-17070.
- [5] KAPLAN A F, XU T, GUO L J. High efficiency resonance-based spectrum filters with tunable transmission bandwidth fabricated using nanoimprint lithography[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 99(14): 143111.
- [6] SONG Q, BARONI A, WU P C, et al. Broadband decoupling of intensity and polarization with vectorial Fourier metasurfaces[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 3631.
- [7] YU P, LI J, TANG C, et al. Controllable optical activity with non-chiral plasmonic metasurfaces[J]. *Light: Science & Applications*, 2016, 5(7): e16096.
- [8] UNNI R, YAO K, ZHENG Y. Deep convolutional mixture density network for inverse design of layered photonic structures[J]. *ACS Photonics*, 2020, 7(10): 2703-2712.
- [9] KAVEH A, SHAHROUZI M. Simultaneous topology and size optimization of structures by genetic algorithm using minimal length chromosome[J]. *Engineering Computations*, 2006, 23(6): 644-674.
- [10] CHAO L, KIM I Y, JESWIET J. Conceptual and detailed design of an automotive engine cradle by using topology, shape, and size optimization[J]. *Structural & Multidisciplinary Optimization*, 2014, 51(2): 547-564.
- [11] PAGANINI A, SARGHEINI S, HIPTMAIR R, et al. Shape optimization of microlenses[J]. *Optics Express*, 2015, 23(10): 13099-13107.
- [12] ALLAIRE G, BONNETIER E, FRANCFORT G, et al. Shape optimization by the homogenization method [J]. *Numerische Mathematik*, 2002, 76(1): 27-68.

- [13] CHUN J S, KIM M K. Shape optimization of electromagnetic devices using immune algorithm[J]. IEEE Transactions on Magnetics, 1997, 33(2): 1876-1879.
- [14] LIN Z, LIU V, PESTOURIE R, et al. Topology optimization of freeform large-area metasurfaces[J]. Optics Express, 2019, 27(11): 15765-15775.
- [15] WANG Q, CHUMAK A V, PIRRO P. Inverse-design magnonic devices[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 2636.
- [16] JENSEN J S, SIGMUND O. Topology optimization for nano-photonics[J]. Laser & Photonics Reviews, 2011, 5(2): 308-321.
- [17] PIGGOTT A Y, LU J, LAGOUDAKIS K G, et al. Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer[J]. Nature Photonics, 2015, 9(6): 374-377.
- [18] YAMAZOE K, MOCHI I, GOLDBERG K A. Gradient descent algorithm applied to wavefront retrieval from through-focus images by an extreme ultraviolet microscope with partially coherent source[J]. Journal of the Optical Society of America A, Optics, Image Science, and Vision, 2014, 31(12): B34-43.
- [19] LIU Z, ZHU D, LEE K T, et al. Compounding meta-atoms into metamolecules with hybrid artificial intelligence techniques[J]. Advanced Materials, 2020, 32(6): e1904790.
- [20] BOREL P I, HARPØTHA H, FRANDSEN L H, et al. Topology optimization and fabrication of photonic crystal structures[J]. Optics Express, 2004, 12(9): 1996-2001.
- [21] MATZEN R, JENSEN J S, SIGMUND O. Topology optimization for transient response of photonic crystal structures[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2010, 27(10): 2040-2050.
- [22] FAN L, MEI J. Acoustic metagrating circulators: nonreciprocal, robust, and tunable manipulation with unitary efficiency[J]. Physical Review Applied, 2021, 15(6): 064002.
- [23] SELL D, YANG J, WANG E W, et al. Ultra-high-efficiency anomalous refraction with dielectric metasurfaces[J]. ACS Photonics, 2018, 5(6): 2402-2407.
- [24] PHAN T, SELL D, WANG E W, et al. High-efficiency, large-area, topology-optimized metasurfaces[J]. Light: Science & Applications, 2019, 8(1): 48.
- [25] LIANG H, LIN Q, XIE X, et al. Ultrahigh numerical aperture metalens at visible wavelengths[J]. Nano Letters, 2018, 18(7): 4460-4466.
- [26] MALKIEL I, MREJEN M, NAGLER A, et al. Plasmonic nanostructure design and characterization via deep learning[J]. Light: Science & Applications, 2018, 7(1): 60.
- [27] LIU J, ZHANG D, YU D, et al. Machine learning powered ellipsometry[J]. Light: Science & Applications, 2021, 10(1): 55.
- [28] ZHELJEZNYAKOV M V, BRUNTON S, MAJUMDAR. A deep learning to accelerate scatterer-to-field mapping for inverse design of dielectric metasurfaces[J]. ACS Photonics, 2021, 8(2): 481-488.
- [29] QIAN C, ZHENG B, SHEN Y, et al. Deep-learning-enabled self-adaptive microwave cloak without human intervention[J]. Nature Photonics, 2020, 14(6): 383-390.
- [30] WU C, YU H, LEE S, et al. Programmable phase-change metasurfaces on waveguides for multimode photonic convolutional neural network[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 96.
- [31] LIU C, ZHANG Q, CUI T J. Deep learning of reflection phase prediction for arbitrary coding metasurface atoms[C]. 2019 IEEE International Conference on Computational Electromagnetics (ICCEM), 2019.
- [32] SHAN T, PAN X, LI M, et al. Coding programmable metasurfaces based on deep learning techniques[J]. IEEE Journal on Emerging and Selected Topics in Circuits and Systems, 2020, 10(1): 114-125.
- [33] XU S, ZOU X, MA B, et al. Deep-learning-powered photonic analog-to-digital conversion[J]. Light: Science & Applications, 2019, 8(1): 66.
- [34] LIN C H, CHEN Y S, LIN J T, et al. Automatic inverse design of high-performance beam-steering metasurfaces via genetic-type tree optimization[J]. Nano Letters, 2021, 21(12): 4981-4989.
- [35] ZHOU M, LIU D, BELLING S W, et al. Inverse design of metasurfaces based on coupled-mode theory and adjoint optimization[J]. ACS Photonics, 2021, 8(8): 2265-2273.
- [36] MANSOUREE M, MCCLUNG A, SAMUDRALA S, et al. Large-scale parametrized metasurface design using adjoint optimization[J]. ACS Photonics, 2021, 8(2): 455-463.
- [37] SU L, TRIVEDI R, SAPRA N V, et al. Fully-automated optimization of grating couplers[J]. Optics Express, 2018, 26(4): 4023-4034.
- [38] FEICHTNER T, SELIG O, KIUNKE M, et al. Evolutionary optimization of optical antennas[J]. Physical Review Letters, 2012, 109(12): 127701.
- [39] LIU C, MAIER S A, LI G. Genetic-algorithm-aided meta-atom multiplication for improved absorption and coloration in nanophotonics[J]. ACS Photonics, 2020, 7(7): 1716-1722.

