

密级： 保密期限：

北京邮电大学

硕士学位论文



题目： 基于机器学习的等离激元器件
设计及优化研究

学 号： 2017111593

姓 名： 刘琦

专 业： 电子科学与技术

导 师： 尹飞飞

学 院： 光电信息学院

(信息光子学与光通信研究院)

2020 年 6 月 10 日

DESIGN AND OPTIMIZATION OF PLASMONIC DEVICES BASED ON MACHINE LEARNING

A thesis submitted to
Beijing University of Posts and Telecommunications
in partial fulfillment of the requirements
for the degree of
Master of Electronics Science and Technology

By

Qi Liu

Supervisor: Feifei Yin

Title: Associate Professor

June 10th 2020

独创性（或创新性）声明

本人声明所呈交的论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢中所罗列的内容以外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京邮电大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

本人签名：_____刘琦_____ 日期：_____2020年6月10日_____

关于论文使用授权的说明

本人完全了解并同意北京邮电大学有关保留、使用学位论文的规定，即：北京邮电大学拥有以下关于学位论文的无偿使用权，具体包括：学校有权保留并向国家有关部门或机构送交学位论文，有权允许学位论文被查阅和借阅；学校可以公布学位论文的全部或部分内容，有权允许采用影印、缩印或其它复制手段保存、汇编学位论文，将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索。（保密的学位论文在解密后遵守此规定）

保密论文注释：本学位论文属于保密在____年解密后适用本授权书。

非保密论文注释：本学位论文不属于保密范围，适用本授权书。

本人签名：_____刘琦_____ 日期：_____2020年6月10日_____

导师签名：_____ 日期：_____

基于机器学习的等离激元器件设计及优化研究

摘 要

石墨烯作为一种新型二维材料,可以以低传播损耗和高约束力的优势来支持表面等离激元 (Surface Plasmons Polaritons, SPP) 的激发和传播。基于石墨烯的独特性质和 SPP 的光学特性,各种纳米结构设计层出不穷。由石墨烯纳米条 (Graphene NanoRibbons, GNRs) 构成的石墨烯超材料 (Graphene Metamaterial, GM) 因其相对简单的工艺流程备受关注。近年来,针对光子器件的设计,通常利用人工神经网络 (Artificial Neural Networks, ANN) 来替代传统的数值仿真方法从而大幅度降低设计时间,然而与一些传统的机器学习方法相比,ANN 在准确率和效率方面的优势并不明显。除此之外,在光子学结构的性能优化问题中,通常只针对单个目标进行优化,多目标优化算法应用很少。因此,在 GM 结构的设计和优化研究中,还缺乏一个全面且快速的解决方案。

针对以上问题,论文的具体研究工作包括以下几个方面:

一、提出一种由 GNRs 构成的新型 GM 结构,当平面光垂直入射时,可在石墨烯表面激发 SPP 模式。基于模式耦合作用,可在透射谱中形成等离激元诱导透明 (Plasmon Induced Transparency, PIT) 效应。通过调节结构参数可实现对 PIT 的动态调谐。该结构可用于构建光学滤波器、光开关和慢光器件等。

二、针对所提出的 GM 结构,利用多种机器学习算法提出一种正向透射谱预测和逆向设计方案。结果表明,无论是正向透射谱预测还是逆向设计,所有算法的预测准确率都在 91% 以上,算法处理时间均在 37 秒以内。其中,随机森林算法在保证预测准确率达到 96% 的同时,将算法处理时间控制在 7 秒以内,相比研究热点 ANN 来说在预测准确率和效率方面更具优势。

三、提出一种利用演进类算法对 GM 结构的透射谱进行单、多目标优化的方案。在单目标优化中,遗传算法、量子遗传算法和粒子群算法在经过多次迭代后,所优化的透射谱与目标透射谱的误差分别降为 0.12、0.09 和 0.13,实现了透射谱的整体优化。在多目标优化中,利用非支配排序遗传算法-II 对透射谱中 PIT 效应的峰-谷差进行优化。经过多次迭代,针对单透明度窗口 (双透明度窗口),透射谱的峰-谷

差可达到 0.86 和 0.97 (0.87、0.83、0.79 和 0.69)，有效地提高了透射谱的陡峭程度，该结果可广泛用于构建高性能光开关、折射率传感器及慢光器件。

关键词 石墨烯超材料 透射谱预测 机器学习 透射谱优化 演进类算法

DESIGN AND OPTIMIZATION OF PLASMONIC DEVICES BASED ON MACHINE LEARNING

ABSTRACT

As a new two-dimensional material, graphene can support the excitation and propagation of the surface plasmons polaritons (SPP) with the advantages of low propagation loss and high binding force. Based on the unique properties of graphene and the optical properties of SPP, various nanostructure designs have emerged continuously. Graphene metamaterial (GM), which is composed of graphene nanoribbons (GNRs), has attracted much attention because of its relatively simple process flow. In recent years, for the inverse design of photonic devices, artificial neural networks (ANN) are often used to replace the traditional numerical simulation method, thereby greatly reducing the design time. However, compared with some traditional machine learning methods, ANN's advantages are not obvious in accuracy and efficiency in the design of some simple photonic devices. In addition, in the performance optimization of photonic structures, only a single target is usually optimized, and multi-objective optimization algorithms are rarely used. Therefore, there is still a lack of a comprehensive and fast solution in the design and performance optimization research of GM structure.

In response to the above problems, the specific work of this thesis mainly include the following aspects:

1. A new GM structure composed of double-layer GNRs is proposed. When light is incident vertically, it can excite SPP mode on the graphene surface. Based on the mutual coupling of modes in the structure, the plasmon induced transparency (PIT) can be formed in the transmission spectrum. By adjusting the chemical potential of graphene, PIT can be dynamically tuned. Based on the above properties, this structure can be

used to build high-performance photonic devices, such as optical filters, optical switches, slow-light devices, and so on.

2. For the proposed GM structure, a forward transmission spectrum prediction and inverse design scheme is proposed by using a variety of machine learning algorithms. The results prove that, whether forward transmission spectrum prediction or inverse design, the prediction accuracy of all algorithms is above 91%, and the consumption time of training and prediction is shorter than 37 seconds. Among these algorithms, the random forest ensures that the prediction accuracy reaches 96%, and the algorithm processing time is shorter than 7 seconds, which is more advantageous in terms of prediction accuracy and efficiency than ANN. The above results indicate that for some simple photonic devices, traditional machine learning is better than the current research hotspot ANN in some performance aspects.

3. Evolutionary optimization algorithms are used to optimize the transmission spectrum of the GM structure for single and multi-objective optimization to obtain better performance indicators. As for single-objective optimization, after multiple iterations of genetic algorithm, quantum genetic algorithm and particle swarm algorithm, the loss between the optimized transmission spectrum and the target transmission spectrum drops to 0.12, 0.09 and 0.13, respectively, which achieves the overall optimization of the transmission spectrum. As for multi-objective optimization, the non-dominated sorting genetic algorithm-II is used to optimize the peak-valley difference of PIT in the transmission spectrum. After a lot of iterations, for a single transparency window (dual transparency window), the difference between transmission peaks and valleys increase to 0.86 and 0.97 (0.87, 0.83, 0.79 and 0.69), respectively, effectively improves the steepness of the transmission spectrum. The results can be widely used in high-performance optical switches, refractive index sensors and slow-light devices.

KEY WORDS: graphene metamaterial, transmission spectrum prediction, machine learning, transmission spectrum optimization, evolutionary algorithm

目 录

| | |
|--------------------------------------|-----|
| 摘 要 | I |
| ABSTRACT..... | III |
| 缩略词对照表 | VII |
| 第一章 绪论 | 1 |
| 1.1 论文研究背景..... | 1 |
| 1.2 国内外研究现状..... | 3 |
| 1.2.1 GM 结构的研究现状 | 3 |
| 1.2.2 机器学习方法及优化算法在光子器件设计中的应用现状 | 5 |
| 1.3 论文的内容安排..... | 8 |
| 第二章 GM 结构的理论基础及设计方法 | 10 |
| 2.1 GM 结构及其物理性质分析 | 10 |
| 2.1.1 石墨烯结构简介 | 10 |
| 2.1.2 石墨烯的光电特性..... | 10 |
| 2.1.3 GM 结构的物理性质 | 12 |
| 2.2 仿真工具选择..... | 14 |
| 2.3 辅助设计及优化方法..... | 14 |
| 2.3.1 机器学习算法介绍..... | 14 |
| 2.3.2 演进类算法介绍..... | 16 |
| 2.4 本章小结..... | 22 |
| 第三章 GM 结构的设计仿真及机器学习在其中的应用 | 23 |
| 3.1 GM 结构的设计及仿真 | 23 |
| 3.1.1 GM 结构的介绍及仿真 | 23 |
| 3.1.2 GM 结构的透射谱及 PIT 效应 | 25 |
| 3.1.3 GM 结构参数对透射谱的影响分析..... | 27 |
| 3.2 利用机器学习对 GM 结构透射谱预测的思路及数据准备..... | 28 |
| 3.3 利用机器学习对 GM 结构透射谱的正向预测..... | 29 |
| 3.4 利用机器学习对 GM 结构的逆向设计 | 33 |
| 3.5 本章小结..... | 35 |
| 第四章 基于演进类算法的优化研究 | 36 |
| 4.1 利用演进类算法对 GM 结构透射谱的单目标优化..... | 36 |
| 4.1.1 利用 GA 对 GM 结构透射谱的优化..... | 36 |

| | |
|--------------------------------------|-----------|
| 4.1.2 利用 QGA 对 GM 结构透射谱的优化..... | 40 |
| 4.1.3 利用 PSO 对 GM 结构透射谱的优化..... | 44 |
| 4.1.4 单目标优化算法总结与对比..... | 46 |
| 4.2 利用 NSGA-II 对 GM 结构透射谱的多目标优化..... | 47 |
| 4.3 本章小结..... | 50 |
| 第五章 总结 | 51 |
| 参考文献 | 53 |
| 致谢 | 61 |
| 攻读学位期间取得的研究成果 | 62 |

缩略词对照表

| | | |
|---------|--|--------------|
| SPP | Surface Plasmons Polaritons | 表面等离激元 |
| GM | Graphene Metamaterial | 石墨烯超材料 |
| GNRs | Graphene NanoRibbons | 石墨烯纳米条 |
| FDTD | Finite Difference Time Domain | 时域有限差分 |
| ANN | Artificial Neural Networks | 人工神经网络 |
| RF | Random Forest | 随机森林 |
| PIT | Plasmon Induced Transparency | 等离激元诱导透明 |
| GA | Genetic Algorithm | 遗传算法 |
| PSO | Particle Swarm Optimization | 粒子群优化 |
| QGA | Quantum Genetic Algorithm | 量子遗传算法 |
| NSGA-II | Non-dominated Sorting Genetic Algorithm-II | 非支配排序遗传算法-II |
| KNN | K-Nearest Neighbor | K 最近邻 |
| DT | Decision Tree | 决策树 |
| ET | Extra Tree | 极限树 |
| GRA | Graphene Ribbon Array | 石墨烯带阵列 |
| EIT | Electromagnetic Induced Transparency | 电磁诱导透明 |

第一章 绪论

1.1 论文研究背景

21 世纪以来,随着社会经济的快速发展,信息传递已经不仅仅满足于通信、联络和娱乐等基础需求,5G、人工智能和大数据等高新技术迅速涌现,信息传递的速率、容量以及准确性的要求日益提高。呈指数式爆炸型增长的信息传输容量已经走向太比特每秒,传统的以电子为载体的信息传递技术由于受到 RC 延迟这一物理效应的影响,在传输速率上无法达到纳秒级别。与电子相比,光子作为信息载体具有很多优势,包括抗电磁干扰强和传输损耗小等,因此其作为信息传递的新型载体而受到了广泛关注。但是,光子由于其固有的衍射极限大大阻碍了它的发展。光学衍射极限使得光子学器件的尺寸很难突破纳米量级,导致在光电集成电路中,纳米级别的电学器件与微米级别的光学器件难以匹配,大大制约了光电集成领域的发展。为了突破衍射极限,研究者们积极寻找各种方法以使光电集成乃至全光路集成在纳米级别的范围内成为可能^[1]。因此,突破光的衍射极限,在纳米量级实现对光的调节与控制,并研制出纳米量级的光耦合器和光调制器等,成为了光电信息领域的研究目标。

表面等离激元 (Surface Plasmons Polaritons, SPP) 是金属中的自由电子和介质中的电磁场耦合震荡形成的沿金属表面传播的电磁波^[2-3], 具有选择性光散射和吸收以及局域电场增强、电场强束缚、可远程传播等特点, 在物理、化学、材料、生物科学等领域具有广泛的应用, 其中包括局域等离子共振传感器、等离激元激光、SPP 光开关以及光逻辑运算器等^[4-8]。同时, 由于 SPP 限域于金属纳米结构的表面, 因此可以突破光的衍射极限, 这一特点使得 SPP 在超分辨成像技术和高集成光信息处理技术等方面具有独特的优势, 从而极大的促进了集成光子学的发展进程^[9]。

SPP 不仅可以在金属与介质表面激发, 也可以在石墨烯这种二维材料中激发和传播。2004 年, 科学家发现石墨烯之后, 这种典型的二维材料迅速成为了材料研究的热点。它具有出色的电学和光学效应, 包括具有高导热性^[10]、可见光范围内稳定的透明性 (2.3%)^[11]、强大的三阶光学非线性^[12]和宽频谱响应^[13]等。因此被大量应用于光学器件的设计, 例如光调制器^[14]、光电检测器^[15]、传感器^[16]、光开关^[17]、吸收体^[18]、偏振控制器^[19]、二极管^[20]和光伏设备^[21]等。特别是已有学者证明石墨烯可以以低传播损耗和高约束力的优势来支持 SPP 的激发和传播^[22-25], 基于 SPP 的石墨烯器件如雨后春笋般涌现出来。到目前为止, 基于石墨烯的独特性质和 SPP 的光学特性, 研究者们设计出了各种石墨烯纳米结构, 例如石墨

烯超材料（Graphene Metamaterial, GM）^[26-30]、石墨烯纳米条（Graphene NanoRibbons, GNRs）^[31-35]和石墨烯波导^[36-38]等结构，以构建超紧凑的等离激元滤波器^[36]、理想的吸收器^[35]和逻辑门^[38]等。在这些结构中，周期性间隔的 GNRs 由于其相对简单的制造工艺而受到了广泛关注^[39-40]。此外，为了实现陡峭的光学特性，研究者们将电磁感应透明效应与 SPP 相结合，以引入等离激元诱导透明效应（Plasmon Induced Transparency, PIT），该效应已被证明可用来构造高性能光学器件，例如滤光器、光开关和偏振不敏感传感器等^[41-45]。

一般而言，光子学器件的设计和优化依赖于反复试验或受物理学启发的理论方法。但是，随着性能指标和集成度的提高，这种方法在光子学器件的结构参数及电磁响应计算中变得十分复杂。特别是对于石墨烯纳米结构而言，其设计和优化过程会变得非常耗时且复杂。对于石墨烯纳米结构，通常考虑石墨烯的关键物理参数（例如化学势和层数）对电磁响应的影响。然而，利用 SPP 性质设计和优化石墨烯光学结构的复杂度不可忽略，特别体现在结构的选择和参数的确定上。由于复杂结构本身的传输特性难以精确计算，往往会依据经验给定部分结构参数的取值，或者利用 FDTD 方法和有限元法^[46-47]进行求解。但是，通过这些方法计算所有结构参数的电磁响应通常需要大量的计算时间。实际上，可以构建一个理论模型来描述物理现象背后的物理机制^[48]。基于理论模型，可以快速计算出不同物理参数对应的电磁响应。然而，由于难以理解其物理机理，因此通常难以构建这种用于复杂石墨烯纳米结构的理论模型。为了解决上述问题，学者们已经提出了一些基于机器学习的数据驱动方法来等效替代数值模拟甚至理论模型。近年来，随着高性能计算的发展，人工神经网络（Artificial Neural Networks, ANN）尤其是深度学习在诸如图像处理^[49]、自然语言处理^[50]、声音信号处理^[51]、时间序列处理^[52]、自动驾驶^[53]、游戏^[54]和机器人^[55]等大量应用中引起了众多学者的关注。许多研究人员试图利用 ANN 构建电磁响应关系的模型^[56-73]，一旦构建了这种以数据驱动模型，当把物理参数输入数据模型时，可以基于数据模型在很短的时间内计算出对应的电磁响应^[37]。通常情况下，基于 ANN 模型的推理时间明显小于数值模拟的计算时间。因此，基于数据驱动的数值模拟的等效替代模型可以加速光子学器件的可变性分析和性能评估。而且，已经证明这些基于数据驱动的方法有助于光子学器件的逆向设计，逆向设计的目的是寻找合适的物理参数，以产生目标电磁响应^[74]。如果可以使用机器学习方法构造电磁响应和物理参数之间的潜在关系，那么通过使用数据驱动方法也可以解决逆向设计问题。逆向设计中与模拟逼近中使用的模型相反（根据物理参数预测电磁响应），它使用的模型根据电磁响应来预测对应的物理参数。

J. Peurifoy 等人研究发现 ANN 可以用来模拟光散射并反过来确定多层纳米粒子的物理参数^[37]。他们利用 ANN 预测了纳米粒子所有物理参数的电磁响应，并通过少量模拟结果对其进行了训练。他们指出，与数值模拟相比，ANN 具有超快的预测速度，单次预测时间在 50 秒之内，相比数值仿真方法快了接近一倍。可以看出，在光子学结构的模拟逼近和逆向设计中使用机器学习方法的原理是物理参数和电磁响应之间的数据回归。研究人员开始从光子学器件和算法两个角度探讨数据回归在光子学器件的模拟逼近和逆向设计中的应用。应该注意的是，尽管 ANN 提供了一种有效的近似方法来代替数值模拟，但是它需要大量的时间来收集训练集。与传统的机器学习算法如支持向量机和随机森林（Random Forest, RF）相比，ANN 在训练效率上并不具备优势。已经证明，传统的机器学习算法在一些物理参数较少的简单结构中更为有效^[44-45]。但是，传统机器学习算法在光子学器件的仿真逼近和逆向设计中的应用还缺乏一个全面的分析报告。

除了上面提到的数据驱动方法之外，光子器件的设计还可以通过使用优化算法来解决，该算法可分为两类：基于梯度的方法和无梯度方法^[48]。作为基于梯度方法的代表方法，伴随变量法不仅可以用来设计线性光学器件，而且可以在频域中优化非线性器件^[31-32]。2018 年 T. W. Hughes 等人提出了一种新的基于伴随变量法的训练方法来计算光子神经网络的梯度^[75]。同样，目标优先优化法和梯度下降法被用于波长解复用器和计算元结构的优化^[76-77]。但是，基于梯度的方法需要其物理背景才能得出目标函数的梯度，这增加了其在实践中应用的难度。另一方面，作为无梯度法的代表算法，搜索算法（直接二进制搜索^[28]）和进化算法也被用于光子学设备的逆向设计和优化^[28-29]。最近，T. Zhang 等人使用了两种进化算法，遗传算法（Genetic Algorithm, GA）和粒子群优化（Particle Swarm Optimization, PSO）来确定光子神经网络的超参数和权重^[78]。无论是基于梯度的方法还是无梯度的方法，它们通常只针对光子学器件的单个性能指标进行优化，综合地针对多个性能指标进行优化的多目标优化方法已逐渐成为研究人员考虑的问题^[79-80]。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 GM 结构的研究现状

2004 年，石墨烯被科学家发现之后，因其出色的电学、光学和热学效应，这种典型的二维材料迅速成为了材料研究的热点。近年来，基于石墨烯和 SPP^[81-83]的特殊性质，研究者们提出了多种纳米结构，包括 GM^[84-87]、GNRs^[88-90]和石墨烯波导^[91-92]等，以构造等离子体滤波器^[15]、完美吸收体^[88]、传感器^[89]和逻辑门^[92]等。在这些结构中，由周期性间隔的 GNRs 组成的 GM 结构由于其相对简单的制造技术而受到广泛关注^[86-87]。下面，对 GM 结构的研究现状进行举例阐述。

M. A. Othman 等人在 2013 年实现了由薄介电层间隔开的堆叠石墨烯层组成的双曲线超材料^[86]。他们所提出的结构如图 1-1 所示。仿真结果表明，可以通过调整偏压改变石墨烯片的化学势来调整所提出的双曲线超材料的红外等频波矢量弥散特性，并可增强 GM 点偶极子源的功率。

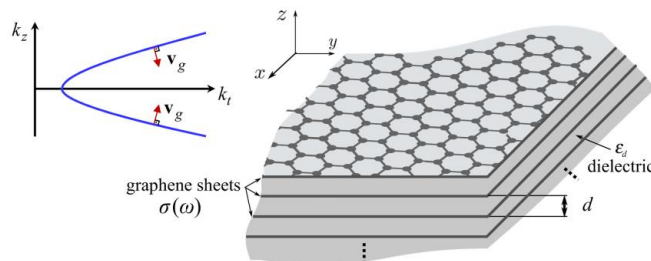


图 1-1 M. A. Othman 等人提出的多层石墨烯片超材料结构^[86]