- [40] SIGMUND O, CHIGRIN D N. Topology optimization in nano-photonics[C]. AIP Conference Proceedings, 2009.
- [41] SELL D, YANG J, DOSHAY S, et al. Large-angle, multifunctional metagratings based on freeform multimode geometries[J]. Nano Letters, 2017, 17(6): 3752-3757.
- [42] ROY R, SEVICK-MURACA E. Truncated Newton's optimization scheme for absorption and fluorescence optical tomography: Part I theory and formulation[J]. Optics Express, 1999, 4(10): 353-371.
- [43] SVANBERG K. The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1987, 24(2): 359-373.
- [44] LIU Z, LIU X, XIAO Z, et al. Integrated nanophotonic wavelength router based on an intelligent algorithm[J]. Optica, 2019, 6(10): 1367-1373.
- [45] FENG Q, YANG F, XU X, et al. Multi-objective optimization genetic algorithm for multi-point light focusing in wavefront shaping[J]. Optics Express, 2019, 27(25): 36459-36473.
- [46] FUJII G, AKIMOTO Y, TAKAHASHI M. Exploring optimal topology of thermal cloaks by CMA-ES[J]. Applied Physics Letters, 2018, 112(6): 061108.
- [47] JIN Z, MEI S, CHEN S, et al. Complex inverse design of meta-optics by segmented hierarchical evolutionary algorithm [J]. ACS Nano, 2019, 13(1): 821-829.
- [48] WANG D, TAN D, LIU L. Particle swarm optimization algorithm: an overview[J]. Soft Computing, 2017, 22(2): 387-408.
- [49] YOON J W, LEE K J, WU W, et al. Wideband omnidirectional polarization-insensitive light absorbers made with 1D silicon gratings[J]. Advanced Optical Materials, 2014, 2(12): 1206-1212.
- [50] van DIJK L, van de GROEP J, VELDHUIZEN L W, et al. Plasmonic scattering back reflector for light trapping in flat nano-crystalline silicon solar cells[J]. ACS Photonics, 2016, 3(4): 685-691.
- [51] REN H, SHAO W, LI Y, et al. Three-dimensional vectorial holography based on machine learning inverse design[J]. Science Advances, 2020, 6(16): eaaz4261.
- [52] ZHENG B, SUN R, TIAN X, et al. S-Net: A scalable convolutional neural network for JPEG compression artifact reduction[J]. Journal of Electronic Imaging, 2018, 27(4): 043037.
- [53] HE K M, ZHANG X Y, REN S Q, et al. Deep residual learning for image recognition[J]. 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (Cvpr), 2016: 770-778.
- [54] XIE S N, GIRSHICK R, DOLLAR P, et al. Aggregated residual transformations for deep neural networks[C]. 30th IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (Cvpr 2017), 2017: 5987-5995.
- [55] WU Y, RIVENSON Y, ZHANG Y, et al. Extended depth-of-field in holographic imaging using deep-learning-based autofocusing and phase recovery[J]. Optica, 2018, 5(6): 704-710.
- [56] WANG F, BIAN Y, WANG H, et al. Phase imaging with an untrained neural network [J]. Light: Science & Applications, 2020, 9(1): 77.
- [57] WEN F, JIANG J, FAN J. A robust freeform metasurface design based on progressively growing generative networks[J]. ACS Photonics, 2020, 7(8): 2098-2104.
- [58] LIU D, TAN Y, KHORAM E, et al. Training deep neural networks for the inverse design of nanophotonic structures[J]. ACS Photonics, 2018, 5(4): 1365-1369.
- [59] ZHANG T, WANG J, LIU Q, et al. Efficient spectrum prediction and inverse design for plasmonic waveguide systems based on artificial neural networks[J]. Photonics Research, 2019, 7(3): 368-380.
- [60] LIU Z, ZHU D, RODRIGUES S P, et al. Generative model for the inverse design of metasurfaces[J]. Nano Letters, 2018, 18(10): 6570-6576.
- [61] ZHU D, LIU Z, RAJU L, et al. Building multifunctional metasystems via algorithmic construction [J]. ACS Nano, 2021, 15(2): 2318-2326.
- [62] WEISS K, KHOSHGOFTAAR T M, WANG D D. A survey of transfer learning[J]. Journal of Big Data, 2016, 3(1): 1-40.
- [63] SHIN H C, ROTH H R, GAO M, et al. Deep convolutional neural networks for computer-aided detection: cnn architectures, dataset characteristics and transfer learning [J]. IEEE Transactions on Medical Imaging, 2016, 35(5): 1285-1298.
- [64] 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(1): 2974.
- [65] SZEGEDY C, VANHOUCHE V, IOFFE S, et al. Rethinking the inception architecture for computer vision[J]. 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2016: 2818-2826.
- [66] JIANG J, FAN J A. Global optimization of dielectric metasurfaces using a physics-driven neural network [J]. Nano Letters, 2019, 19(8): 5366-5372.
- [67] YANG B, LIU W, LI Z, et al. Ultrahighly saturated structural colors enhanced by multipolar-modulated metasurfaces

- [J]. *Nano Letters*, 2019, 19(7): 4221-4228.
- [68] LIU X, HUANG Z, ZANG J. All-dielectric silicon nanoring metasurface for full-color printing[J]. *Nano Letters*, 2020, 20(12): 8739-8744.
- [69] SUN S, ZHOU Z, ZHANG C, et al. All-dielectric full-color printing with TiO<sub>2</sub> metasurfaces[J]. *ACS Nano*, 2017, 11(5): 4445-4452.
- [70] GUO W, LIU Y, HAN T. Ultra-broadband infrared metasurface absorber[J]. *Optics Express*, 2016, 24(18): 20586-20592.
- [71] LÄNK N O, VERRE V, JOHANSSON P, et al. Large-scale silicon nanophotonic metasurfaces with polarization independent near-perfect absorption[J]. *Nano Letters*, 2017, 17(5): 3054-3060.
- [72] LI Y, LIN J, GUO H, et al. A tunable metasurface with switchable functionalities: from perfect transparency to perfect absorption[J]. *Advanced Optical Materials*, 2020, 8(6): 1901548.
- [73] LI Z, STAN L, CZAPLEWSKI D A, et al. Broadband infrared binary-pattern metasurface absorbers with micro-genetic algorithm optimization[J]. *Optics Letters*, 2019, 44(1): 114-117.
- [74] MA W, CHENG F, LIU Y. Deep-learning-enabled on-demand design of chiral metamaterials[J]. *ACS Nano*, 2018, 12(6): 6326-6334.
- [75] GAO L, LI X, LIU D, et al. A bidirectional deep neural network for accurate silicon color design [J]. *Advanced Materials*, 2019, 31(51): e1905467.
- [76] DAI P, WANG Y, HU Y, et al. Accurate inverse design of Fabry - Perot-cavity-based color filters far beyond sRGB via a bidirectional artificial neural network[J]. *Photonics Research*, 2021, 9(5): B236-B246.
- [77] YEUNG C, TSAI R, PHAM B, et al. Global inverse design across multiple photonic structure classes using generative deep learning[J]. *Advanced Optical Materials*, 2021, 9(20): 2170079.
- [78] SO S, YANG Y, LEE T, et al. On-demand design of spectrally sensitive multiband absorbers using an artificial neural network[J]. *Photonics Research*, 2021, 9(4): B153-B158.
- [79] GUO Q, SHI Z, HUANG Y W, et al. Compact single-shot metalens depth sensors inspired by eyes of jumping spiders [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2019, 116(46): 22959-22965.
- [80] MARTINS A, LI K, LI J, et al. On metalenses with arbitrarily wide field of view [J]. *ACS Photonics*, 2020, 7(8): 2073-2079.
- [81] REN H, FANG X, JANG J, et al. Complex-amplitude metasurface-based orbital angular momentum holography in momentum space[J]. *Nature Nanotechnology*, 2020, 15(11): 948-955.
- [82] GUO X, ZHONG J, LI B, et al. Full-color holographic display and encryption with full-polarization degree of freedom [J]. *Advanced Materials*, 2021: e2103192.
- [83] BAO Y, NI J, QIU C W. A minimalist single-layer metasurface for arbitrary and full control of vector vortex beams[J]. *Advanced Materials*, 2020, 32(6): e1905659.
- [84] LIN Z, GROEVER B, CAPASSO F, et al. Topology-optimized multilayered metaoptics [J]. *Physical Review Applied*, 2018, 9(4): 044030.
- [85] XU D, LUO Y, LUO J, et al. Efficient design of a dielectric metasurface with transfer learning and genetic algorithm[J]. *Optical Materials Express*, 2021, 11(7): 1852-1862.
- [86] ZHANG Q, LIU C, WAN X, et al. Machine-learning designs of anisotropic digital coding metasurfaces [J]. *Advanced Theory and Simulations*, 2018, 2(2): 1800132.
- [87] ARBORE M A, GALVANAUSKAS A, HARTER D, et al. Engineerable compression of ultrashort pulses by use of second-harmonic generation in chirped-period-poled lithium niobate[J]. *Optics Letters*, 1997, 22(17): 1341-1343.
- [88] HEINZ T F, CHEN C K, RICARD D, et al. Spectroscopy of molecular monolayers by resonant second-harmonic generation[J]. *Physical Review Letters*, 1982, 48(7): 478-481.
- [89] ZASKE S, LENHARD A, KESSLER C A, et al. Visible-to-telecom quantum frequency conversion of light from a single quantum emitter[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 109(14): 147404.
- [90] MA Menglin, LI Zhi, LIU Wenwei, et al. Optical information multiplexing with nonlinear coding metasurfaces[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2019, 13(7): 1900045.
- [91] LI Z, LIU W, GENG G, et al. Multiplexed nondiffracting nonlinear metasurfaces [J]. *Advanced Functional Materials*, 2020, 30(23): 1910744.
- [92] OU Z Y, KIMBLE H J. Enhanced conversion efficiency for harmonic generation with double resonance [J]. *Optics Letters*, 1993, 18(13): 1053.
- [93] MANDEL P, TLIDI M. Transverse dynamics in cavity nonlinear optics (2000 - 2003)[J]. *Journal of Optics B Quantum & Semiclassical Optics*, 2004, 6(9): R60.
- [94] TURITSYN S K, BEDNYAKOVA A E, FEDORUK M P, et al. Modeling of CW Yb-doped fiber lasers with highly nonlinear cavity dynamics[J]. *Optics Express*, 2011, 19(9): 8394-8405.