2018 年，S. Xiao 等人将单层石墨烯集成到金属基太赫兹超材料中，并在可调费米能级条件下实现了电磁诱导透明类似物的共振强度的完全调制^[87]。他们所设计的结构如图 1-2 所示，仿真结果表明电磁诱导透明类似物的共振强度的开关调制可以通过最大为 0.8eV 的费米能级完成。他们在所提出的混合金属-石墨烯材料中，实现了电磁诱导透明类似物的主动调制，为设计超紧凑慢光器件提供了巨大的可能性，这些器件在太赫兹通信网络中起到了很大的作用。

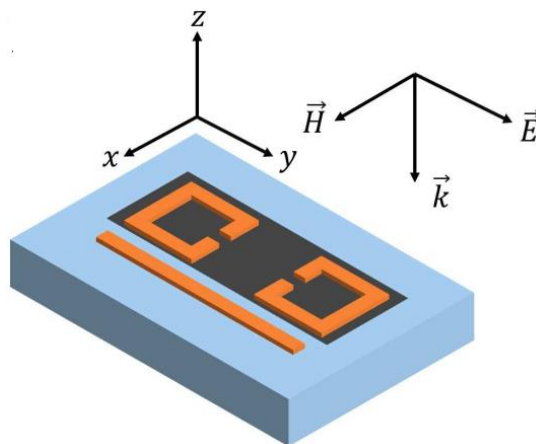
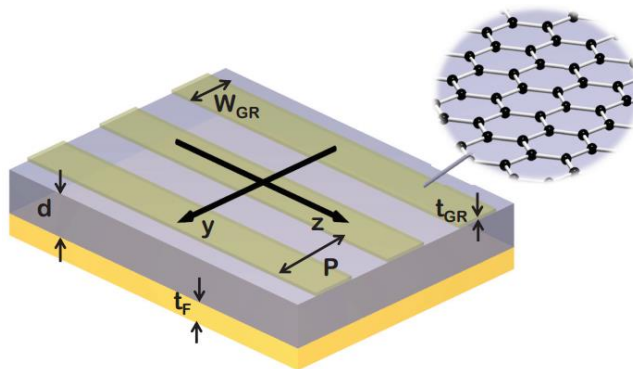


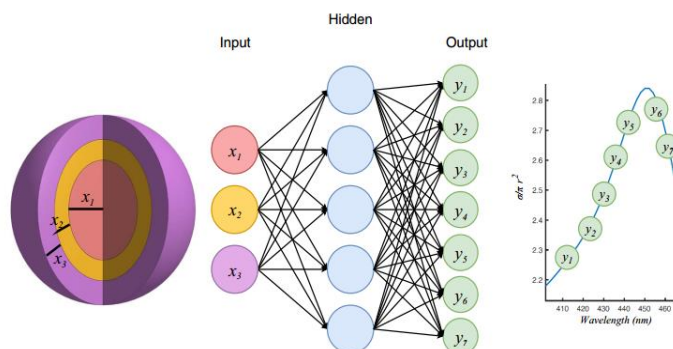
图 1-2 S. Xiao 等人提出的单层石墨烯集成超材料结构^[87]

2012 年，R. Alaei 等人展示了如何使用石墨烯薄片构成完美吸收体的过程^[88]。该结构仅由与金属基底相距适当的单分子层组成，他们通过耦合理论对其进行了分析解释。如图 1-3 所示，该结构由石墨烯带-厚介电层-金属基底组成，在 y 轴方向上周期为 $p=2\mu\text{m}$ ，z 轴方向上无限延伸。其中沉淀在金属（金）上的电介质层折射率为 2.1。此结构对不同的几何构型显示出完全吸收效应。他们基于 Fabry-Pérot 模型采用了半分析方法，很好地解释了吸收效应，为以后的光学器件设计及太赫兹互联应用提供了一条新的思路。

图 1-3 R. Alaei 等人提出的石墨烯带超材料结构^[88]

1.2.2 机器学习方法及优化算法在光子器件设计中的应用现状

机器学习是一门交叉学科，涉及概率论、统计学、凸分析、算法理论等多门学科，通过利用计算机模拟人类学习行为，不断对自身组织结构进行迭代更新和完善，从而提高对新知识的学习效率及准确性。ANN 是机器学习领域中的一种典型且有效的模型，该模型的响应机制为接受到外界刺激后，对拓扑网络的结构超参数不断进行动态调整，从而对有效的外界刺激反馈正确的输出响应。ANN 在各领域有着广泛的应用，最近，ANN 通过近似电磁响应的方法替代了传统的数值仿真模拟，已在光子学器件的正向预测、逆向设计和性能优化中得到了有效的应用^[60-63]。

图 1-4 J. Peurifoy 等人利用 ANN 模拟纳米粒子示意图^[37]

如图 1-4 所示，J. Peurifoy 等人在 2018 年提出了一种利用 ANN 近似透射谱的方法。该 ANN 结构以纳米粒子的壳厚度作为输入，输出为对应的透射谱中不同波长的截面散射值。此 ANN 通过输入大量的数据进行训练，不断拟合 ANN 中的超参数。训练好此 ANN 的意义在于其以高精度近似了纳米粒子的系统传输函数，可直接通过输入纳米粒子的物理参数由 ANN 预测得到其透射谱，从而节约了大量的仿真时间。

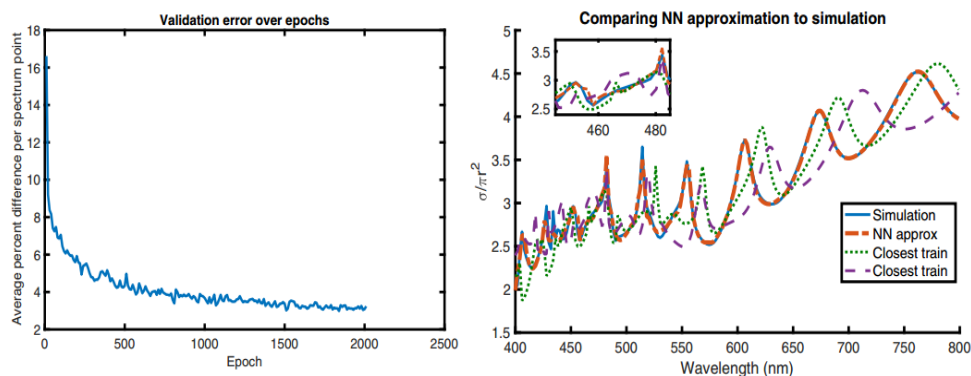


图 1-5 J. Peurifoy 等人利用 ANN 模拟纳米粒子的误差和结果^[37]

如图 1-5 所示，通过多次迭代，ANN 的预测值与纳米粒子的仿真值的误差越来越小，ANN 的预测值越来越接近纳米粒子的仿真计算值。经过 2000 次的迭代后，纳米粒子的透射谱的每点平均误差仅不到 3%。图中红色虚线（ANN 预测的透射谱）和蓝色实线（透射谱的实际仿真值）基本一致，说明利用 ANN 近似纳米粒子结构非常有效。值得注意的是训练此 ANN 只需要大约 50 秒的时间，并且准确率可以高达 95%，相比数值仿真方法，ANN 在效率上有很大的优势。

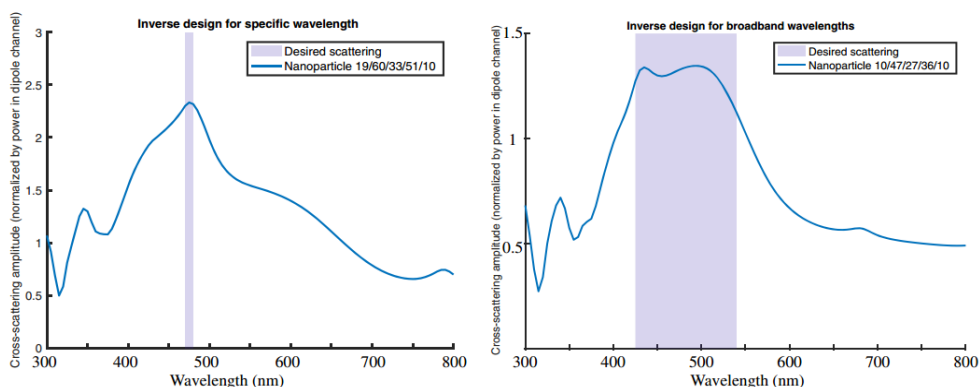


图 1-6 J. Peurifoy 等人利用 ANN 优化结构设计结果图^[37]

不仅如此，J. Peurifoy 等人还利用 ANN 对该结构的透射谱进行了逆向设计和优化。如图 1-6 所示，为了获得带宽在 450 nm 至 550 nm 范围内最宽的透射谱，他们利用 ANN 经过大量迭代后，得到了该范围内最宽透射谱所对应的纳米粒子的物理参数。所以，ANN 不仅可以用于结构透射谱的预测中，在结构参数的反向预测和透射谱的整体优化中也起到了很大的作用。

除此之外，在光子学器件方面，ANN 还被用于等离子体波导系统^[48]、金属光栅^[25]、基于 VO₂ 的纳米结构^[56]、带状波导^[57]、布拉格光栅^[57]、亚波长光栅耦合器^[58]和等离激元纳米颗粒^[59]的逆向设计和优化。在以上工作中，ANN 的成功应用表明，简单的网络体系结构足以适应少量的物理参数。在算法方面，ANN 被精心设计以适应各种光子学器件。学者们提出了许多具有不同网络架构的 ANN，

例如深度神经网络^[60-66]、自适应神经网络^[67]、双向神经网络^[41,68]和串联网路^[39]等网络结构,以设计和优化复杂的光子学器件例如超表面^[60-61]、功率分配器^[40]、SPP器件等^[62]和光子晶体^[63]等。毫无疑问,对于复杂的光子学器件,例如基于对具有随机分布的超材料进行编码的谐振器^[40],深度神经网络是一种有效的构造电磁响应与物理参数之间复杂关系的建模方法。为了减小训练集的大小并提高 ANN 的准确性,Y. Qu 等人提出使用迁移学习方法在不同的物理场景之间迁移知识^[69]。更有趣的是,作为一种无监督的学习方法,生成对抗网络已被证明可有效地生成具有广阔设计空间的高性能光子学器件^[70-73]。J. Jiang 等人发现使用具有宽参数空间的生成对抗网络可以生成拓扑结构复杂的光子学器件^[73]。除了监督学习和非监督学习外,强化学习还被用于构建系统,以解决光子学器件优化中的决策问题。I. Sajedian 等人使用了深层强化学习搜索高质量超表面的最佳材料类型和结构参数^[93]。此外,其他机器学习算法,包括降维法和贝叶斯优化等,也被用于设计光栅耦合器和波长选择散热器等^[94-95]。

虽然,ANN 提供了一种有效的逼近方法来代替数值模拟方法,但 ANN 的结构较为复杂,通常需要大量的迭代才能得到 ANN 结构的超参数,有时甚至需要利用演进类算法获得 ANN 结构的最优超参数。与简单的机器学习方法(例如支持向量机和 RF)相比,ANN 在训练时间成本上存在一定劣势。已经证明,一些简单的机器学习方法在相对简单的光子学结构的应用中更为有效,特别是对于参数较少的光子学结构的建模^[96-97]。但是对于简单的机器学习方法在石墨烯纳米结构的设计和优化中的应用,目前缺乏全面的分析和报告。

另一方面,针对光子学器件的逆向设计与优化问题,可通过两类优化算法实现,主要包括梯度方法和无梯度方法^[48]。伴随法作为梯度方法的一种典型代表,不仅可以用来设计线性光学器件^[31-32],而且可在频域中优化非线性光学器件^[33],但需要物理背景才能得到目标函数的梯度^[33]。作为无梯度方法,演进类算法(例如 GA 和 PSO^[78])和搜索算法(如二进制搜索算法^[28])在分束器^[28]、旋转器^[29]、反射器^[29]、和传感器^[29]等光子学器件的设计与优化中得到了广泛的应用。演进类算法在简单性和有效性上更具优势。无论是基于梯度方法还是无梯度方法,大多数研究通常只针对单个性能指标进行了优化,例如在特定波长下的耦合效率和透射率^[26-27]等。目前仍然缺乏能通过综合考虑多种性能指标来获得最佳结构参数的多目标优化方案。

1.3 论文的内容安排

SPP 是金属表面的自由电子与光子形成的共谐振荡, 在光子学器件设计中具有广泛应用。石墨烯可以以低传播损耗和高约束力的优势来支持 SPP 的激发和传播。到目前为止, 基于石墨烯的独特性质和 SPP 的光学特性, 研究者们设计出了各种纳米结构, 例如 GM、GNRs 和石墨烯波导等。由于利用数值仿真方法对基于 SPP 的 GM 结构仿真需要大量的时间, 而利用 ANN 进行透射谱预测和逆向设计虽然在效率上相比数值仿真方法具有很大优势, 但针对一些较为简单的光子学器件, ANN 本身结构略显复杂。论文提出将机器学习方法包括 ANN 和 RF 等应用到 GM 结构的透射谱的正向预测和逆向设计中, 并对这些算法进行对比。针对透射谱的优化问题, 论文不仅利用演进类算法对特定透射谱进行优化, 还利用其对 GM 结构的透射谱进行多目标优化。论文为光子学器件的设计和优化提供一种可靠且高效的方案, 论文的主要章节安排和研究内容如下:

第一章是绪论, 首先介绍基于 SPP 光子学器件设计的基本概念和研究背景, 着重介绍 GM 结构的研究现状。接下来介绍机器学习方法在光子学器件设计中的应用, 重点回溯 ANN 在光子学结构设计中的应用现状, 包括其应用场景、范围和效果等。同时, 在光子学结构的优化问题上, 论文介绍基于梯度和无梯度方法在此问题中的应用和发展, 从而引出论文所研究课题的必要性和意义。最后介绍论文的章节安排。

第二章主要介绍 GM 结构设计的理论基础与研究方法。首先介绍石墨烯的结构和光电特性, 之后着重介绍 GM 结构的理论基础和物理性质。随后对论文使用的仿真方法和工具进行简单介绍。最后, 对 GM 结构的设计和优化方法进行介绍, 包括机器学习算法和演进类算法。本章为后续章节提供理论和研究方法基础。

第三章提出由 GNRs 构成的新型 GM 结构, 通过合理调整结构参数使其透射谱获得 PIT 效应, 并对利用 FDTD 方法得到的 GM 结构的仿真结果进行分析和解释。针对利用 FDTD 方法仿真时间较长的问题, 提出利用多种机器学习方法训练模型来代替数值仿真的思路, 并说明 GM 结构的透射谱的预测思路和训练数据的生成方法。随后利用 ANN、RF、K 最近邻 (K-Nearest Neighbor, KNN)、决策树 (Decision Tree, DT) 和极限树 (Extra Tree, ET) 搭建预测模型, 并对一定范围内的任意参数作为输入的 GM 结构的透射谱进行预测, 同时对五种模型本身的预测准确率和预测时间进行对比分析。最后, 针对 GM 结构的逆向设计, 论文训练五个逆向模型, 同样也针对预测准确率和预测时间进行对比。

第四章针对 GM 结构的透射谱提出利用演进类算法进行单、多目标优化的思路。对于单目标优化问题, 以特定透射谱为优化目标, 利用 GA、PSO 和 QGA 对 GM 结构的透射谱进行优化, 并在准确度和效率两方面对比三种演进类算法

的优化结果。对于多目标优化问题，以 GM 结构透射谱中多峰 PIT 效应的峰-谷差为优化目标，利用带精英策略的非支配排序遗传算法对 GM 结构的透射谱进行迭代优化，并对结果进行分析，最终得出结论。

第五章对论文的内容进行总结说明。

第二章 GM 结构的理论基础及设计方法

自 2004 年石墨烯被发现后,这种典型的二维材料迅速成为了材料研究的热点。石墨烯具有出色的电学、光学和热学效应,包括具有高导热性^[10]、可见光范围内稳定的透明性^[11]、强大的三阶光学非线性^[12]和宽频谱响应等^[13],因此被大量用于光学结构和器件的设计^[14-21]。特别是已有学者证明了石墨烯可以以低传播损耗和高约束力的优势来支持 SPP 的激发和传播^[22-26]。到目前为止,基于 SPP 的石墨烯器件已大量涌现,例如 GM^[84-87]、GNRs^[88-90]和石墨烯波导^[91-92]等。近年来,机器学习方法和演进类算法常用于对光子学器件的设计和优化,以提高光子学器件的设计效率和性能指标。下面介绍 GM 结构的物理理论基础以及设计和优化方法。

2.1 GM 结构及其物理性质分析

2.1.1 石墨烯结构简介

石墨烯是一种典型的周期性蜂窝状二维材料,由键长 0.141 nm 的碳六环构成,厚度为 0.335 nm,其具体结构如图 2-1 (a) 所示。2004 年,石墨烯这种新型材料由 A. K. Geim 和 K. S. Novoselov 两位科学家通过分离石墨得到^[98],同时他们验证了石墨烯的电学性质,该成果也获得了 2010 年诺贝尔物理学奖(图 2-1 (b))。图 2-1 (c) 为石墨烯及其衍生物,二维石墨烯可以卷成零维的富勒烯^[99],一维的碳纳米管^[100]以及堆垛为三维的石墨^[101]。



图 2-1 石墨烯简介 (a) 石墨烯结构示意图^[98] (b) 制备单层石墨烯获得诺贝尔奖
(c) 二维石墨烯及其衍生物^[99-101]

2.1.2 石墨烯的光电特性

石墨烯是目前发现的室温条件下电导率最高的材料之一。石墨烯的费米能级可由其栅极电压进行调整,因此其光电转换过程可间接由费米能级或者化学势来控制。石墨烯的电导率与其载流子浓度有密切的关系,电导率的控制可通过改变其掺杂类型或栅极电压实现。因此可以通过调整石墨烯化学势的方式改变其载流

子浓度和费米能级，从而实现对石墨烯电学性质的调控。石墨烯层的表面电导率^[102]可由此等式给出： $\sigma_s = \sigma'_s - i\sigma''_s$ ，根据 Kubo^[103-104]公式可以推出石墨烯的动态光学响应如下：

$$\sigma = \sigma_{\text{intr}} + \sigma'_{\text{inter}} + i\sigma''_{\text{inter}} \quad (2-1)$$

石墨烯可被建模为各向异性材料，其平面内外的介电常数不同。其面内介电常数为 $n_g = [1 + i\sigma_g\eta_0/(k_0d_g)]^{1/2}$ ，其中 $d_g=0.34 \text{ nm}$ 和 $\eta_0(=367.73\Omega)$ 分别是单层石墨烯的厚度和空气的特征阻抗。根据 Kubo 公式可得到石墨烯的表面电导率：

$$\sigma_g = -\frac{ie^2(\omega + i\tau^{-1})}{\pi\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\varepsilon|}{(\omega + i\tau^{-1})^2} \frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon - \int_0^{+\infty} \frac{\partial f_d(-\varepsilon) - \partial f_d(\varepsilon)}{(\omega + i\tau^{-1})^2 - 4(\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon \right] \quad (2-2)$$

公式中 f_d 为费米-狄拉克分布，其值为 $f_d=1/(1+\exp[(\varepsilon - E_f)/(k_B T)])$ ，其中 ε 、 $T(=300 \text{ K})$ 、 e 、 k_B 、 τ 和 \hbar 分别代表能量、温度、元电荷、玻尔兹曼常数、动量弛豫时间和普朗克常数。由于 $|\mu_c| \gg k_B T$ ，单层石墨烯的表面电导率可以近似为：

$$\begin{aligned} \sigma_g = & i \frac{e^2 k_B T}{\pi\hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})} \left[\frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left(\exp \left(-\frac{\mu_c}{k_B T} \right) + 1 \right) \right] \\ & + i \frac{e^2}{4\pi\hbar} \ln \left[\frac{2|\mu_c| - \hbar(\omega + i\tau^{-1})}{2|\mu_c| + \hbar(\omega + i\tau^{-1})} \right] \end{aligned} \quad (2-3)$$

第一项对应于石墨烯带内电子-光子散射过程，第二项对应于带间电子跃迁。可见光区域，带间转移起主要作用，而在中红外频段，带内转移占主导地位。石墨烯的带内和带间电导率的表达式为^[105]：

$$\sigma_{\text{intr}} = \sigma_0 \frac{4\mu}{\pi} \frac{1}{\hbar\tau - i\hbar\omega} \quad (2-4)$$

其中 τ 是弛豫时间， μ 是化学势，值大于 0。在可以激发 SPP 的中红外和太赫兹波段，石墨烯的电导率可以简化为^[70]：

$$\sigma = \frac{i\mu_c e^2}{\pi\hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})} \quad (2-5)$$

μ_c 是石墨烯的化学势，与大多数介质不同，石墨烯可以通过改变栅极电压控制化学势的大小进而改变其电导率。同时，由于石墨烯表面激发的 SPP 具有强大的近场束缚能力，导致载流子的迁移速度更快，意味着其传输损耗也会更小。

对于线性光学性质而言，石墨烯的透光性非常出色，在宽频范围内（紫外到远红外区域）单层石墨烯的透光率可达 97.7%，在垂直角度下，对入射光的吸收率只有 2.3%，石墨烯对入射光的吸收率随着层数的增加而变大。对于非线性光学性质而言，单层石墨烯的三阶非线性极化率在近红外区域高达 $1.5 \times 10^{-7} \text{ esu}$ ^[109]，

并且可通过改变石墨烯的费米能级实现对其三阶非线性的调制。根据石墨烯介电常数实部的正负，分别支持石墨烯表面 SPP 波的 TE 和 TM 模式。其中，TM 模式 SPP 波的色散方程可表达为^[104]：

$$k_{sp} \approx \frac{\hbar^2}{4e^2 E_f} (\varepsilon + 1) \omega (\omega + \frac{i}{\tau}) \quad (2-6)$$

由于石墨烯 SPP 和金属表面的 SPP 具有非常相近的性质，因此石墨烯 SPP 表面波的结合度可由式（2-7）表示^[104]，式中 λ_0 代表自由空间光波长，石墨烯激发的 SPP 的波长为 $\lambda_{sp} = 2\pi/\text{Re}(k_{sp})$ 。

$$\frac{\lambda_{sp}}{\lambda_0} \approx \frac{4\alpha}{\varepsilon + 1} \frac{E_f}{\hbar \omega} \quad (2-7)$$

由于石墨烯在中红外波段的类金属性质，石墨烯也可以激发 SPP，而且相比于金属而言，石墨烯对 SPP 的传播具有低损耗和高约束力的优势。具体体现为更大的模斑直径和更长的传播长度，更重要的是石墨烯可以通过改变其栅极电压或化学势，动态地调控其电学、光学特性。

2.1.3 GM 结构的物理性质

GM 结构在光子学器件的设计中具有广泛的应用^[88-90]，论文通过图 2-2 中的 GM 结构为例，对其物理原理进行分析^[106]。可以看到，该结构由二氧化硅（SiO₂）介电层分隔的两条石墨烯带阵列（Graphene Ribbon Array，GRA）构成。

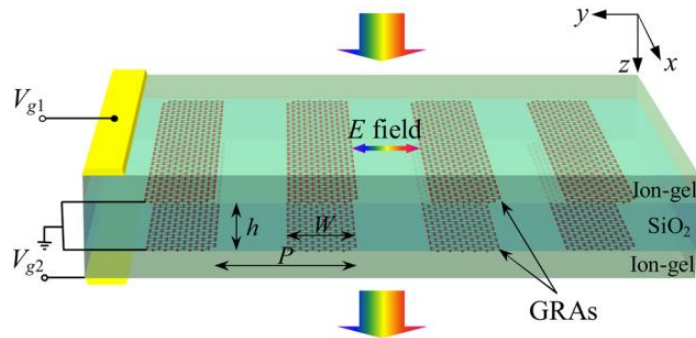
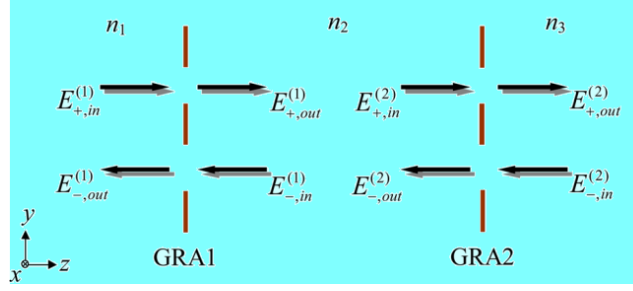


图 2-2 由 GRA 构成的 GM 结构示意图^[106]

GRA 中的载流子浓度通过静电门控来控制，因此该结构的光传输受到栅极电压 V_{g1} 和 V_{g2} 的调制。沿 z 轴方向入射的线偏振光（垂直于石墨烯带）的中红外波用于激发 GRA 中的 SPP。这里利用石墨烯 SPP 和转移矩阵理论来分析该 GM 结构的动态传输方程。图 2-3 展示了该结构的传递矩阵模型，它具有分别由矩阵 M1 和 M2 表示的空间分隔的导电介质（即 GRA1 和 GRA2）。

图 2-3 GM 结构的传输矩阵模型示意图^[106]

其中，入射波和出射波的电场矢量之间的关系可简化为：

$$H=M_2 \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} M_1, \quad M_j = \frac{1}{t_{21}} \begin{pmatrix} t_{12}t_{21} - r_{12}r_{21} & r_{21} \\ -r_{12} & 1 \end{pmatrix}, j=1,2 \quad (2-8)$$

这里，矩阵 M_j 中的菲涅耳系数可以由以下公式给出：

$$\begin{aligned} t_{12} &= \frac{2n_j}{n_j + n_{j+1} + Z_0\sigma_j}, t_{21} = \frac{2n_{j+1}}{n_j + n_{j+1} + Z_0\sigma_j}, \\ r_{12} &= \frac{n_j - n_{j+1} - Z_0\sigma_j}{n_j + n_{j+1} + Z_0\sigma_j}, r_{21} = \frac{n_{j+1} - n_j - Z_0\sigma_j}{n_j + n_{j+1} + Z_0\sigma_j}. \end{aligned} \quad (2-9)$$

三个介电层的折射率分别为 $n_1=n_3=1.35$, $n_2=1.45$ 。 $\varphi = n_2\hbar\omega/c$ 是两个 GRA 之间的相位差， ω 是入射波的角频率， c 是真空中光速， $Z_0=367.73 \Omega$ 为空气的特征阻抗。在准静态近似且忽略横向石墨烯带相互作用的条件下，GRA 的平均片光导率可以由式（2-10）给出：

$$\sigma_j(\omega) = i \frac{fD_i}{\pi} \frac{\omega}{(\omega^2 - \omega_{p,j}^2) + i\Gamma_{p,j}\omega} \quad (2-10)$$

其中 $D_i=e^2E_{F,i}/\hbar^2$ 是 Drude 权重、 e 是电子电荷、 $E_{F,i}$ 是 GRA 1 ($i=1$) 和 GRA 2 ($i=2$) 的费米能量， \hbar 是普朗克常数， $\Gamma_{p,j}$ 是 GRA 的 SPP 共振宽度。 f 是 GRA 的填充因子，取值范围为 0 到 1。GRA 中石墨烯 SPP 的共振频率 $\omega_{p,j}$ 可以表示为：

$$\omega_{p,j} = \sqrt{\frac{D_j}{\eta\epsilon_0\epsilon_{eff}W_j}} \quad (2-11)$$

其中， ϵ_{eff} 是 GRA 的有效介电常数。 ϵ_0 是真空介电常数， W_j 是 GRA 的石墨烯带宽度， η 是根据模拟结果得出的拟合参数。可以发现，GRA-SiO₂-GRA 结构正好形成了法布里-珀罗谐振腔（Fabry-Pérot cavity, FP 腔），其中 GRA 可以看作是传统 FP 腔的两个反射面。而且，由于 GRA 的光导率可调，可以通过栅极电压动态调整反射面的菲涅耳折射率。根据式（2-8）到（2-11），该 GM 结构的透射率可以推导为：

$$T = \left[\frac{4n_1 n_2}{(n_2 + n_1 + Z_0 \sigma_1)(n_2 + n_1 + Z_0 \sigma_2) e^{-i\varphi} - (n_2 - n_1 - Z_0 \sigma_1)(n_2 - n_1 - Z_0 \sigma_2) e^{-i\varphi}} \right]^2 \quad (2-12)$$

2.2 仿真工具选择

数值仿真又称为数值模拟方法，一般是通过计算机程序来求解数学模型的近似解。FDTD 方法和有限元法都是常见的数值仿真方法。有限元法是先将连续求解域分割为有限个单元组成的离散化模型，再用变分原理将其转化为等价的线性方程组，最后求解。而 FDTD 的求解思路是利用差商来代替微商，将微分方程转换为对应的线性代数方程组，从而得到各节点的数值解。有限元法和 FDTD 方法在光学结构的电磁响应求解中有着广泛的应用。论文使用的 FDTD Solutions 仿真软件的原理即为 FDTD 方法。FDTD Solutions 是基于 FDTD 方法的专业仿真软件，是 Lumerical Solutions 的主要产品，该软件因其简单、仿真模型广且计算能力强的优势被很多科研学术团队广泛使用。FDTD Solutions 基于矢量三维麦克斯韦方程求解，采用 FDTD 方法将空间网格化，通过时间上的按步计算，从时域信号中获得宽波段的稳态连续波结果，其独有的材料模型可以在宽波段内精确描述材料的色散特性，软件内嵌高速且高性能的计算引擎，可一次计算获得宽波段和多波长结果。

2.3 辅助设计及优化方法

2.3.1 机器学习算法介绍

近年来，机器学习常被用于光子学结构的设计和优化中。机器学习是门多领域交叉学科，涉及概率论、统计学、凸分析、算法复杂度理论等，通过利用计算机模拟人类学习行为，不断对自身组织结构进行迭代更新和完善，从而提高对新知识的学习效率及准确性。机器学习方法主要可分为监督学习和非监督学习两大类，其最大区别在于训练模型过程中是否需要已有的数据样本作为训练集。

对于监督学习算法来说，又可以分为两大类，即回归算法和分类算法。回归算法对应的标签类型为连续型，分类算法对应的标签类型为离散型。回归算法常针对数值型样本进行连续分布预测。相对于分类方法而言，预测的标签为连续型数据，包含的信息量远高于离散型数据。回归算法在多个领域应用广泛，包括数学、物理学和生物学等，下面对常用的机器学习方法进行介绍。

2.3.1.1 人工神经网络

ANN 是一种模拟人类大脑处理信息机制的一种仿生物学模型。该模型的响应机制为接受到外界刺激后，对拓扑网络的结构超参数不断进行动态调整，对有

效的外界刺激反馈正确的输出响应。ANN 具有并行能力强、容错性高、自适应学习等优点，能够进行复杂的逻辑运算和实现非线性关系，这使得其在各学科领域范围内发挥了重要的作用。本质上来说，ANN 的底层是由大量网络节点组成的一个复杂的拓扑网络结构。如图 2-4 所示，该网络拓扑结构由大量的网络节点（神经元）之间相互连接构成。每个节点被称为激活函数，代表了一个特定的输出。每两个节点间的连接称为权重，表示对通过该连接的信号的加权值。隐藏层的作用是将抽象化特征更好地进行线性划分，它将输入数据的特征通过另一维度空间来展现其抽象化特征。ANN 的输出则取决于拓扑网络结构、连接方式、权重和激活函数等。

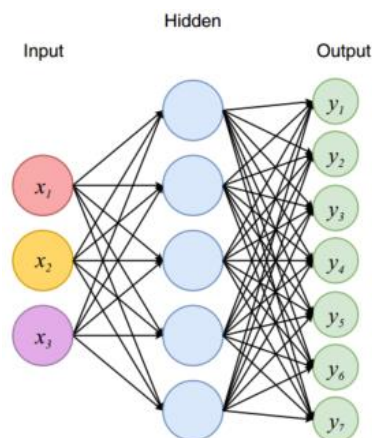


图 2-4 ANN 结构示意图^[37]

2.3.1.2 K 最近邻

KNN 是具有广泛应用的典型机器学习算法代表之一。KNN 算法意为每个样本都可以用与其距离最短的前 k 个样本代替，距离一般通过欧式距离衡量。其算法本质是通过测量不同特征值之间的距离进行分类。KNN 的分类思路为：如果未被分类的某个特征标签距离最近的 k 个标签为某一类别，则把此标签也归类为同一类别。需要注意的是，所选择的相邻特征标签都是已被正确分类的对象。KNN 的分类原则是根据样本最近的 k 个已分类标签决定的。KNN 不仅是分类算法中的经典，在回归预测中也有广泛的应用。分类算法转化为回归算法的关键是将随机标签值转换为连续分布值。KNN 找到一个标签的最近 k 个已分类标签，计算此 k 个标签的属性平均值，将该值赋给此标签，从而得到标签对应属性的值。

2.3.1.3 决策树

DT 是一种树形结构，底层结构是二叉树，每个标签的属性由树的节点表示。DT 自上而下遍历，经过每个分支代表对一种属性的判断，判断后的分类结果由叶子节点表示。DT 的生成是通过样本学习得到的，每个样本均有一组属性和对应的固定分类结果。通过对给定样本的学习迭代，从而生成对应的 DT。生成的 DT 可对具有同样属性的样本进行分类。和 KNN 相似，DT 不仅可用于分类问题，

也可以用回归问题,通过将叶子节点的属性平均值赋给该节点从而完成离散样本点到连续分布样本的转换。

2.3.1.4 随机森林

RF 是一种应用广泛的机器学习算法,通过对样本数据进行训练从而对新的样本值进行分类和预测。RF 的基本组成单元是 DT, RF 算法的预测结果是由底层 DT 的众树决定的,即分类结果相同的最多数量的 DT 的分类结果代表了 RF 的最后分类结果。RF 的本质是利用多颗 DT 对样本进行学习、训练和预测。它在对数据进行分类的同时,还可以给出各个变量的重要性评分,评估各个变量在分类中所起的作用。RF 的构建流程是首先从原始训练集中随机抽取 n 个样本,并构建 n 个 DT;然后假设在训练样本数据中有 m 个特征,DT 选择最好的特征进行分裂,使得节点中的样本类别相同;最后让每颗 DT 最大限度的生长,训练样本用尽后,生长的众多 DT 即组成了 RF,新生成的 RF 模型即可对新的样本进行分类和预测。

2.3.1.5 极限树

ET 也是一种由多棵 DT 构成的树形结构,其算法思想与 RF 非常相似。ET 与 RF 的主要区别是 ET 使用所有样本训练,只有特征是随机选取的,因此分裂是随机的,所以在某种程度上比 RF 得到的结果可能更好。除此之外,RF 是在一个随机子集内得到最佳分叉属性,而 ET 是完全随机的得到分叉值,从而实现对 DT 的分叉。

2.3.2 演进类算法介绍

演进类算法(或称进化算法)是一类常用的优化算法,其算法思想模拟了生物进化论。算法的基本操作通常包括初始化种群、基因编码、选择、交叉和变异等。与传统的穷举法和微积分法相比,演进类算法是一种全局优化方法,它具有广泛的适应性和较高的鲁棒性。并兼具自适应和自学习的特点,可以有效地解决 NP 优化问题等复杂优化问题。演进类算法不仅可以解决单目标优化问题,在多目标优化问题中,多目标优化类演进算法也有广泛而有效的应用。目前演进类算法已被广泛用于优化参数、分配资源和网络调度等领域。下面对常见的演进类算法进行介绍。

2.3.2.1 遗传算法

GA 的算法思想借鉴了达尔文生物进化论的选择和遗传机制,是一种通过模拟自然进化过程的随机搜索算法。相比一般的优化算法,GA 具有应用范围广、全局优化性好、通用性强以及易于实现等几大优点。GA 以参数空间的个体为对象,将参数空间转化为编码空间,在编码空间中随机进行高效搜索。GA 中类似于生物进化论的遗传操作主要包括选择、交叉和变异。因此,GA 的核心内容

主要包括种群初始化、适应度函数设定、选择、交叉、变异和初始参数设定等六部分。

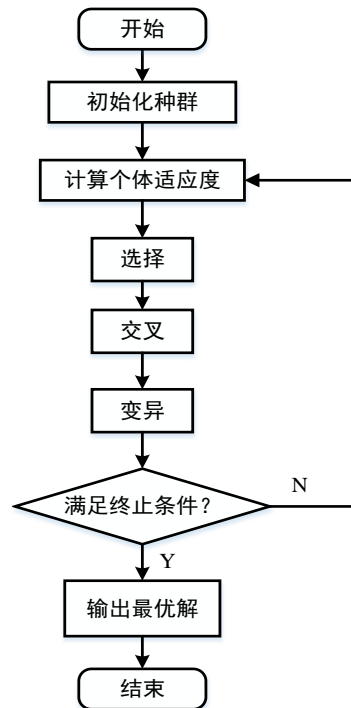


图 2-5 GA 算法流程图

GA 先初始化种群，每个种群由大量个体组成，每个个体代表优化问题中的一组可行解。每个个体在生物进化论中可类比为一条染色体。所以一条染色体即为优化问题中的一组可行解。染色体由基因组成，一个可行解一般是由多个元素组成，每个元素即为染色体上的一个基因。染色体的外部表现由基因决定，对应而言即可行解的优劣由组成该解的元素决定。染色体特定的特征是由对应控制此特征的基因组合决定的。因此，算法开始需要将优化问题的可行解进行编码转化。然后设计匹配本优化问题的适应度函数。每代种群根据个体的适应度函数值的大小进行选择，交叉操作对应于生物进化论中的交配操作，每次进化新生成的染色体由父、母染色体拼接而成，这样可以有效提高进化中种群的适应度。在交叉操作后引入变异，即在一定概率下染色体中的基因发生突变(二进制中的 01 跳变)，变异操作可以在一定程度上防止 GA 陷入局部最优解，提高了 GA 的全局搜索能力。经过多次迭代后，优化问题的最优解可由末代种群中的适应度函数值最高的个体解码得到。GA 的迭代终止条件可为设置的迭代次数或者适应度满足所设定的阈值。如图 2-5 所示，下面对其进行分步介绍：

- (1) 初始化种群，设置种群规模，种群中个体由优化问题的可行解组成。
- (2) 设计适应度函数，用来评估种群中个体的优劣，并计算所有个体的适应度值。

(3) 选择、交叉和变异。设置合理的选择策略、交叉概率和变异概率，更新种群并得到下一代。

(4) 判断是否达到算法终止条件，如果达到终止条件则输出算法最优解，否则继续迭代过程。

2.3.2.2 量子遗传算法

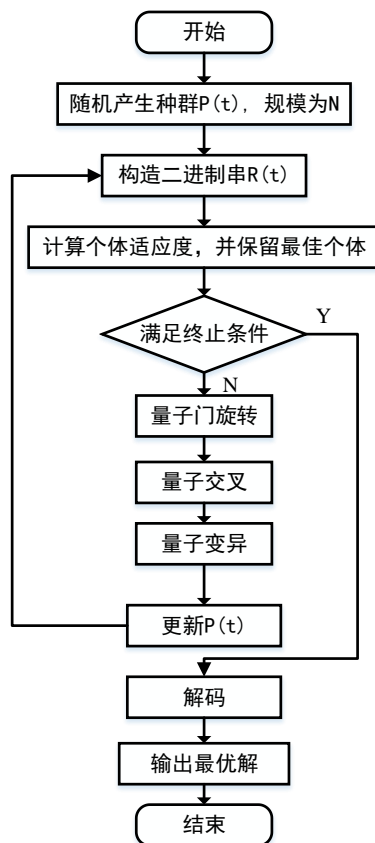


图 2-6 QGA 算法流程图

QGA 是 GA 与量子计算相结合的产物，其算法思想与经典的 GA 基本一致，不再赘述，与 GA 的不同之处如下：一是不再采用单调的二进制位来对解空间中的可行解进行编码，取而代之的是采用量子位进行编码；二是不再分步进行交叉、变异等更新操作，对于染色体的更新操作在 QGA 中统一由量子旋转门完成；三是每一个量子位的状态为量子叠加态，即 0 和 1 的叠加态，因此解码操作随之不同。在 QGA 中，染色体上的基因值不确定，采用量子位概率幅的方式表示，因此每个量子位可能代表 1，可能代表 0，也可能代表 0 和 1 的叠加态。QGA 的具体流程如图 2-6 所示。

下面对其进行分步介绍：

(1) 初始化可行解种群，并将种群中的个体进行二进制编码。

(2) 设计适应度函数，计算种群中所有个体的适应度，评估种群中个体的优劣。

(3) 设计量子旋转门，通过量子旋转对种群中的个体进行选择、交叉和变异操作，从而得到下一代种群。

(4) 判断是否满足算法终止条件，如果满足则解码输出最优值，不满足则继续进行迭代。

2.3.2.3 粒子群算法

PSO 作为一种演进类算法，模拟的是鸟群寻找食物的自然进程，食物即优化问题中的最优解，为了找到此最优解，鸟群中的个体通过实时交换其位置及速度信息，不断向食物靠近，经过一定数量的迭代后，鸟群中的个体最终找到了食物的位置，即找到了优化问题中的最优解。在 PSO 中，用粒子来模拟鸟群中的个体，每个粒子即为优化问题中的一组可行解，粒子具有位置和速度两个矢量参数，粒子的移动快慢由速度表示，粒子的移动方向由位置表示。优化问题中的当前解可由粒子的实时位置表示。PSO 迭代最优解的过程即可由鸟群中个体寻找食物的飞翔过程表示，粒子的位置和速度根据迭代过程中与最优解位置的距离和方向进行动态调整。粒子群中的极值分为个体极值和全局最优解，个体极值指的是一次迭代中单个粒子的最佳位置，全局最优解是指迭代过程中整个粒子群中的最佳极值。粒子群经过不断迭代，更新粒子的速度和位置，在迭代次数达到设定值或者适应度值足够小的条件下，算法终止，当前全局最优解即为 PSO 的最终解。