- [95] FURST J, STREKALOV D, ELSER D, et al. Naturally phase matched second harmonic generation in a whispering gallery mode resonator[C]. CLEO/QELS: 2010 Laser Science to Photonic Applications, 2010.
- [96] BI Z F, RODRIGUEZ A W, HASHEMI H, et al. High-efficiency second-harmonic generation in doubly-resonant  $\chi^{(2)}$  microring resonators[J]. Optics Express, 2012, 20(7): 7526.
- [97] KHURGIN, JACOB B. How to deal with the loss in plasmonics and metamaterials[J]. Nature Nanotechnology, 2015, 10(1): 2-6.
- [98] LIN Z, LIANG X, LONCAR M, et al. Cavity-enhanced second-harmonic generation via nonlinear-overlap optimization [J]. Optica, 2016, 3(3): 233-238.
- [99] LIN Z, LONCAR M, RODRIGUEZ A W. Topology optimization of multi-track ring resonators and 2D microcavities for nonlinear frequency conversion[J]. Optics Letters, 2017, 42(14): 2818-2821.
- [100] SITAWARIN C, JIN W, LIN Z, et al. Inverse-designed photonic fibers and metasurfaces for nonlinear frequency conversion[J]. Photonics Research, 2018, 6(5): B82-B86.
- [101] HUGHES T W, MINKOV M, WILLIAMSON I A D, et al. Adjoint method and inverse design for nonlinear nanophotonic devices[J]. ACS Photonics, 2018, 5(12): 4781-4787.
- [102] BLECHMAN Y, ALMEIDA E, SAIN B, et al. Optimizing the nonlinear optical response of plasmonic metasurfaces [J]. Nano Letters, 2019, 19(1): 261-268.
- [103] FAN W, CHEN T, GIL E, et al. Second harmonic imaging enhanced by deep learning decipher[J]. ACS Photonics, 2021, 8(6): 1562-1568.
- [104] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [J]. Journal of Computational Physics, 2019, 378: 686-707.