PSO 的流程如图 2-7 所示，下面对其算法流程进行分步介绍。

根据算法流程图可以看到 PSO 的步骤主要可以分为以下几步：

(1) 初始化

随机初始化可行解种群、设置种群中的粒子数量，粒子初始位置和最大速度值。粒子的可移动位置为整个可行解空间。

(2) 计算个体极值与全局最优解

针对优化目标设置匹配的适应度函数，个体极值的判定通过适应度函数值的比较。同过比较适应度函数值得到当前粒子的最佳值，即个体极值。种群中使适应函数值取到最值的个体极值称为全局最优解，在迭代过程中，通过与历史全局最优比较，从而得到该优化问题的最优解。

(3) 更新粒子的速度和位置

$$\begin{aligned} V_{id} &= \omega V_{id} + C_1 \text{random}(0,1)(P_{id} - X_{id}) + C_2 \text{random}(0,1)(P_{gd} - X_{id}) \\ X_{id} &= X_{id} + V_{id} \end{aligned} \quad (2-13)$$

在式 (2-13) 中， ω 称为惯性因子，取正值。 ω 的取值平衡了 PSO 的全局和局部搜索能力的性能。具体而言， ω 较小时，PSO 的全局搜索能力强，局部搜索能力较弱，较大时全局搜索能力弱，局部搜索能力强。 C_1 和 C_2 称为加速常数， $\text{random}(0,1)$ 表示区间 $[0,1]$ 中的随机数， X_{id} 表示第 i 个变量第 d 维的位置。 V_{id} 表示

第 i 个变量第 d 维的速度。 P_{id} 表示第 i 个变量的个体极值的第 d 维, P_{gd} 表示全局最优解的第 d 维。

(4) 终止条件

PSO 的终止条件是达到设定的迭代次数或适应度值达到最佳阈值。

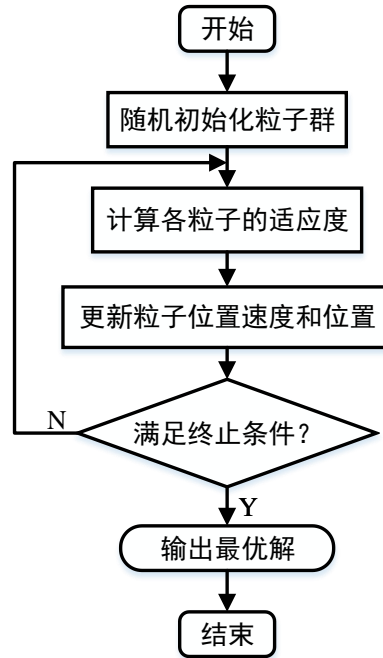


图 2-7 PSO 算法流程图

2.3.2.4 NSGA-II 算法

NSGA-II 是对非支配排序遗传算法 (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm, NSGA) 计算复杂度高和缺乏精英策略等缺点的改进版本。NSGA-II 和 NSGA 的共同点为都是基于 GA 的多目标优化算法, 也是基于 Pareto 最优解的多目标优化算法。下面对该算法的相关内容进行简单介绍:

(1) Pareto 最优解

多目标优化问题与单目标优化问题的最大区别在于, 单目标优化问题只有一个目标函数, 此类问题很明显存在一个最优解, 相对于其他所有解来说, 该解通常是全局最值点, 即全局最优解。但是对于多目标问题而言, 由于多目标之间的冲突, 很难找到一个使所有目标函数同时达到最佳的解。对于多目标优化问题, 通常存在不止一个解, 而是一个解集, 它无法直接通过目标函数比较优劣。其特点是想改进任意目标函数就必须以削弱其中至少一个目标函数值为代价, 这样的解集被称作 Pareto 最优解或者非支配解。

(2) 虚拟适应度值的确定

虚拟适应度值的大小可以决定 Pareto 解集的分层顺序。非支配层的级数和虚拟适应度值的大小成反比。等级较低的非支配层的个体的适应度值更高, 这样就

具有更大的概率在选择操作中被保留到下一代。从算法的收敛性而言,虚拟适应度值的确定可以有效地使算法快速收敛。另一方面,为了使算法不过早地陷入局部最优,就有必要保证非支配层个体的多样性。NSGA 通过共享函数对虚拟适应度值动态更新的方式,保证了 Pareto 解集的多样性,防止了算法的过早收敛。

(3) 拥挤算法和精英策略

拥挤算法和精英策略是 NSGA-II 相对 NSGA 的最大改进,这两种机制替代了 NSGA 中的共享函数,对非支配层的适应度值进行了高效且合理的计算。对于拥挤算法而言,核心是对 Pareto 解集中个体的密度进行估算。密度估算是种群中的个体计算拥挤距离,一般采用欧式距离。种群中个体根据目标函数值的大小升序排序。标号第一个和最后一个个体之间的拥挤距离定义为无穷大,对于其中某个个体来说,拥挤距离定义为该个体与相邻的后一个个体的所有目标函数值之差的和。精英保留策略是对 NSGA 中选择操作的一种改进,具体操作如下,将种群规模都为 N 的父代和子代种群合并,此时种群数量为 $2N$;合并后的种群根据拥挤度距离进行排序,排序后等级较低的个体优先放入新的父种群中,此操作重复 $N-1$ 次以填满规模为 N 的新种群,将此新种群遗传到下一代,这样大大提高了相邻代种群之间的选择效率。

(4) NSGA-II

如图 2-8 所示,NSGA-II 的一般流程为:首先,初始化种群,设置种群规模和进化代数。经过非支配排序和进化操作后生成第一代种群;根据精英策略,将父代种群与子代种群合并,进行快速非支配排序,同时对每个非支配层中的个体进行拥挤度计算,根据非支配关系以及个体的拥挤度选取合适的个体组成新的父代种群;生成新的父种群后,重复 GA 中的进化操作,直到迭代次数等于设定值,算法停止,得到结果。

NSGA-II 提出了快速非支配排序法,使多目标优化算法的复杂度由 $O(mN^3)$ 降到 $O(mN^2)$,其中, N 代表种群规模, m 代表目标函数个数。同时,NSGA-II 提出使用拥挤算法和精英策略,在保证种群多样性的前提下,使得算法快速收敛,相比 NSGA 而言更加高效。

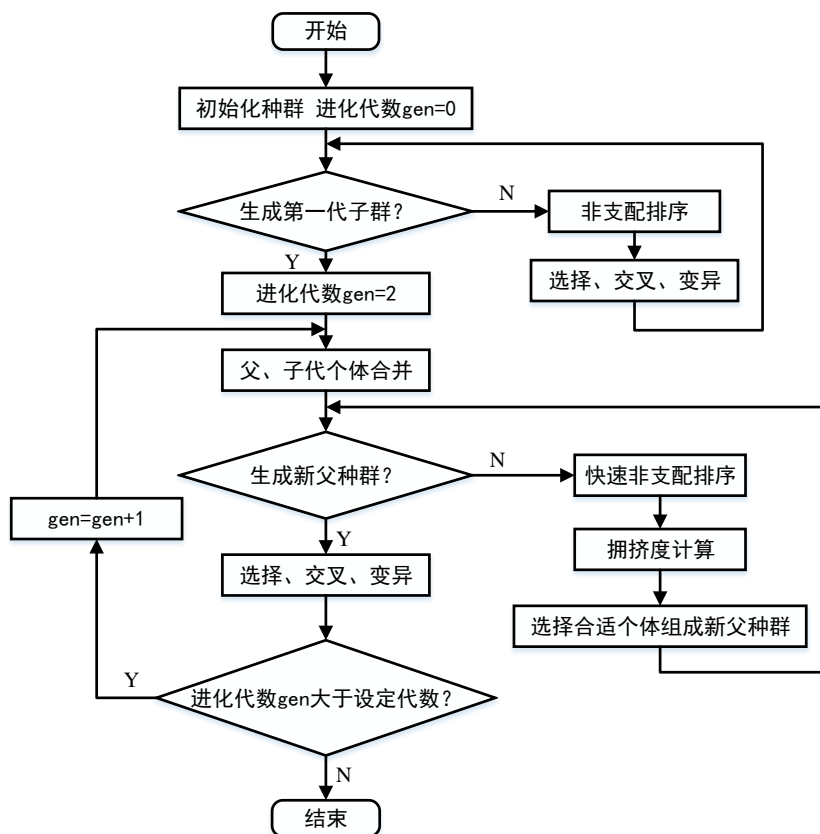


图 2-8 NSGA-II 算法流程图

2.4 本章小结

本章主要介绍了 GM 结构设计的理论基础与研究方法。首先介绍了结构中用到的石墨烯的基本性质及 GM 结构的物理原理，为提出由双层 GNRs 构成的 GM 结构提供了理论基础，之后介绍了用于 GM 结构设计与优化的机器学习方法和演进类算法，为后续章节提供了理论基础和优化设计方法。

第三章 GM 结构的设计仿真及机器学习在其中的应用

本章提出由并行 GNRs 组成的 GM 结构，并尝试实现它的透射谱预测和逆向设计。GM 结构的物理参数经过合理设计，可以在透射谱中实现 PIT 效应。选择 PIT 效应作为实现对象的原因在于它的应用非常广泛，PIT 可应用于光开关、慢光、调制器和滤波器等^[12,107]。本章利用 FDTD 方法对 GM 结构进行仿真，并对其透射谱进行分析解释。针对该结构利用 FDTD 方法仿真时间成本较高而制约其设计和分析效率的问题，本章提出利用部分仿真结果来预测 GM 结构透射谱的方案，通过使用多种机器学习算法替代 FDTD 方法对 GM 结构进行透射谱预测和逆向设计，尝试实现一个针对 GM 结构设计和分析的快速解决方案。

3.1 GM 结构的设计及仿真

3.1.1 GM 结构的介绍及仿真

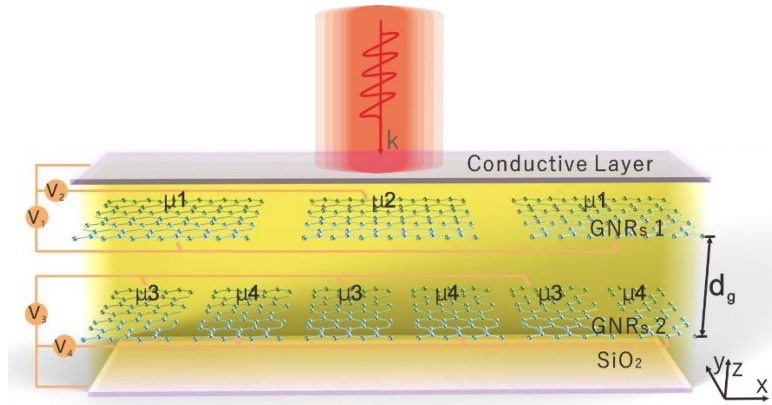


图 3-1 双层 GNRs 组成的 GM 结构示意图

论文提出的 GM 由两层 GNRs 组成，该结构的化学势可调，如图 3-1 所示。这种双层 GNRs 结构是周期性排列的，其 x 轴和 y 轴无限延伸。此结构以覆盖在 SiO_2 层 ($n_{\text{SiO}_2}=1.45$) 底部和顶部的薄导电层为电极，在 GNRs 1 (2) 上交替施加电压 V_1 (V_3) 和 V_2 (V_4)，从而使得两层 GNRs 的石墨烯带具有对应的化学势 (GNRs 1 为 μ_{c1} 和 μ_{c2} ，GNRs 2 为 μ_{c3} 和 μ_{c4})。利用 FDTD Solutions 仿真时将 GNRs 1 (GNRs 2) 中石墨烯带的周期设为 $\Lambda_1=400 \text{ nm}$ ($\Lambda_2=200 \text{ nm}$)，将 GNRs 1 (GNRs 2) 中石墨烯带的宽度设为 $w_1=350 \text{ nm}$ ($w_2=175 \text{ nm}$)，从而使得石墨烯带的占空比为 $r_1=0.875$ ($r_2=0.875$)。论文使用 Kubo 公式在 FDTD Solutions 仿真中对石墨烯带的电导率进行建模，具体形式如第二章式 (2-3) 所示。对于层数较少的石墨烯 (层数 <6)，其电导率可以表示为 $\sigma_{fg}=N\sigma_g$ ，其中 N 代表石墨烯层数。在

论文分析的波长范围内（中红外波段），考虑到带间电子-光子散射过程占主导地位且 $\mu_c \gg k_B T$ ，所以可以将石墨烯层的电导率简化为：

$$\sigma_{fg} = i \frac{Ne^2 \mu_c}{\pi \hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})} \quad (3-1)$$

基于麦克斯韦方程和连续边界条件可以得到石墨烯层的色散方程^[83]：

$$\frac{\varepsilon_1}{\sqrt{\beta_{SPP}^2 - \frac{\varepsilon_1 \omega^2}{c^2}}} + \frac{\varepsilon_2}{\sqrt{\beta_{SPP}^2 - \frac{\varepsilon_2 \omega^2}{c^2}}} = -\frac{i\sigma_{fg}}{\omega \varepsilon_0} \quad (3-2)$$

其中 β_{SPP} 是 SPP 的传播常数， c 是真空中光速， ε_0 是自由空间的介电常数， ε_1 和 ε_2 是石墨烯层两侧的介质的有效介电常数（在论文提出的结构中， ε_1 和 ε_2 都满足等式 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 2.1$ ）。由于满足 $\beta_{SPP} \gg \omega/c$ ，因此从式（3-2）中可以推导出 SPP 的有效折射率^[82]：

$$n_{SPP} = \frac{\beta_{SPP}}{k_0} = \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{SiO_2} \pi \hbar^2 c}{Ne^2 \mu_c} (\omega + i\tau^{-1}) \quad (3-3)$$

其中 k_0 是真空中波矢。如图 3-2（a）所示：由式（3-3）得到的石墨烯的色散曲线（图 3-2（a）中的实线）与通过模式求解法模拟得到的色散数据（图 3-2（a）中的圆圈标记）非常吻合。

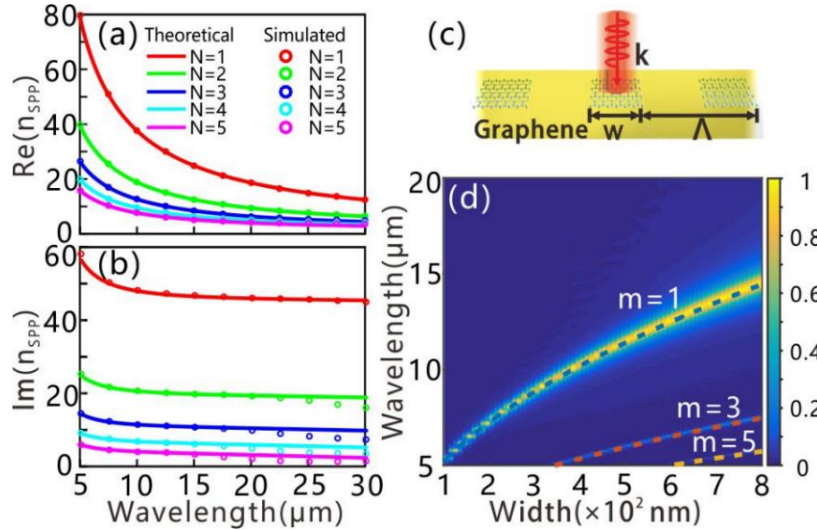


图 3-2 GNRs 中 SPP 的色散与共振曲线图 (a) SPP 折射率的实部 (b) SPP 折射率的虚部 (c) 由石墨烯带组成的单层 GNRs (d) SPP 三种模式的共振曲线

在论文的仿真中，由于石墨烯层是超薄的，因此单层和多层石墨烯都被视为具有电导率 σ_{fg} 的表面。可以发现，随着石墨烯层数的增加，不同层数的石墨烯有效折射率的实部和虚部都会减小。因此，当增加入射光的波长时，SPP 在石墨烯层上的场约束变弱，同时 SPP 的传播损耗变小。而且，随着石墨烯层数的增加，SPP 在石墨烯上的场约束也会变弱。由于对于占空比 (w/Λ) 较小的 GNRs，

位于相邻石墨烯带中的 SPP 很难发生相互作用，SPP 在 GNRs 中的传播可以被单个石墨烯带中 SPP 的传播同等替代。已有研究表明，单个石墨烯带中的 SPP 几乎在边界处全反射，并且相位跳变约为 $\varphi=0.27\pi^{[108]}$ 。因此，可以认为石墨烯带上激发的 SPP 是由类似于 Fabry-Pérot 共振引起的，这要求：

$$\text{Re}(n_{\text{SPP}})k_0 w + \varphi = m\pi, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3-4)$$

将公式（3-3）代入（3-4）可以得到 GNRs 上 SPP 的共振波长如下所示：

$$\omega_r = \sqrt{\frac{(m - \varphi) N e^2 \mu_c}{2 \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{SiO}_2} \hbar^2 w}}, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3-5)$$

如图 3-2（d）所示，由式（3-5）计算得到的 GNRs 中 SPP 的三种模式的共振曲线（图中三条虚线）与通过 FDTD 方法计算得到的仿真值（吸收轮廓图）非常吻合。在这里，论文只计算了图 3-2（d）中三种奇数模式的共振曲线，因为偶数模式不能用法向入射波激发^[108]。这种比较验证了 Fabry-Pérot 模型和 FDTD 方法的有效性。在 Fabry-Pérot 共振模式的频率下，在 GNRs 上将激发 SPP 模式，从而导致透射谱中出现的吸收增强和减弱。

3.1.2 GM 结构的透射谱及 PIT 效应

PIT 效应是 SPP 和电磁透明诱导效应（Electromagnetic Induced Transparency, EIT）结合的产物，EIT 效应是一种利用量子相干效应消除电磁波传播过程中受介质影响的技术，可以导致宽频谱中窄带透明窗口的出现。PIT 则利用 SPP 的相互作用从而得到和 EIT 相似的现象。

论文利用了 FDTD 方法分别计算了仅包含顶部和底部 GNRs 的 GM 结构的光学响应。在论文的仿真中，石墨烯带的费米能级分别设置为 $\mu_{c1}=0.7\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.15\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.75\text{eV}$ 。当 TM 偏振光垂直入射在 GM 上时，可以发现在 GM 结构的透射谱中出现了两个明显的波谷，如图 3-3 所示，其中包括顶部 GNRs（蓝色虚线）和底部 GNRs（灰色虚线）。图中，在中心波长分别为 $5.30(7.04)\mu\text{m}$ 和 $13.16(10.40)\mu\text{m}$ 处出现的波谷是由顶部（底部）GNRs 上 SPP 模式的激发导致的。

对于包括双层 GNRs 在内的完整 GM 结构的光学特性，从图 3-3 的红色实线中可以看出，在透射谱两个波谷之间出现了两个明显的透射峰，验证了多峰 PIT 效应的出现^[90]。一般来说，PIT 效应可以通过两种方式来解释：明-暗模式耦合机制和双重缀饰态机制^[16]。对于论文提出的 GM 结构，传统的明-暗模式耦合机制不适合用来解释 PIT 效应，因为此结构很难简单区分为亮模式或暗模式。与 C. Zeng 等人研究中的 PIT 效应^[106]类似，这种现象归因于金属等离子 Fabry-Pérot 系

统中两个反射面的反射波之间的相长干涉。图中 PIT 效应的出现是由在 GNRs 上激发的 SPP 模式之间的相消干涉导致的。

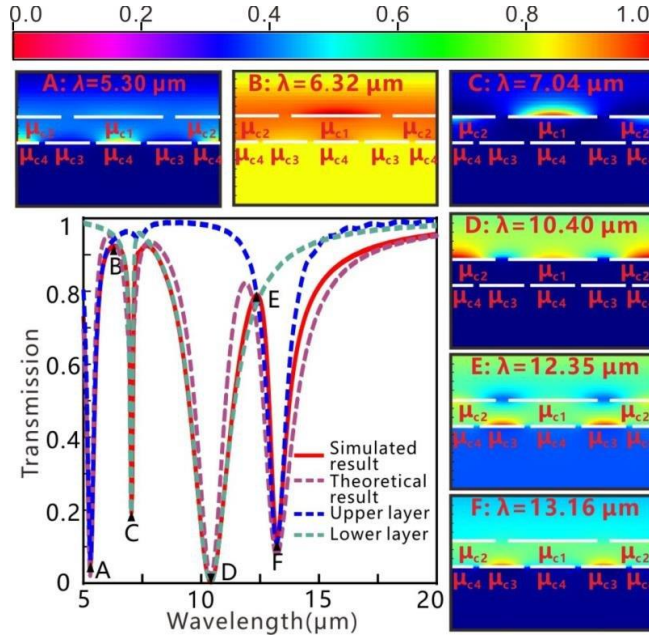


图 3-3 GM 结构的透射谱和场分布图

为了模拟双层 GNRs 的动态传输，论文借用 2.1.3 节中的研究方法，采用传输矩阵的方法对其物理现象进行解释，传输矩阵可以定义为^[106]：

$$H = M_2 S_{12} M_1 \quad (3-6)$$

其中 M_1 ， S_{12} 和 M_2 分别代表顶层 GNRs，介电层和底层 GNRs，其数学关系如下：

$$S_{12} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi'} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi'} \end{pmatrix}, \quad M_q = \frac{1}{t_{21}} \begin{pmatrix} t_{12}t_{21} - r_{12}r_{21} & r_{21} \\ -r_{12} & 1 \end{pmatrix}, q = 1, 2 \quad (3-7)$$

其中矩阵 M_q 中的菲涅耳系数可以表示为 $t_{12}=t_{21}=2n_{\text{sio}2}/(2n_{\text{sio}2}+Z_0\sigma_q')$ ， $r_{12}=r_{21}=-Z_0\sigma_q'/(2n_{\text{sio}2}+Z_0\sigma_q')$ 。其中 $Z_0=367.73\Omega$ 为空气的特征阻抗， $\varphi'=d_g n_{\text{sio}2}\omega/c$ 是顶层 GNRs 和底层 GNRs 之间的相位差。在准静态的近似条件下，石墨烯层的平均电导率 σ_q' 可由以下公式给出：

$$\begin{cases} \sigma_1' = \frac{i}{2} \left(\frac{r_1 e^2 \mu_{c1} N \omega}{\pi \hbar^2 (\omega^2 - \omega_{r1}^2) + i \Gamma_{r1} \omega} + \frac{r_1 e^2 \mu_{c2} N \omega}{\pi \hbar^2 (\omega^2 - \omega_{r2}^2) + i \Gamma_{r2} \omega} \right) \\ \sigma_2' = \frac{i}{2} \left(\frac{r_2 e^2 \mu_{c3} N \omega}{\pi \hbar^2 (\omega^2 - \omega_{r3}^2) + i \Gamma_{r3} \omega} + \frac{r_2 e^2 \mu_{c4} N \omega}{\pi \hbar^2 (\omega^2 - \omega_{r4}^2) + i \Gamma_{r4} \omega} \right) \end{cases} \quad (3-8)$$

这里， ω_{rj} 是可以通过使用公式 (3-5) 计算出的谐振频率，分别对应于化学势为 μ_{c1} , μ_{c2} , μ_{c3} 和 μ_{c4} 的 GNRs, Γ_{rj} 是 SPP 的共振宽度。根据等式 (3-6) 到 (3-8)，GM 结构的透射率可以推导为：

$$T = \left[\frac{4n_{SiO_2}^2}{\left(2n_{SiO_2} + Z_0\sigma_1'\right)\left(2n_{SiO_2} + Z_0\sigma_2'\right)e^{-i\varphi'} - Z_0^2\sigma_1'\sigma_2'e^{i\varphi'}} \right]^2 \quad (3-9)$$

根据等式 (3-9)，完整的 GM 结构的透射谱如图 3-3 中紫色虚线所示，可以看到理论透射谱（图 3-3 中紫色虚线）与通过 FDTD 方法计算的模拟透射谱（图 3-3 中红色实线）非常吻合，验证了传输矩阵方法的有效性。

3.1.3 GM 结构参数对透射谱的影响分析

论文分析了 GM 结构中的结构参数对透射谱的影响，比较结果如图 3-4 所示。从图 3-4 (a) 中可以看到，化学势 μ_{c1} 和 μ_{c2} 的增加会导致透射谱中第二和第三个波谷的共振波长的减小。

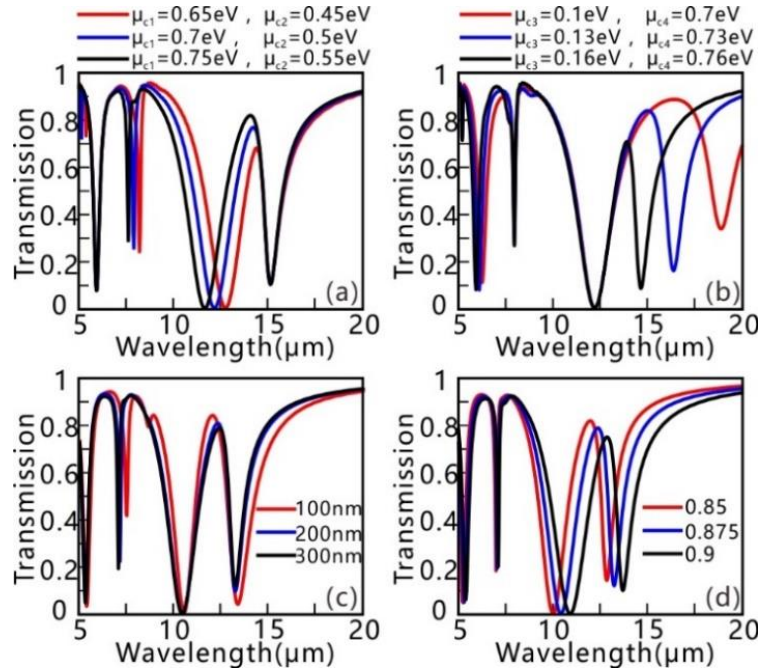


图 3-4 GM 结构参数对透射谱的影响 (a) 和 (b) 石墨烯化学势对透射谱的影响
(c) GNRs 的间距对透射谱的影响 (d) 石墨烯带的占空比对透射谱的影响

实际上，第二（第三）个波谷的产生主要来源于化学势为 μ_{c1} (μ_{c2}) 的 GNRs 上的 SPP 模式，这可以通过图 3-3 中 C 点和 D 点的磁场分布来证实。 μ_c 的增加将导致 SPP 在 GNRs 上的有效折射率的降低^[13]，进一步使得共振波长降低。这两个原因可以清楚地解释图 3-4 (a) 中透射谱的变化。类似地，如图 3-4 (b) 所示，随着 μ_c 的增加，第一、四个波谷处产生的蓝移是由具有化学势 μ_{c3} 和 μ_{c4} 的 GNRs 上的 SPP 共振所引起的。

此外,如图 3-4 (c) 所示,当 GNRs 之间的间隙 d_g 从 100 nm 增加到 300 nm 时,波谷 C 和 F 的位置向短波长方向移动,并且相对波谷 A 而言,C 和 F 对 d_g 变化的影响更为敏感。从图 3-3 的场分布可以看出,与波谷 F (D) 相比,波谷 A (C) 的 SPP 模式与垂直石墨烯带的相互作用更强,从而导致在波谷 F (C) 的谐振波长处 d_g 产生的影响比在波谷 F (C) 处的影响更大,此外,如图 3-4 (d) 所示,随着占空比从 0.85 增加到 0.90,波谷 D 和 F 的谐振波长显著增加。如图 3-3 的场分布所示,对于 GNRs 1 中具有相同宽度的石墨烯带,波谷 D 的 SPP 模式主要集中在与水平石墨烯带作用更强,化学势为 μ_{c2} 的石墨烯带上。对于 GNRs 2 中具有相同宽度的石墨烯带,化学势为 μ_{c3} 的石墨烯带上的 SPP 模式束缚性要比在化学势为 μ_{c4} 的石墨烯带上更加紧密,根据式 (3-5) 可以看出,所有波谷处的谐振波长都会随着占空比的增加而增大。

3.2 利用机器学习对 GM 结构透射谱预测的思路及数据准备

本章第一节利用了 FDTD 方法对 GM 结构进行了仿真并分析了 GM 结构透射谱的物理性质和原理。然而,利用 FDTD 方法对 GM 结构进行仿真的时间成本不可忽略。针对论文所设计的 GM 结构,单次仿真时间就达到了 3-5 分钟。当遇到大量仿真数据的需求时,通过 FDTD 方法计算所有结构参数的电磁响应通常需要大量的计算时间。虽然,可以使用蒙特卡洛模拟方法或间隔采样方法来减少仿真时间,但是由于插值和拟合的过程,会导致仿真精度的降低。除了蒙特卡洛模拟方法,提高仿真效率的另一种方法是通过部分仿真结果来训练基于机器学习算法的模型,该模型可以精确表示结构参数与相应的电磁响应之间的潜在关系。随着机器学习等人工智能方法不断地发展,利用数据训练得到物理模型的电磁响应的方案变得非常可行。针对 GM 结构来说,可以利用机器学习算法通过一定量数据进行训练和测试,得到可靠的 GM 结构的电磁响应模型,从而替代 FDTD 方法对 GM 结构的透射谱进行预测。虽然训练数据的获取同样需要一定的时间,但是一旦训练得到了可靠的系统响应模型,通过模型预测透射谱的时间相对于 FDTD 仿真来说会大幅度降低。

利用机器学习算法对 GM 结构透射谱进行预测的方案中,数据集的获取及整理是非常重要的。大量有效的训练数据是得到可靠电磁响应模型的必要条件。针对 GM 结构,论文考虑了 4 个结构参数 (GM 结构的 4 个化学势) 与其透射谱之间的潜在关系。结构参数的变化范围分别为 $0.6\text{eV} < \mu_{c1} < 0.8\text{eV}$ 、 $0.4\text{eV} < \mu_{c2} < 0.6\text{eV}$ 、 $0.05\text{eV} < \mu_{c3} < 0.25\text{eV}$ 和 $0.6\text{eV} < \mu_{c4} < 0.8\text{eV}$ 。利用 FDTD Solutions 进行仿真时,化学势的数值是在以上数值范围内随机产生的。对 4 个结构参数 (μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4}) 进行二维 FDTD 重复仿真,对于每组化学势仿真得到的透射谱量化为 200 个透

射率值，最终生成了不同的 22000 个实例。每个实例包括 4 个化学势值以及对应的 200 个透射率值，部分数据集如表 3-1 所示。实际上包括结构参数和模拟透射谱中的离散数据点在内的训练和测试实例的生成需要大量的时间，论文使用 NVIDIA Tesla P100 GPU 加速器生成 22000 个训练实例需要 30 多个小时。虽然使用高性能服务器生成这些训练实例需要花费较长的时间，但是一旦成功构建模型，用于新结构参数的算法模型的预测速度就比 FDTD 仿真快的多。而且，一旦构建了模型，该模型就可以被重复利用，从而可以提高 GM 结构的设计和分析效率。

表 3-1 部分数据集

| | μ_{c1} | μ_{c2} | μ_{c3} | μ_{c4} | Trans. 1 | Trans.2 | Trans.3 | Trans.i | Trans.199 | Trans.200 |
|-------|------------|------------|------------|------------|----------|---------|---------|---------|-----------|-----------|
| 1 | 0.77 | 0.4 | 0.19 | 0.56 | 0.9845 | 0.9823 | 0.981 | | 0.9797 | 0.9804 |
| 2 | 0.68 | 0.53 | 0.25 | 0.52 | 0.9844 | 0.9826 | 0.9823 | | 0.9741 | 0.9454 |
| 3 | 0.78 | 0.54 | 0.16 | 0.5 | 0.9839 | 0.9836 | 0.9784 | | 0.9792 | 0.9784 |
| 4 | 0.68 | 0.48 | 0.06 | 0.56 | 0.9581 | 0.9493 | 0.9425 | | 0.9711 | 0.9689 |
| 5 | 0.78 | 0.57 | 0.17 | 0.51 | 0.9846 | 0.9857 | 0.9783 | | 0.9769 | 0.9806 |
| ... | | | | | | | | ... | | |
| | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | |
| 21999 | 0.75 | 0.42 | 0.07 | 0.48 | 0.9721 | 0.9663 | 0.9612 | | 0.9742 | 0.9733 |
| 22000 | 0.78 | 0.42 | 0.05 | 0.57 | 0.9229 | 0.9018 | 0.8978 | | 0.9699 | 0.973 |

3.3 利用机器学习对 GM 结构透射谱的正向预测

透射谱的正向预测即由 GM 的结构参数预测对应的透射谱。本节利用 ANN、KNN、RF、DT 和 ET 这五种机器学习算法替代 FDTD Solutions 的仿真过程，对 GM 结构进行透射谱预测，从而提高 GM 结构的设计和分析效率，值得注意的是论文中，利用机器学习进行训练和预测都是基于服务器硬件平台的，该平台为 ThinkStation P520C 工作站。

近年来，作为机器学习算法的典型代表之一，ANN 常用于训练仿真模型，但是与传统的机器学习算法（例如决策树和 RF）相比，ANN 的训练成本相对较高。这是因为用于 ANN 的超参数（网络层数、求解器和激活函数等）的选择较为复杂，而类似于 KNN 和 RF 这些传统的机器学习算法在这类问题中也非常有效。下面对上述五种机器学习算法模型的预测过程及结果进行介绍与对比。

在 GM 结构中，论文考虑了 4 个化学势取值与透射谱之间的潜在关系。在此，化学势的变化范围分别为 $0.6\text{eV} < \mu_{c1} < 0.8\text{eV}$ 、 $0.4\text{eV} < \mu_{c2} < 0.6\text{eV}$ 、 $0.05\text{eV} < \mu_{c3} < 0.25\text{eV}$ 和 $0.6\text{eV} < \mu_{c4} < 0.8\text{eV}$ 。利用 ANN 对 GM 结构的透射谱的预测过程如图 3-5（a）所示，ANN 以 GM 的结构参数（4 个化学势值）作为输入，训练模型并预测 GM 结构的透射谱（200 个透射率值）。为了保证训练模型的泛

化,在使用可重复的 2D FDTD 仿真方法生成的 22000 个实例中,ANN 使用其中 20000 个实例进行训练,剩下 2000 个实例作为测试集验证训练效果。ANN 的模型训练是通过随机梯度下降或自适应矩估计完成的。为了展示训练后的 ANN 的性能,论文定义了一个指标-得分 (Score),用于衡量 ANN 预测透射谱结果与透射谱实际数值 (FDTD 仿真数值) 之间的距离,其定义如式 (3-10)。Score 越大,代表 ANN 预测的透射谱结果越接近于实际透射谱。

$$\text{Score} = \left(1 - \frac{\sum_{i=0}^N |y_{true_i} - y_{pred_i}|}{N} \right) * 100 \quad (3-10)$$

式(3-10)中, N 为利用 FDTD 方法仿真得到的透射谱中的全部离散数据点, y_{true} 和 y_{pred} 分别为利用 FDTD 方法和 ANN 方法分别仿真和预测的离散数据点。Score 的最佳值为 100,代表利用 ANN 预测的透射谱值与通过 FDTD 仿真方法得到的透射谱值完全一致。

对于 ANN 而言,其性能包括预测精度、收敛性和计算时间等是由其超参数的选择决定的。ANN 的超参数主要有神经网络层数、每层神经元个数以及激活函数等。由于不同层次的神经元之间存在大量的权值,训练 ANN 通常需要较高的计算代价。为了确保所训练的 ANN 具有良好的准确率和较短的训练时间,论文利用 GA 来优化神经网络架构和选择超参数。通过 GA 对 ANN 的 4 个关键超参数(神经网络层数、每层的神经元数、神经元权重的求解函数和隐藏层的激活函数)进行优化从而得到最优结构的 ANN。ANN 的超参数类型和对应的范围如下:

表 3-2 ANN 的超参数和选择范围

| ANN 的超参数 | 选择范围 |
|-----------|-----------------------|
| 神经网络层数 | 3、4、5、6、7、8 |
| 每层神经元个数 | 10、50、100、200、300、400 |
| 神经元权重求解函数 | adam、sgd |
| 隐藏层激活函数 | relu、tanh |

ANN 预测透射谱的精度的迭代变化如图 3-5 (b) 所示。在 GM 结构的正向透射谱预测中,基于 GA 对 ANN 的网络结构进行优化,最终选取得分值最高的 ANN,并利用该 ANN 对 GM 结构的透射谱进行预测。在论文的模拟中,透射谱预测的准确率由 Score 来表示,Score 用于衡量透射谱的预测结果与利用 FDTD 方法得到的仿真结果的相似度 (Score 的最佳值为 100)。如图 3-5 (b) 所示,随着迭代次数 (Generation) 的增加,Score 从 86.8 逐渐增加到了 95,说明了 GA 优化 ANN 网络结构的有效性。得分值最高的 ANN 的层数为 5,网络拓扑结构为

4-200-50-50-200，激活函数为‘relu’，求解函数为‘sgd’。论文通过搭建上述参数的 ANN 对 GM 结构的透射谱进行预测。

为了说明 ANN 的有效性，抽取了一组 GM 的结构参数，具体为 $\mu_{c1}=0.7\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.15\text{eV}$ 和 $\mu_{c4}=0.7\text{eV}$ 。如图 3-5 (c) 所示，横坐标 Wavelength 为波长，纵坐标 Trans. 为 GM 结构在对应波长下对入射光的透射率。红色实线为此结构参数对应的实际透射谱，蓝色圆点为利用训练好的 ANN 模型预测的 GM 结构的透射谱。从图中可以看出，由 ANN 模型预测的 GM 结构的透射谱与其实际透射谱非常吻合，充分说明了 ANN 在 GM 结构透射谱预测中的有效性。更重要的是，ANN 优化自身参数及预测 GM 结构透射谱时间之和不超过 37 秒，相对于利用 FDTD 方法对透射谱仿真来说，时间成本降低了接近 5 倍。

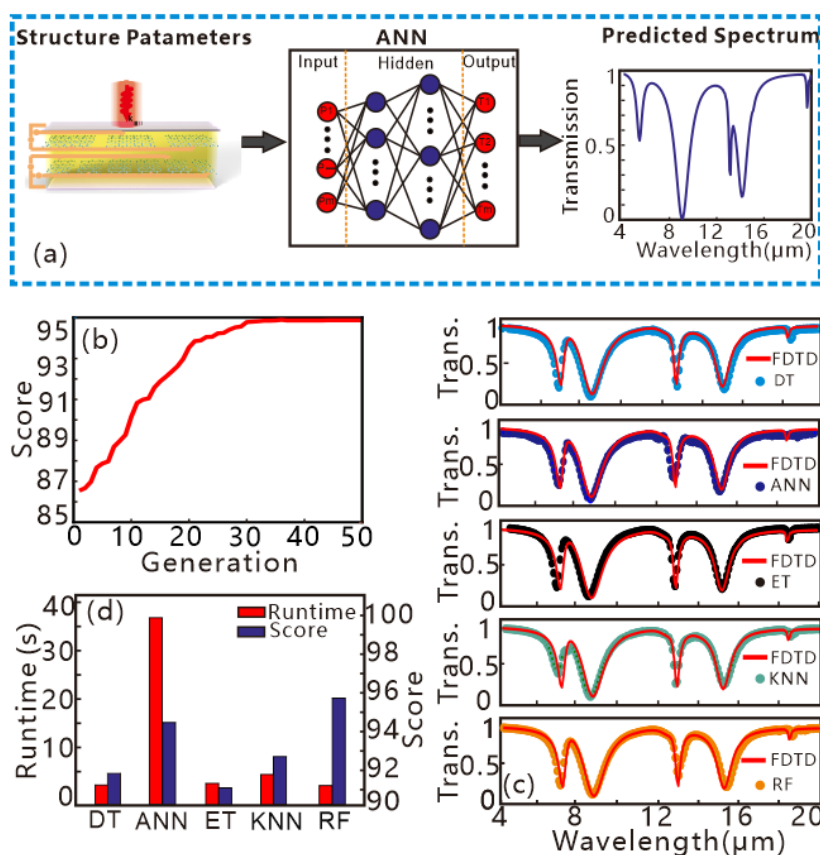


图 3-5 利用机器学习算法预测 GM 结构的透射谱 (a) 利用 ANN 预测 GM 结构的透射谱示意图 (b) ANN 的得分和迭代次数的关系曲线 (c) 五种机器学习算法预测的透射谱与原透射谱的对比 (d) 五种机器学习算法的性能对比

此外，论文还采用相同的训练集和思路来训练其他 4 种机器学习算法。这里，DT、ET、KNN 和 RF 的模型搭建是通过 Scikit-learn 库中对应的方法实现的。同样利用数据样本中的 20000 组实例进行训练，2000 组实例进行测试，从而得到可靠的机器学习模型。如图 3-5 (d) 所示，所有机器学习算法的 Score 均不低于 91，这表明论文所使用的 5 种机器学习算法在 GM 结构的正向透射谱预测中都非常有效。