## Inverse Design Methods and Applications of Photonics Devices (Invited)

MA Dina<sup>1</sup>, CHENG Hua<sup>1</sup>, TIAN Jianguo<sup>1</sup>, CHEN Shuqi<sup>1,2,3</sup>

(1 *The Key Laboratory of Weak Light Nonlinear Photonics, Ministry of Education, Renewable Energy Conversion and Storage Center, School of Physics, TEDA Institute of Applied Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

(2 *Collaborative Innovation Center of Extreme Optics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)

(3 *Collaborative Innovation Center of Light Manipulations and Applications, Shandong Normal University, Jinan 250358, China*)

**Abstract:** In the past three decades, artificial photonics devices have made remarkable achievements in the fields of super-resolution, biosensing and optical communication. The designs of traditional photonics devices are usually realized by analyzing physical models and establishing numerical simulation methods. However, the structural design based on the numerical simulation method largely depends on the empirical model, and a large number of parameter combinations need to be calculated in the process of structural optimization, so it can only get suboptimal results in a limited parameter space. With the continuous improvement of computer computing capability and the enrichment of computer algorithms, the inverse design of photonics devices can effectively solve the above obstacles. The inverse design method can not only find the optimal structure distribution in a broader parameter space, but also design irregular structures that cannot be directly designed by human brain, which makes the performance of inverse designed photonics devices closer to the limit. This review first introduces the three common methods of photonic device inverse design and then introduces several important applications based on inverse design methods in detail. Common inverse design methods can be divided into gradient descent algorithm and genetic algorithm. Gradient descent algorithm uses gradient information to guide the optimization of structure. Topology optimization is a commonly used algorithm in gradient descent algorithm, which can optimize the material distribution in a given design area according to the given objective function and constraint function. The gradient of objective function in topology optimization is usually calculated by adjoint method. Genetic algorithm looks for the global optimal value by simulating the evolution process of “survival of the fittest”. The algorithm has four main steps: initial population guess, crossover, mutation and selection. By iterating the above four steps for a certain number of times, the whole population can evolve in the desired direction.

The deep learning model can effectively extract features from a large amount of data and has been proved to characterize the physical relationship between photonic structures and their optical properties. The trained deep learning model can replace the electromagnetic simulation process and greatly reduce the design time of photonics devices. Based on the above characteristics, these algorithms have been successfully used in the design of photonic crystal, metagrating, metasurface and other optical devices. However, inverse design methods are not omnipotent. They have different limitations. For example, gradient descent method usually converges to the local optimal value, so it needs a better initial starting point. Genetic algorithm has a large amount of calculation and is sensitive to parameter setting. Deep learning needs data sets, and the performance of the network is affected by super parameter setting. Therefore, when selecting the inverse design method, it is necessary to evaluate the calculation time and optimization dimension of the physical model. Intelligent algorithm combines nano photonics with computational science, and provides researchers with an efficient new design method. In the future, the difficulty of optical field manipulation can be simplified by intelligent inverse design methods, so as to achieve the purpose of designing high-performance optical devices from the demand.

**Key words:** Gradient descent algorithm; Genetic algorithm; Deep learning; Topology optimization; Phase design

**OCIS Codes:** 230.1150; 230.3240; 230.3990; 230.7370