可以看到, 尽管 ANN 的模型在直观上更为复杂, 但传统的一些机器学习算法在 GM 结构透射谱预测中与 ANN 效果持平甚至更好。其中, RF (96) 的准确率优于 ANN (95)。为了直观说明机器学习算法的有效性, 论文选取了与 ANN 相同的测试结构参数, 比较了机器学习算法训练的模型所预测的透射谱与通过 FDTD 方法仿真得到的透射谱之间的差异。如图 3-5 (c) 所示, 机器学习算法预测的透射谱 (圆点) 与利用 FDTD 方法得到的仿真结果 (实线) 非常吻合, 进一步说明了 5 种机器学习算法的有效性。更重要的是, 在确定了机器学习算法的超参数后, ANN 的训练成本 (36.3 秒) 远超其他机器学习算法的训练成本 (<5 秒), 这是由于 ANN 复杂的网络结构所导致的, 这说明 ANN 在论文提出的 GM 结构的透射谱预测效率上要逊色于其他算法。各算法的运行时间及得分情况如表 3-3 所示, 与 ANN 相比, RF 综合考虑了训练成本和预测准确率, 在保证 Score 达到 96 的同时, 将算法运行时间控制在了 4 秒以内。因此, 相对近年来常被使用的 ANN, RF 是完成 GM 结构正向透射谱预测的一种更合适的方法。

表 3-3 透射谱预测各算法运行时间及得分情况

| 机器学习算法 | 运行时间 | 得分 |
|--------|-------|----|
| ANN | 36.3s | 95 |
| DT | 3.5s | 92 |
| ET | 3.8s | 91 |
| KNN | 4.2s | 93 |
| RF | 3.4s | 96 |

同时, 论文也考虑到了各机器学习算法的收敛稳定性与运行时间的关系, 如图 3-6 (a) 和 (b) 所示, 在使用相同数量的数据集 (22000 组) 的情况下, 五种机器学习算法的得分在各自的运行时间内都趋于收敛, 进一步说明了五种算法在 GM 结构的透射谱正向预测中的有效性。

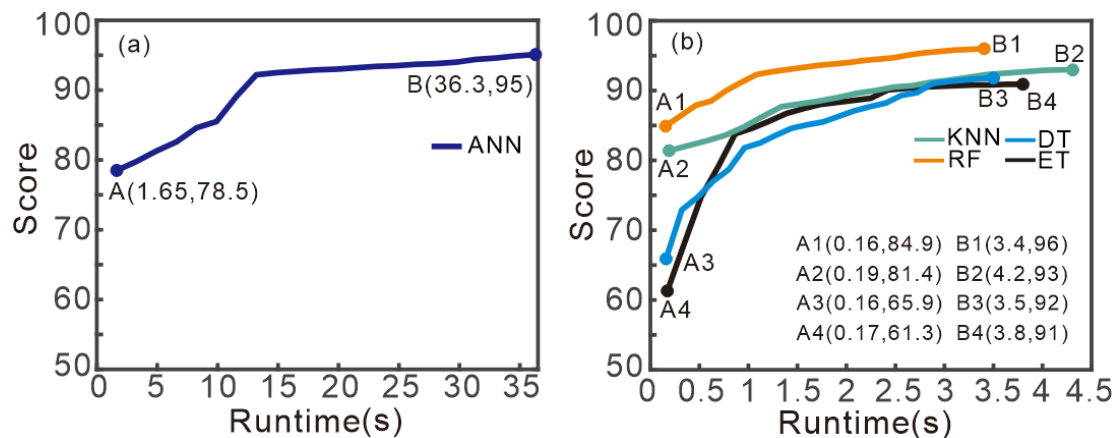


图 3-6 正向预测中算法收敛性与运行时间的关系 (a) ANN (b) KNN、DT、RF 和 ET

3.4 利用机器学习对 GM 结构的逆向设计

GM 结构的逆向设计指的是根据 GM 结构的透射谱指导设计结构参数的过程。如图 3-7 (a) 所示, 为了从给定的 GM 结构的透射谱得到对应的结构参数, 与 GM 结构透射谱的正向预测相似, 论文特别构造了一个“逆”网络架构, 该架构可以由特定透射谱再现 GM 对应的结构参数。因此, “逆”网络架构的输入和输出分别是 GM 结构透射谱采样的离散点 (200 个透射率值) 和其结构参数 (4 个化学势值), 图 3-7(a) 中的 ANN 同样可以替换为 RF 和 DT 等其他 4 种算法。

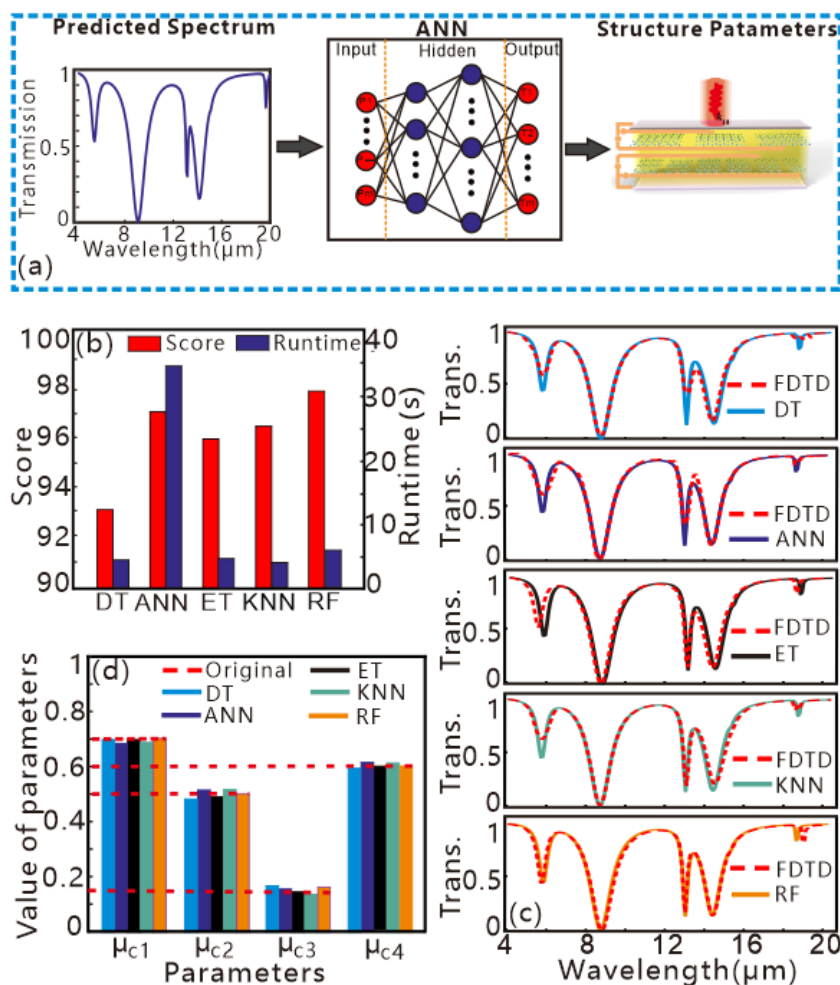


图 3-7 利用机器学习算法对 GM 结构的逆向设计 (a) 利用 ANN 进行 GM 结构逆向设计示意图 (b) 五种机器学习算法在 GM 结构逆向设计中的对比 (c) 机器学习算法逆预测的结构参数与原结构参数对应的透射谱对比 (d) 五种机器学习算法逆预测结构参数与原结构参数的对比

值得说明的是, 本节并不需要生成新的训练数据, 而是使用与正向预测相同的训练实例, 通过在正向透射谱预测中将输入 (输出) 转换为输出 (输入) 来训练逆向设计模型。对于 ANN 而言, 与正向预测相似, 通过 GA 得到最优的网络结构, 适用于 ANN 的网络结构是网络拓扑为 200-50-200-500-100-4 的全连接网络, 激活函数为 ‘relu’, 求解函数为 ‘adam’。图 3-7 (b) 展示了逆向设计中所

有机器学习算法的运行时间 (Runtime) 和得分 (Score)。可以看出, 所有算法都表现了出色的性能 (所有算法的得分均超过 90), 其中, DT 的得分 (93) 低于 ANN (97)、ET (96)、KNN (96.5) 和 RF (98) 的得分。

为了验证算法在逆向设计中的有效性, 论文从测试集中随机选择一个透射谱, 并将其输入到由机器学习算法训练的模型中。通过机器学习算法预测的结构参数 (μ_{c1} , μ_{c2} , μ_{c3} 和 μ_{c4}) 和其对应的实际结构参数值如图 3-7 (d) 所示, 预测的化学势 μ_{c1} , μ_{c2} , μ_{c3} 和 μ_{c4} 接近 GM 结构中的实际化学势值 (红色虚线), 充分证明了算法模型的有效性, 其具体数值可见表 3-4。可以看出, 通过 5 种机器学习方法训练的逆向模型在 GM 结构参数的预测中非常有效, 与原结构参数 ($\mu_{c1}=0.7\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.15\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.6\text{eV}$) 的误差均不超过 0.02eV , 进一步证实了逆向设计模型的有效性。

论文还使用逆向设计模型预测的化学势来基于 FDTD 方法仿真了 GM 结构的透射谱。如图 3-7 (c) 所示, 以五种机器学习算法所预测的结构参数为输入, 通过 FDTD 方法仿真得到的 GM 结构的透射谱与选取的原透射谱非常吻合。

同时, 论文对比了各种算法的效率和准确率, 它们的运行时间和得分值的具体数值如表 3-5 所示。可以看出, ANN 训练时间成本最高, RF 等算法的训练时间 (6.3 秒) 比 ANN 的训练时间 (35 秒) 短很多, 从而可以进一步提高逆向设计的效率。图 3-7 (b) - (d) 中的结果表明, 在 GM 结构的逆向设计中, 综合效率和准确率考虑, ANN 并不是最佳选择, RF 在准确率和效率上都优于 ANN。

表 3-4 机器学习算法逆向预测 GM 结构参数的数值

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ |
|-----|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| ANN | 0.6856 | 0.5093 | 0.1592 | 0.6152 |
| KNN | 0.6905 | 0.5112 | 0.1489 | 0.6027 |
| RF | 0.7010 | 0.5 | 0.1595 | 0.6 |
| ET | 0.6988 | 0.4891 | 0.1503 | 0.6 |
| DT | 0.7021 | 0.4805 | 0.1672 | 0.5921 |

和 GM 结构的透射谱的正向预测类似, 论文考虑了五种逆向设计算法的收敛稳定性和运行时间的关系, 如图 3-8 (a) 和 (b) 所示, 在使用相同数量的数据集 (22000 组) 的情况下, 五种机器学习算法的得分在各自的运行时间内都趋于收敛, 进一步说明了五种算法在 GM 结构的逆向设计中的有效性。

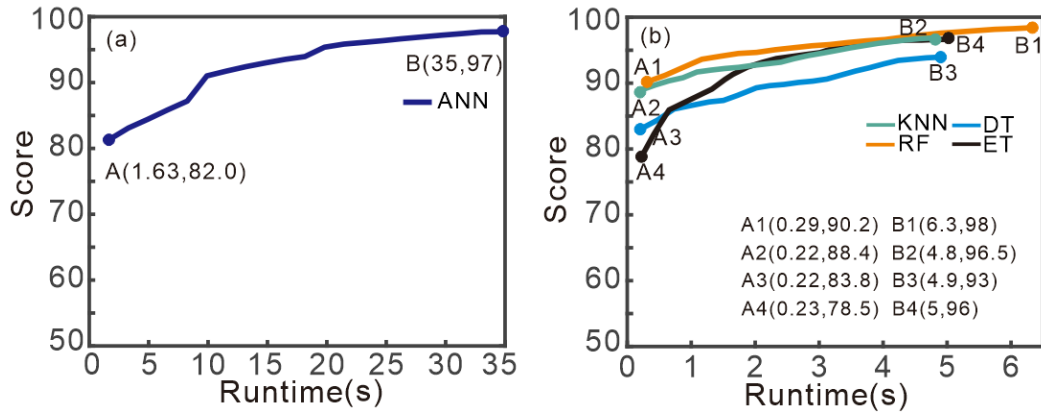


图 3-8 逆向设计中算法收敛性与运行时间的关系 (a) ANN (b) KNN、DT、RF 和 ET

尽管对于 GM 的逆向设计，RF 的性能优于 ANN，但这并不意味着 RF 就是光子学器件逆向设计中的更好选择。机器学习算法的选择通常取决于具体应用场景。ANN，特别是对于深度学习，在较为复杂的光子学器件的设计中可能更为有效。但是对于不太复杂的器件，例如包含少量结构参数（参数数量 <15 ）的光子学器件的逆向设计，ANN 可能就不是最佳选择。与以前的基于 ANN 的设计方法相比，论文提出的方案提供了一种更简单省时的光子学器件的设计方法。

表 3-5 逆向设计中各算法的运行时间和得分情况

| 机器学习算法 | 运行时间 | 得分 |
|--------|------|------|
| ANN | 35s | 97 |
| DT | 4.9s | 93 |
| ET | 5s | 96 |
| KNN | 4.8s | 96.5 |
| RF | 6.3s | 98 |

3.5 本章小结

本章针对 GM 结构的仿真透射谱分析及利用机器学习算法对 GM 结构的透射谱预测和逆向设计展开了研究。首先提出了由双层 GNRs 构成的 GM 结构，并利用 FDTD 方法对透射谱进行了仿真分析，对 PIT 效应进行了分析解释。接下来说明了使用机器学习算法代替 FDTD Solutions 仿真的必要性，并利用多种机器学习算法进行了透射谱的预测和逆向设计。最后，得到各机器学习算法在 GM 结构透射谱的预测和逆向设计中的结果，并从算法运行时间和准确率两方面进行了评估，最终得出结论：与 ANN 相比，RF 综合考虑了训练成本和准确率，是完成对所提出的 GM 结构的透射谱预测和逆向设计的一种更合适的方法。

第四章 基于演进类算法的优化研究

一般来说, GM 的透射谱的性能优化可分为两类: 完整透射谱的优化和性能指标(例如, 透射率或带宽)的优化。一方面, 类似于逆向设计, 对于特定透射谱整体优化, 得到精确的结构参数值。另一方面, 可以适当地优化透射谱的性能指标, 例如在给定波长下的透射率或透明窗口的带宽等。在本章中, 尝试使用进化算法对 GM 结构的透射谱进行单、多目标优化, 并说明利用演进类算法对 GM 结构优化的过程, 最后对其结果进行分析并得出结论。

4.1 利用演进类算法对 GM 结构透射谱的单目标优化

对于单目标优化问题, 论文考虑如何能在给定任意初始结构参数(μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 、 μ_{c4})的情况下, 优化得到特定透射谱所对应的结构参数。本节将以一个特定的透射谱为目标, 对任意初始透射谱进行优化, 优化目标为与特定透射谱的距离, 该优化目标的最佳值为 0。本节利用常见的演进类算法如 GA、QGA 和 PSO 对 GM 结构的透射谱进行单目标优化。

4.1.1 利用 GA 对 GM 结构透射谱的优化

论文利用 FDTD Solutions 对 GM 结构进行仿真, 得到其透射谱, 并通过 GA 对 GM 的透射谱进行单目标优化。GA 的具体实施是利用 FDTD Solutions 连接 Matlab 实现的, 通过编写 FDTD Solutions 中的 lsf 脚本控制 Matlab 进行计算, 从而完成 GA 在 GM 结构透射谱优化中的实现。

利用 GA 对 GM 结构的透射谱进行单目标优化, 单目标优化指的是优化目标唯一, 论文的优化目标是与 GM 结构的特定透射谱的距离, 这里将透射谱量化为 200 个透射率值。将距离定义为与 GM 结构的特定透射谱之差的绝对值之和, 其函数形式如式(4-1)所示, $N=200$ 代表随机采样点的个数, y_{true_i} 代表目标透射谱的离散点的数值, y_{fdd_i} 代表以每个个体值作为输入, 经过 FDTD Solutions 仿真后的透射率数值。理论上来说, FIT 的最大值为 0, 代表优化后的透射谱与目标透射谱完全一致。

$$FIT = -\sum_{i=0}^N |y_{true_i} - y_{fdd_i}| \quad (4-1)$$

初始种群规模设为 50, 即有 50 个种群。每个种群中的个体数量设为 50, 每个个体均为四维向量, 分别代表 GM 结构的 4 个化学势 μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4} 。将 GA 的最大迭代次数设置为 50, 即通过 50 次选择、交叉和变异操作最终得到使 FIT 值最大的 GM 结构的透射谱和对应的结构参数。其整体思路如图 4-1 所示:

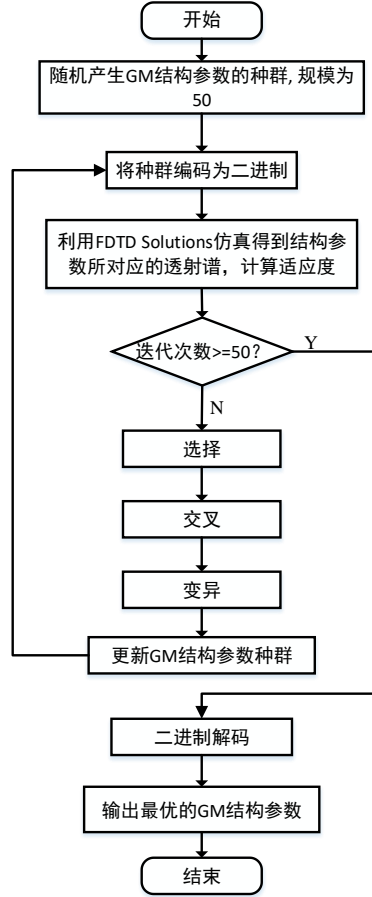


图 4-1 GA 优化思路流程图

下面详细介绍利用 GA 对 GM 结构的透射谱优化的具体细节。

(1) 初始化种群

随机产生 GM 结构参数种群，每个种群中的个体数量 $NIND=50$ ，每个个体记为 X_i ，均为 4 维向量， $X_i^{(j)}$ 表示种群中第 i 个个体的第 j 个维度。个体的 4 个维度的取值范围分别为 $0.6 < X_i^{(1)} < 0.8$ 、 $0.4 < X_i^{(2)} < 0.6$ 、 $0.05 < X_i^{(3)} < 0.25$ 和 $0.6 < X_i^{(4)} < 0.8$ 。利用 Matlab 中的 *rand* 函数随机初始化种群，每个种群被随机化为 50 行 4 列的矩阵，如式 (4-2) 所示， $Chrom_x$ 为初始化的 50×4 的十进制矩阵，每个行向量均代表了一组 GM 的结构参数。

$$Chrom_x = \begin{pmatrix} 0.6251 & 0.5127 & 0.0844 & 0.7324 \\ 0.7716 & 0.4381 & 0.1536 & 0.7516 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0.7395 & 0.5561 & 0.2103 & 0.7505 \\ 0.6874 & 0.5043 & 0.2322 & 0.6484 \end{pmatrix} \quad (4-2)$$

(2) 二进制编码

为了方便 GA 中的选择、交叉和变异操作，将该种群由十进制转换为二进制。二进制的长度决定了种群更新的效率和精度，长度越长，精度越高，但也会带来更高的计算成本，反之同理。论文将二进制的长度设置为 20，通过模 2 取余的

方式得到其二进制矩阵 $Chrom_b$ ，如式（4-3）所示，每个二进制数的长度均为 20。

$$Chrom_b = \begin{pmatrix} 0.10\cdots00 & 0.10\cdots00 & 0.00\cdots11 & 0.10\cdots01 \\ 0.11\cdots00 & 0.01\cdots01 & 0.00\cdots01 & 0.11\cdots01 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0.10\cdots11 & 0.10\cdots01 & 0.00\cdots11 & 0.11\cdots00 \\ 0.10\cdots10 & 0.10\cdots00 & 0.00\cdots11 & 0.10\cdots00 \end{pmatrix} \quad (4-3)$$

（3）适应度计算

将种群中的个体即 $Chrom_b$ 中的行向量作为 GM 结构的 4 个化学势，通过 FDTD Solutions 对 GM 结构进行仿真，通过式（4-1）计算出其适应度（ FIT ）， FIT 越大，代表更优的解，理论上 FIT 的最大值为 0，即优化后能完全复原目标透射谱。

（4）选择

适应度评价之后进行遗传操作，即选择、交叉和变异以产生新的种群。选择操作是从上一代按照某些策略选择个体组成下一代，这些策略主要包括随机竞争、轮盘赌和均匀排序等。这里采用轮盘赌策略，即个体被选中的概率与其适应度值成正比，如式（4-4）所示， P_i 代表个体 X_i 被选择的概率， $FIT(X_i)$ 代表个体 X_i 的适应度值， P_i 越大， X_i 被选入下一代的概率就越高。

$$P_i = \frac{FIT(X_i)}{\sum_{i=1}^{NIND} FIT(X_i)} \quad (4-4)$$

（5）交叉

交叉指的是两个个体二进制串的互换，论文实现了相邻个体的单点交叉，将交叉概率设置为 0.8，利用 $rand(0,1)$ 产生 0 和 1 之间的随机数 r ，如果 $0 < r < 0.8$ 则进行交叉操作，否则不进行交叉。由于个体的二进制串的长度为 20，利用 $rand(0,20)$ 产生 0 到 20 的随机数 s ，代表相邻个体的交叉位置。即从 s 位置开始进行相邻个体的二进制串的互换。

（6）变异

变异是按一定概率使得个体二进制串中的 01 字符发生突变，论文设置的变异概率为 0.1，即每个二进制位有 10% 的概率由 0（1）跳变到 1（0），变异操作可以有效防止 GA 陷入局部最优解。

（7）种群更新与迭代

经过步骤（4）-（6），初始种群进化为了新的种群，新的种群重复上述选择、交叉和变异过程，在算法有效的情况下，经过不断的迭代，适应度值将不断趋近于 0，GA 的终止条件为迭代次数达到 50。

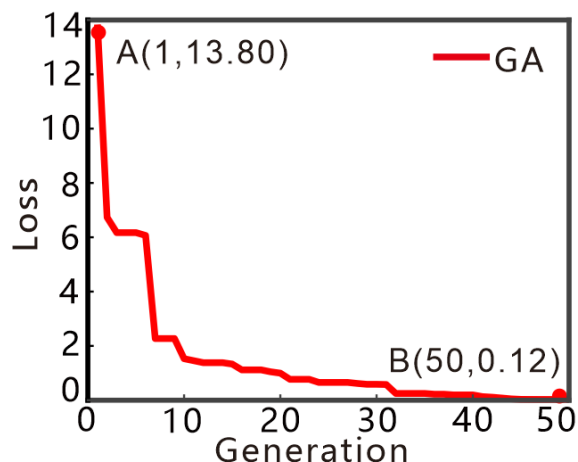


图 4-2 GA 优化过程中迭代次数与误差的关系曲线

GA 经过 50 次迭代后，其误差与迭代次数的关系如图 4-2 所示，Generation 表示 GA 的迭代次数，Loss 表示 GA 优化过程中每代种群中最优个体对应的透射谱与目标透射谱的误差值，定义为 $\text{Loss} = -\text{FIT}(X_i)$ ，即适应度越大，误差值越小。从图 4-2 中 A、B 两点的坐标可以看到，经过 50 次迭代后，Loss 由 13.80 逐渐降低到了 0.12，充分说明了 GA 在 GM 结构透射谱的单目标优化中的有效性。

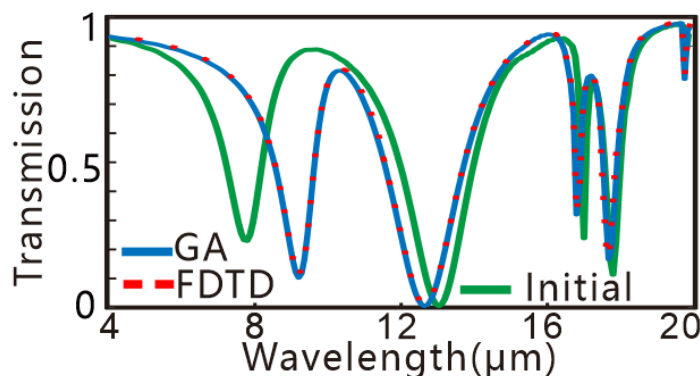


图 4-3 GA 优化前后 GM 结构的透射谱对比图

如图 4-3 所示，横坐标 (Wavelength) 为波长，纵坐标 (Transmission) 为 GM 结构在给定波长范围内对入射光的透射率。绿色实线 (图中 Initial) 代表初始的 GM 结构透射谱，对应的结构参数 (μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4}) 是在参数范围内随机生成的。经过 GA 的 50 次迭代，优化后的 GM 结构透射谱 (蓝色实线) 与目标透射谱 (红色虚线) 非常吻合，充分证明了 GA 在 GM 结构透射谱优化中的有效性。绿色实线向蓝色实线的移动过程代表了 GA 对 GM 结构透射谱的优化过程，经过 GA 优化后，由随机初始化透射谱高精度 ($\text{Loss} < 0.13$) 近似得到了目标透射谱。

表 4-1 GA 优化过程中部分迭代数据

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ | Loss |
|--------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|---------|
| 第 1 代 | 0.6815 | 0.4887 | 0.1564 | 0.4685 | 13.8001 |
| 第 2 代 | 0.6935 | 0.5034 | 0.1535 | 0.4717 | 6.7083 |
| 第 3 代 | 0.6935 | 0.5034 | 0.1535 | 0.4782 | 6.1458 |
| 第 4 代 | 0.6935 | 0.5034 | 0.1535 | 0.4782 | 6.1458 |
| 第 5 代 | 0.7099 | 0.5028 | 0.1536 | 0.4967 | 6.0426 |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| 第 49 代 | 0.6997 | 0.5005 | 0.1499 | 0.5012 | 0.1203 |
| 第 50 代 | 0.6997 | 0.5005 | 0.1499 | 0.5001 | 0.1201 |

表 4-1 显示了 GM 的结构参数和对应透射谱与目标透射谱的误差随 GA 迭代次数的变化情况。由表 4-1 中的前五列可以看到，GM 的结构参数由初始化值（ $\mu_{c1}=0.6815\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.4887\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.1564\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.4685\text{eV}$ ）经过 GA 迭代 50 次优化后得到了最优的 GM 结构参数值（ $\mu_{c1}=0.6997\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5005\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.1499\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.5001\text{eV}$ ）。这里应该注意的是，和优化目标 Loss 不同，GM 的 4 个结构参数与目标结构参数的差值在优化过程中并不是单调递减的，这主要是算法在迭代过程中陷入了局部最优而导致的，经过 GA 的 50 次迭代后，优化后的结构参数不断向目标结构参数靠近，跳出了局部最优，说明了 GA 中变异操作的有效性。如表 4-2 所示，优化后的 GM 结构参数与目标结构参数的误差均不超过 0.0005eV，充分说明了利用 GA 进行透射谱优化的精确性。

表 4-2 GA 优化后的 GM 结构参数与目标结构参数的对比

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ |
|----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 目标结构参数 | 0.7000 | 0.5000 | 0.1500 | 0.5000 |
| 优化后的结构参数 | 0.6997 | 0.5005 | 0.1499 | 0.5001 |
| 误差 | 0.0003 | 0.0005 | 0.0001 | 0.0001 |

4.1.2 利用 QGA 对 GM 结构透射谱的优化

QGA 的优化思路与 GA 相似，不同点在于 QGA 在遗传步骤中（包括选择、交叉和变异）的操作不是直接对个体操作，而是由量子门替代。在论文中，利用 QGA 对 GM 结构透射谱的优化由 FDTD Solutions 中的 Isf 脚本连接 Matlab 编程实现的，其具体流程如下：

（1）初始化种群

随机产生 GM 结构参数种群，每个种群中的个体数量设置为 $NIND=50$ ，与 GA 不同的是，QGA 种群中的个体是由量子位 φ 表示的，具体形式如下：

$$\varphi = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (4-5)$$

QGA 产生初始化种群时，首先构造一个 $2 \times NIND$ 行，20 列的矩阵，记为 *chrom*，20 代表二进制串的长度。在此，*chrom* 为一个 100×20 的矩阵，所有元素的初始值全都设为 $1/\sqrt{2}$ 。这代表初始种群中每个量子位的 α 和 β 的初始值均为 $1/\sqrt{2}$ 。

(2) 二进制编码

利用 Matlab 中的 *rand* 函数产生 0 到 1 之间的随机数，记为 *pick*，比较 *pick* 和 *chrom* 中元素平方的大小，如果 *pick* 较大，则将 *chrom* 中对应的元素置为 1，反之则置为 0。经过此步骤将 *chrom* 矩阵转化为一个随机二进制矩阵。

(3) 适应度计算

QGA 优化中的适应度与 GA 相同，都定义为与目标透射谱之间的距离。将 *chrom* 矩阵转换为随机参数矩阵，该矩阵每行都代表一个个体，每个个体记为 X_i ，均为 4 维向量， $X_i^{(j)}$ 表示种群中第 i 个个体的第 j 个维度。个体的 4 个维度的取值范围分别为 $0.6 < X_i^{(1)} < 0.8$ 、 $0.4 < X_i^{(2)} < 0.6$ 、 $0.05 < X_i^{(3)} < 0.25$ 和 $0.6 < X_i^{(4)} < 0.8$ 。将每个个体的取值作为 GM 的结构参数，通过 FDTD Solutions 对 GM 结构进行仿真，利用式 (4-1) 计算出其适应度值。

(4) 进化

QGA 不同于传统的 GA，每个个体的取值不是确定的数值，而是通过概率幅表示。由于每个个体均处于量子叠加态，所以在进化操作中与传统 GA 的选择、交叉和变异有很大不同。在 QGA 中，进化操作统一使用量子旋转门来对个体取值的概率幅进行改变。具体操作如式 (4-6) 所示：

$$\begin{bmatrix} \alpha'_i \\ \beta'_i \end{bmatrix} = U_i \begin{bmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \end{bmatrix} \quad (4-6)$$

其中 $[\alpha_i, \beta_i]$ 代表第 i 个量子位， $[\alpha'_i, \beta'_i]$ 代表由量子旋转门更新后的第 i 个量子位。 U_i 代表量子旋转门，论文中 U_i 的具体形式如 (4-7) 所示。

$$U_i = \begin{bmatrix} \cos\theta_i & -\sin\theta_i \\ \sin\theta_i & \cos\theta_i \end{bmatrix} \quad (4-7)$$

U_i 是一个 2 维方阵，其中 θ_i 代表量子位旋转角。 θ_i 的大小与符号在量子门旋转操作中起到了决定性作用。如图 4-4 所示， θ_i 的大小决定了 QGA 的收敛速度， θ_i 过小会导致算法耗时长，收敛速度慢； θ_i 过大会使得算法提前陷入局部最优解，导致全局搜索能力较差。 θ_i 的正负将决定量子门的旋转方向，如果 θ_i 为正，当量子比特位于第一三象限时，将提高其为量子态 1 的概率；如果量子比特位于第二四象限，将提高其为量子态 0 的概率。

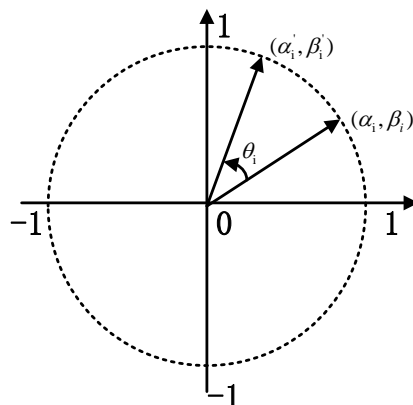


图 4-4 量子位旋转角示意图

在量子门旋转操作中,根据每个个体的适应度与种群中当前最优个体适应度大小的比较得到旋转角的大小及方向。与传统 GA 相似,在 QGA 中同样也采用了量子变异的操作保证了种群的多样性,防止 QGA 陷入局部最优解。生成的新种群重复遗传操作,在算法有效的情况下,经过不断的迭代,适应度值将逐渐趋近于 0。论文将 QGA 算法迭代次数设置为 100。

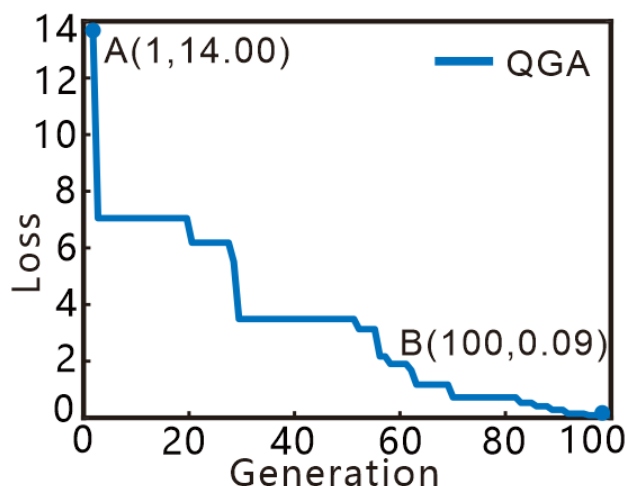


图 4-5 QGA 优化过程中迭代次数与误差的关系曲线

QGA 经过 100 次迭代后,其误差与迭代次数的关系如图 4-5 所示,其中, **Generation** 表示 QGA 的迭代次数, **Loss** 表示 QGA 优化过程中每代种群中最优个体对应透射谱的误差值,定义为 $\text{Loss} = -\text{FIT}(X_i)$,即适应度越大,误差值越小。从图 4-5 中 A、B 两点的坐标可以看到, QGA 经过 100 次迭代后, **Loss** 由 14.00 逐渐降低到了 0.09,充分说明了 QGA 在 GM 结构透射谱的单目标优化中的有效性。

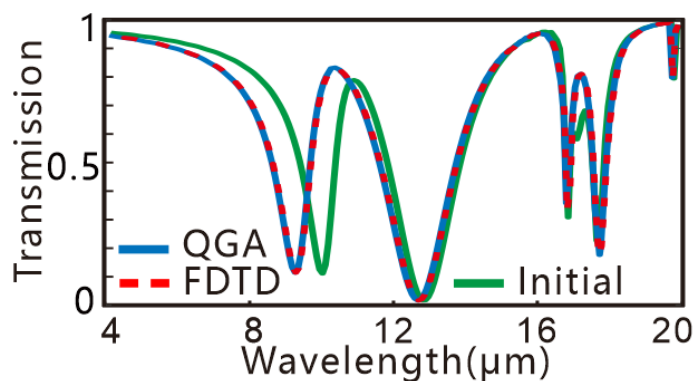


图 4-6 QGA 优化前后 GM 结构的透射谱对比图

如图 4-6 所示, 绿色实线 (图中 Initial) 代表初始的 GM 结构透射谱, 对应的结构参数 (μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4}) 是在参数范围内随机生成的。可以看到, 经过 QGA 的 100 次迭代后得到的 GM 结构透射谱 (蓝色实线) 与目标透射谱 (红色虚线) 非常吻合, 充分证明了 QGA 在 GM 结构透射谱优化中的有效性。经过 QGA 优化后, 由随机初始化透射谱高精度 ($\text{Loss} < 0.1$) 近似得到了目标透射谱。

表 4-3 QGA 优化过程中部分迭代数据

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ | Loss |
|---------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|---------|
| 第 1 代 | 0.7296 | 0.5072 | 0.1213 | 0.5149 | 14.0031 |
| 第 2 代 | 0.6162 | 0.5387 | 0.1453 | 0.5082 | 7.1024 |
| 第 3 代 | 0.6162 | 0.5387 | 0.1453 | 0.5082 | 7.1024 |
| 第 4 代 | 0.6162 | 0.5387 | 0.1453 | 0.5082 | 7.1024 |
| 第 5 代 | 0.6162 | 0.5387 | 0.1453 | 0.5082 | 7.1024 |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| 第 99 代 | 0.6998 | 0.5006 | 0.1500 | 0.5004 | 0.0941 |
| 第 100 代 | 0.6998 | 0.5006 | 0.1500 | 0.5004 | 0.0941 |

表 4-3 显示了 GM 的结构参数和 Loss (GM 结构透射谱与目标透射谱的差值) 随 QGA 迭代次数的变化情况。由表 4-3 中的前五列可以看到, GM 的结构参数由初始化值 ($\mu_{c1}=0.7296\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5072\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.1213\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.5149\text{eV}$) 经过 QGA 迭代 100 次优化后得到了最优 GM 结构参数值 ($\mu_{c1}=0.6998\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5006\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.1500\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.5004\text{eV}$)。结合表 4-3 和图 4-6 可以看到, 在 QGA 的优化过程中, Loss 在部分迭代次数区间内保持不变, 这主要是因为算法陷入了局部最优, QGA 中变异操作有效地解决了这一问题, 使得算法最终得到了全局最优解。如表 4-4 所示, 优化后的 GM 结构参数与目标结构参数的误差均不超过 0.0006eV , 充分说明了利用 QGA 对 GM 结构透射谱进行优化的精确性。

表 4-4 QGA 优化后的 GM 结构参数与目标结构参数对比

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ |
|----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 目标结构参数 | 0.7000 | 0.5000 | 0.1500 | 0.5000 |
| 优化后的结构参数 | 0.6998 | 0.5006 | 0.1500 | 0.5004 |
| 误差 | 0.0002 | 0.0006 | 0 | 0.0004 |

4.1.3 利用 PSO 对 GM 结构透射谱的优化

PSO 是常用的演进类优化算法之一，通过不断更新粒子群中粒子的位置和速度，从而得到问题的最优解。在论文中，利用 PSO 对 GM 结构透射谱的单目标优化由 FDTD Solutions 中的 Isf 脚本连接 Matlab 编程实现，其具体流程如下：

(1) 初始化粒子群

将粒子群规模设置为 50，每个粒子群中个体数也设置为 50。在 Matlab 中设置速度区间 $vlimit$ 和位置区间 $xlimit$ 。其中， $vlimit=[-1 \ 1;-1 \ 1;-1 \ 1;-1 \ 1]$ ， $xlimit=[0.6 \ 0.8;0.4 \ 0.6;0.05 \ 0.25;0.4 \ 0.6]$ 。利用 $repmat$ 函数和 $rand$ 函数随机生成速度空间 V 和位置空间 X ，均为 50×4 的矩阵，如式 (4-8) 所示。 X 中行向量代表每个粒子的 4 个维度， V 中行向量代表粒子的更新速度。

$$X = \begin{pmatrix} 0.7629 & 0.4195 & 0.0815 & 0.4284 \\ 0.7812 & 0.4557 & 0.2441 & 0.4844 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0.6254 & 0.5094 & 0.2414 & 0.5831 \\ 0.7265 & 0.5930 & 0.2101 & 0.5919 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 0.3115 & 0.5155 & 0.4121 & 0.6469 \\ -0.9286 & 0.4863 & -0.9363 & 0.3897 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0.6983 & -0.2155 & -0.4462 & -0.3658 \\ 0.3575 & -0.6576 & -0.8057 & -0.9311 \end{pmatrix} \quad (4-8)$$

(2) 适应度计算

将位置空间的行向量作为 GM 的结构参数，利用 FDTD Solutions 对 GM 结构进行仿真，通过式 (4-1) 计算出其适应度 (FIT)。粒子群中 FIT 最大的粒子称为个体极值，将历史种群中 FIT 最大的粒子称为历史最优解，通过不断比较历史最优解和当前个体极值从而得到全局最优解的取值。

(3) 位置和速度更新

利用式 (4-9) 更新位置空间和速度空间，式中 ω 称为惯性因子，该取值平衡了 PSO 的全局和局部的搜索能力。 ω 较小时，PSO 的全局搜索能力强，局部搜索能力较弱，较大时全局搜索能力弱，局部搜索能力强，论文设置 $\omega=0.8$ 。 C_1 和 C_2 称为加速常数，论文设置 $C_1=C_2=0.9$ 。 $random(0,1)$ 表示区间 $[0,1]$ 中的随机数， X_{id} 表示第 i 个变量第 d 维的位置。 V_{id} 表示第 i 个变量第 d 维的速度。 P_{id} 表示第 i 个极值的第 d 维， P_{gd} 表示全局最优解的第 d 维。

$$\begin{aligned} V_{id} &= \omega V_{id} + C_1 random(0,1)(P_{id} - X_{id}) + C_2 random(0,1)(P_{gd} - X_{id}) \\ X_{id} &= X_{id} + V_{id} \end{aligned} \quad (4-9)$$

(4) 终止条件

论文设置 PSO 算法的终止条件为达到算法迭代最大次数 50。

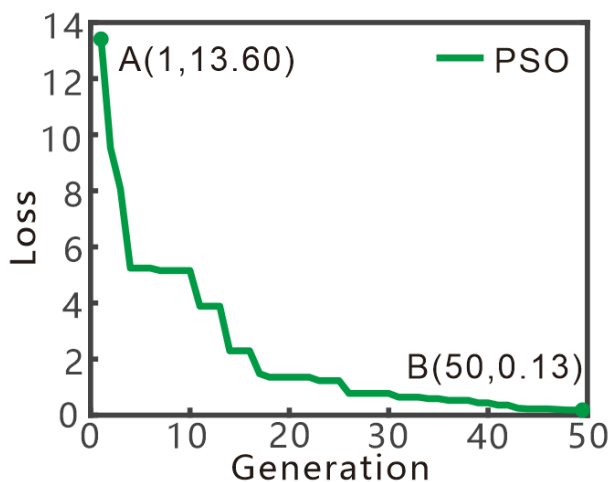


图 4-7 PSO 优化过程中迭代次数与误差曲线图

PSO 经过 50 次迭代后，其误差与迭代次数的关系如图 4-7 所示，其中，Generation 表示 PSO 的迭代次数，Loss 表示 PSO 优化过程中每代种群中最优个体对应的透射谱与目标透射谱的误差值。从图 4-7 中 A、B 两点的坐标可以看到，PSO 经过 50 次迭代后，Loss 由 13.60 逐渐降低到了 0.13，充分说明了 PSO 在 GM 结构透射谱的单目标优化中的有效性。

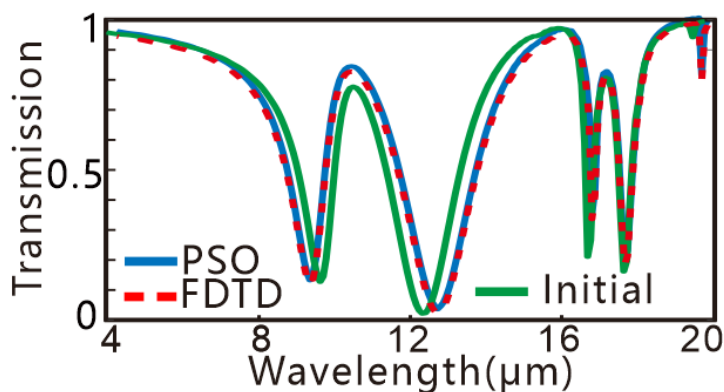


图 4-8 PSO 优化前后 GM 结构透射谱对比图

如图 4-8 所示，绿色实线（图中 Initial）代表初始的 GM 结构透射谱。可以看到，经过 PSO 的 50 次迭代后得到的 GM 结构透射谱（蓝色实线）与目标透射谱（红色虚线）非常吻合，充分证明了 PSO 在 GM 结构透射谱优化中的有效性。绿色实线向蓝色实线移动过程代表了 PSO 对 GM 结构透射谱的优化过程，经过 PSO 优化后，由随机初始化透射谱高精度 ($Loss < 0.14$) 近似得到了目标透射谱。

表 4-5 PSO 优化过程中部分迭代数据

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ | Loss |
|-------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|---------|
| 第 1 代 | 0.7138 | 0.4480 | 0.1517 | 0.4977 | 13.6003 |

续表 4-5 PSO 优化过程中部分迭代数据

| | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 第 2 代 | 0.6935 | 0.4613 | 0.1488 | 0.4965 | 9.4809 |
| 第 3 代 | 0.6942 | 0.4741 | 0.1487 | 0.4962 | 8.0269 |
| 第 4 代 | 0.6935 | 0.4792 | 0.1496 | 0.4960 | 5.1947 |
| 第 5 代 | 0.6935 | 0.4792 | 0.1496 | 0.4960 | 5.1947 |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| 第 49 代 | 0.7011 | 0.5003 | 0.1501 | 0.5001 | 0.1343 |
| 第 50 代 | 0.7011 | 0.5003 | 0.1501 | 0.5001 | 0.1343 |

表 4-5 显示了 GM 的结构参数和 Loss（GM 结构透射谱与目标透射谱的差值）随 PSO 迭代次数的变化情况。由表 4-5 中的前五列可以看到，GM 的结构参数由初始化值经过 PSO 迭代 50 次优化后得到了最优 GM 结构参数值（ $\mu_{c1}=0.7011\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5003\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.1501\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.5001\text{eV}$ ）。如表 4-6 所示，优化后的 GM 结构参数与目标结构参数的误差均不超过 0.0011eV，充分说明了利用 PSO 对 GM 结构透射谱进行优化的精确性。

表 4-6 PSO 优化后的 GM 结构参数与目标结构参数的对比

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ |
|----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 目标结构参数 | 0.7000 | 0.5000 | 0.1500 | 0.5000 |
| 优化后的结构参数 | 0.7011 | 0.5003 | 0.1501 | 0.5001 |
| 误差 | 0.0011 | 0.0003 | 0.0001 | 0.0001 |

4.1.4 单目标优化算法总结与对比

本节利用了 GA、QGA 和 PSO 三种演进类算法对 GM 结构的透射谱进行了单目标优化，优化目标为 GM 结构的特定透射谱。经过多次迭代后，三种优化算得到的 GM 结构透射谱与目标透射谱的差值分别降到了 0.12、0.09 和 0.13，说明了三种算法的有效性。从图 4-9（a）可以直观看出，经过优化后的 GM 结构参数与目标透射谱对应的结构参数（黑色虚线）非常接近，目标结构参数为： $\mu_{c1}=0.7\text{eV}$ 、 $\mu_{c2}=0.5\text{eV}$ 、 $\mu_{c3}=0.15\text{eV}$ 、 $\mu_{c4}=0.5\text{eV}$ 。三种算法优化后的结构参数具体数值如表 4-7 所示。三种算法优化后的 4 个 GM 结构参数与目标结构参数的误差分别不超过 0.011eV、0.006eV、0.001eV 和 0.004eV。直观地说明了三种算法的精确性。

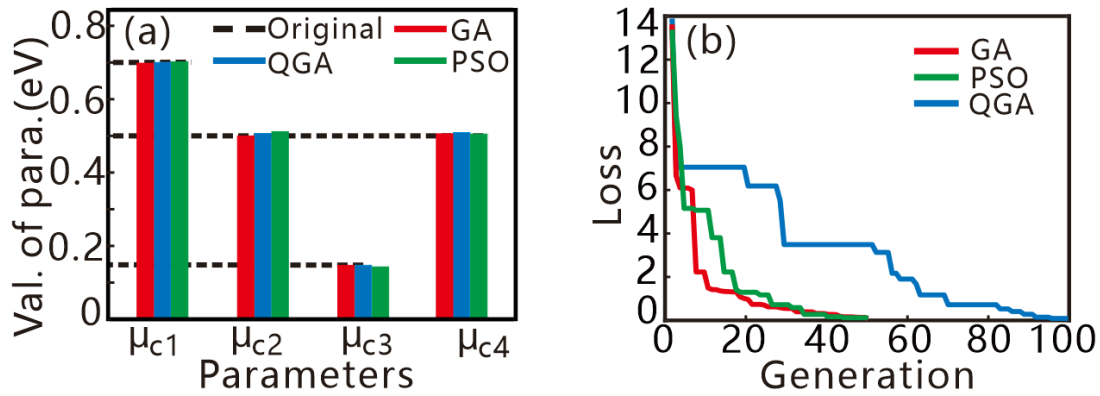


图 4-9 单目标优化算法对比 (a) 三种算法优化后的结构参数对比图 (b) 三种算法的迭代过程对比图

由图 4-9 (b) 结合表 4-7 可以看到, GA 和 PSO 在经过 50 次迭代后, 与目标透射谱的误差值 (Loss) 分别降到了 0.12 和 0.13, 在降到 0.09 的误差值条件下, QGA 需要迭代 100 次, 这与论文中 QGA 量子门的设计有关, 说明论文中设计的 QGA 全局搜索能力强, 但收敛速度较慢。对于 GA 和 PSO 来说, 在误差值占优的情况下, GA 的收敛速度更快。综合考虑优化精度和收敛速度, 在针对 GM 结构的单目标优化问题中, GA 是更合适的优化算法。

表 4-7 三种算法优化后的结构参数的对比

| | $\mu_{c1}(\text{eV})$ | $\mu_{c2}(\text{eV})$ | $\mu_{c3}(\text{eV})$ | $\mu_{c4}(\text{eV})$ | Loss |
|-----|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|------|
| GA | 0.6997 | 0.5005 | 0.1499 | 0.5001 | 0.12 |
| QGA | 0.6998 | 0.5006 | 0.1500 | 0.5004 | 0.09 |
| PSO | 0.7011 | 0.5003 | 0.1501 | 0.5001 | 0.13 |

4.2 利用 NSGA-II 对 GM 结构透射谱的多目标优化

在 GM 结构的透射谱中, PIT 效应的陡峭程度是一项非常关键的性能指标, 它会影响到带宽、群折射率和品质因数等指标, 并可以广泛应用于实现光开关和慢光器件等。为了获得陡峭的透射谱特性, 使得 PIT 效应中多波峰-波谷差足够大, 论文使用了多目标优化算法, 即 NSGA-II, 以优化 GM 透射谱的多波峰-波谷差, 目标是使波峰-波谷差值最大化。

多目标优化和单目标优化有很大不同。在单目标优化中, 目标函数单一, 存在一个全局最优解使得目标函数达到极值。而对于多目标优化而言, 存在多个目标函数, 由于目标之间的相互制约关系, 所以很难找到一个解使得所有的目标函数同时最优。因此, 对于多目标优化问题, 通常存在一个解集, 无法在改进任何目标函数的同时不削弱至少一个其他目标函数。该解集即为 Pareto 解集。论文使用的多目标优化算法 NSGA-II 也是基于 Pareto 最优解实现。与其他多目标优化

算法相比, NSGA-II 基于快速非支配排序方法和精英策略寻找最优解决方案。在 NSGA-II 中, 将个体的拥挤距离和快速非支配排序方法计算的个体的水平结合起来, 共同确定个体的排序级别。对于所有目标函数而言, 较低级别的个体要优于较高级别的个体。利用 NSGA-II 进行多目标优化的算法流程具体如下:

(1) 种群生成

NSGA-II 初始种群的产生与 GA、QGA 和 PSO 相同。每个个体都包括七个结构参数, 分别为石墨烯带的化学势 (μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4}), 石墨烯带的占空比 (r_1 和 r_2) 以及上下两层 GNRs 之间的距离 d_g 。以上结构参数的初始范围为: $0.6\text{eV} < \mu_{c1} < 0.8\text{eV}$ 、 $0.4\text{eV} < \mu_{c2} < 0.6\text{eV}$ 、 $0.05\text{eV} < \mu_{c3} < 0.25\text{eV}$ 、 $0.6\text{eV} < \mu_{c4} < 0.8\text{eV}$ 、 $0.7 < r_1 < 0.9$ 、 $0.7 < r_2 < 0.9$ 以及 $100\text{ nm} < d_g < 300\text{ nm}$ 。

(2) 适应度定义

对于 NSGA-II 而言, 适应度被定义为透射谱中波峰和波谷的差异值。对于出现单透明度窗口的透射谱, 适应度被定义为透射峰和谷之间的两个差异值。对于出现双透明度窗口的透射谱, 适应度被定义为透射峰和谷之间的四个差异值。如图 4-10 所示, 以双透明度窗口的透射谱为例, 适应度被定义为图中波峰 (A 和 D) 与波谷 (B、C、E 和 F) 的差异值。即目标函数数量为 4 个, 分别为 d_1 、 d_2 、 d_3 和 d_4 。优化目标是使该 4 个值最大化。同理, 对于单透明度窗口的透射谱而言, 目标函数为两个。

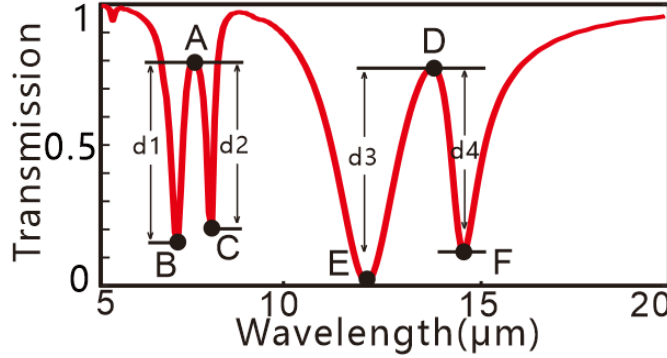


图 4-10 多目标优化的适应度示意图

(3) 种群分级

NSGA-II 在进行遗传操作之前利用非支配排序对种群进行了分层, 具体是根据个体之间的支配关系进行了分层, 这是与传统 GA 最大的区别。个体之间的支配关系是指个体的多个适应度大小关系。以两个透明度窗口的透射谱为例, 对于最大化波峰-波谷问题, 4 个目标分量 (d_1 、 d_2 、 d_3 和 d_4) 组成的向量 $d(x) = (d_1(x), d_2(x), d_3(x), d_4(x))$, 给定两个决策变量 x_u 和 x_v 。这里, 决策变量指的是 GM 的 7 个结构参数。当对于任意的目标分量, 均有 $d_n(x_u) > d_n(x_v)$, n 的取值范围为 1 到 4, 则 x_u 支配 x_v 。在支配关系中处于主动地位的决策变量被分配到种群中的较低层, 反之则被分配到较高层。同时, 为相同层次的个体计算了拥挤距离, 来保证

保持种群的多样性。种群中的个体根据其层次和拥挤距离进行排序，从而完成种群分级。

(4) 通过遗传操作构建新种群

NSGA-II 的新种群的生成过程与传统 GA 相似，即都经过选择、交叉和变异的过程。新种群中的个体将被迁移到旧种群中以构建一个更大的种群。根据快速非支配排序方法和拥挤距离对规模更大的种群中的个体进行分类。最后，根据精英策略，选择个体以生成新种群用于下一次迭代。

(5) 评估种群

对于 NSGA-II 新产生的种群的评估类似于 GA 和 PSO。论文选择 Pareto 解集中的最优个体作为 NSGA-II 算法针对多目标优化问题的解。

经过 100 次迭代后，GM 结构的透射谱如图 4-11 所示。图 4-11 (a) 和图 4-11 (b) 分别显示了单透明度窗口和双透明度窗口的多目标优化结果。图中蓝色虚线为随机初始化的 GM 结构透射谱，红色实线为经过 NSGA-II 优化后的透射谱。从图中可以看出，经过优化后的 GM 结构透射谱的透明度窗口波峰-波谷差值明显增加，直观地证明了 NSGA-II 算法的有效性。

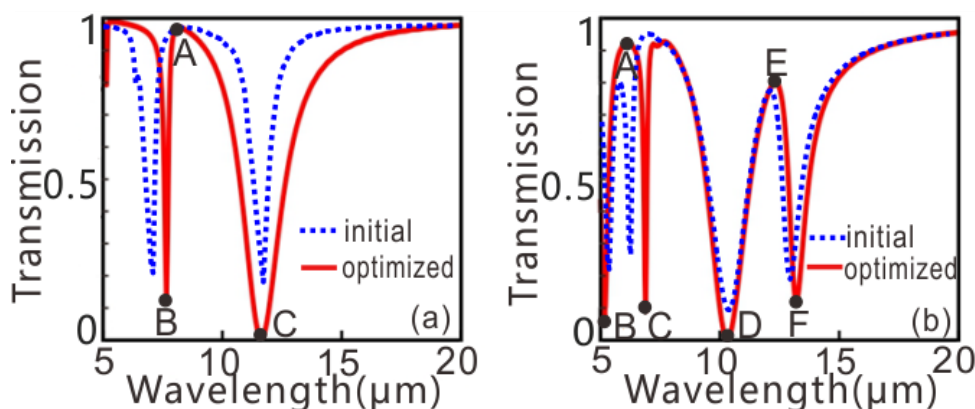


图 4-11 GM 结构透射谱的多目标优化结果 (a) 单透明度窗口的优化结果 (b) 双透明度窗口的优化结果

对于单透明度窗口的透射谱而言，如图 4-11 (a) 所示，透射谱的波谷 (B, 7659 nm) -波峰 (A, 8161 nm) -波谷 (C, 11620 nm) 之间的两个差值分别达到 0.86 和 0.97。对于双透明度窗口的透射谱而言如图 4-11 (b) 所示，波谷 (B, 5150 nm) -波峰 (A, 6110 nm) -波谷 (C, 6890 nm) -波谷 (D, 12620 nm) -波峰 (E, 10310 nm) -波谷 (F, 13220 nm) 之间的差值达到 0.87、0.83、0.79 和 0.69。波峰和波谷点的具体数值如表 4-8 所示。理论而言，透射谱的峰-谷差最大值为 1，对于 GM 结构透射谱的多目标优化中，PIT 透明度窗口的峰-谷差值经过优化后都接近 1，说明了 NSGA-II 在 GM 结构的多目标优化中非常有效。多目标

优化后的透射谱获得了更加陡峭的光学特性,可广泛用于实现光开关和慢光器件等。

表 4-8 NSGA-II 优化后各点透射率值

| | A | B | C | D | E | F |
|--------|------|------|------|------|------|------|
| 单透明度窗口 | 0.98 | 0.12 | 0.01 | - | - | - |
| 双透明度窗口 | 0.93 | 0.06 | 0.10 | 0.02 | 0.81 | 0.12 |

4.3 本章小结

本章针对 GM 的透射谱的单、多目标优化展开了研究,针对 GM 透射谱的单目标优化,利用了 GA、QGA 和 PSO 三种演进类算法,优化后与目标透射谱的误差值分别降为了 0.12、0.09 和 0.13。对于 GM 透射谱的多目标优化而言,利用 NSGA-II 优化后,单透明度窗口(双透明度窗口)的峰-谷差值达到了 0.86 和 0.97 (0.87、0.83、0.79 和 0.69),接近于理想值 1,有效优化了透射谱中 PIT 效应的陡峭程度。本章最终得到了一个针对 GM 结构透射谱优化问题的全面且简单的解决方案。

第五章 总结

论文围绕所设计的由 GNRs 构成的 GM 结构，利用 FDTD 方法对其透射谱进行了仿真，利用传输矩阵方法对透射谱中出现的 PIT 效应进行了分析，同时对 GM 的结构参数对于透射谱的影响作了分析和解释。针对 GM 结构利用 FDTD 方法的仿真时间成本过高的问题，论文提出将多种机器学习方法引入到 GM 结构透射谱的预测中来，以代替 FDTD 仿真方法。论文梳理了机器学习方法在光器件设计与优化中应用的发展历史，简述了现有的利用机器学习方法进行光器件透射谱的预测和优化方案，从算法和器件设计两方面说明了这些方案的优势和特色，同时从应用场景和创新性说明了这些方案发展前景广阔的必然性。较为复杂的光学结构的仿真往往需要大量的时间，大量重复或相似的仿真使时间成本急剧增加。将机器学习方法引入到光学结构的预测和优化中，在显著地降低仿真时间成本的同时保证了较高的准确率（与仿真结果对比），该方案可以使光子学器件的设计效率进一步提高。针对 GM 结构的透射谱优化问题，论文利用了四种演进类算法对单、多目标任务进行了优化和对比，四种算法在优化问题中的有效性都非常显著。下面总结论文的主要工作，包括以下几点：

（1）提出了由 GNRs 组成的 GM 结构，当平面光垂直入射时，可在石墨烯表面激发 SPP 模式。基于结构中模式的相互耦合作用，可在透射谱中形成 PIT 效应。论文利用了传输矩阵方法对 PIT 效应进行了理论分析，并验证其和仿真结果的一致性。通过调节 GM 的结构参数，实现了对 PIT 效应的动态调谐。

（2）针对 GM 结构利用 FDTD Solutions 仿真时间成本过高的问题，论文将多种机器学习算法引入到 GM 结构的正向透射谱预测和逆向设计中，具体包括 ANN、KNN、RF、DT 和 ET。论文利用 22000 组样本数据进行学习建模并对五种算法搭建的模型的效率和准确率进行了评估。结果表明，所有算法均表现优异，准确率均在 91% 以上，单次训练加预测时间均在 37s 以下。综合效率与准确率，与近年常用的 ANN 相比，RF 在 GM 结构的透射谱预测和逆向设计问题中更为有效。

（3）针对 GM 结构的透射谱优化问题，论文主要从单目标优化和多目标优化两方面对其展开了研究。针对单目标优化问题，论文利用了三种演进类算法 GA、QGA 和 PSO 以特定透射谱为优化目标进行优化。GA 和 PSO 经过 50 次迭代，与特定透射谱的误差值分别降到了 0.12 和 0.13，QGA 经过 100 次迭代后，误差值降到了 0.09。通过对比优化后的结构参数与实际结构参数，可以发现三种算法优化后的结构参数 (μ_{c1} 、 μ_{c2} 、 μ_{c3} 和 μ_{c4}) 与实际结构参数的误差均不超过 0.0011 eV，

从而证实了三种算法的有效性。针对多目标优化问题，由于 PIT 效应的陡峭程度是一项非常关键的性能指标，所以论文利用 NSGA-II 以 GM 结构透射谱中透明度窗口的峰谷差作为优化目标进行优化，经过多次迭代，单透明度窗口（双透明度窗口）的峰-谷差达到了 0.86 和 0.97（0.87、0.83、0.79 和 0.69），接近于理想值 1，有效地实现了陡峭的 PIT 效应，这一结果可广泛用于实现光开关和慢光器件等。

参考文献

- [1]周培基, 李智勇, 俞育德, 等. 硅基光子集成研究进展[J]. 物理学报, 2014, 63(10): 1-8.
- [2]K. A. Willets, R. V. Duyne. Localized surface plasmon resonance spectroscopy and sensing[J]. Annual Review of Physical Chemistry, 2007, 58: 267-297.
- [3]K. M. Mayer, J. Hafner. Localized surface plasmon resonance sensors[J]. Chemical Reviews, 2011, 111(6): 3828-3857.
- [4]H. A. Atwater, A. Polman. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. Nature Materials, 2010, 9(3): 205-213.
- [5]A. V. Zayats, I. Smolyaninov, A. A. Maradudin. Nano-optics of surface plasmon polaritons[J]. Physics Reports, 2005, 408(3-4): 131-134.
- [6]J. Homola, S. S. Yee, I. Koudela. Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison[J]. Sensors and Actuators B Chemical, 1999, 54(1-2): 16-24.
- [7]J. Homola. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species[J]. Chemical Reviews, 2008, 108(2): 462-493.
- [8]P. Berini, I. DeLeon. Surface plasmon-polariton amplifiers and lasers[J]. Nature Photonics, 2012, 6(1): 16-24.
- [9]E. Jin, X. Xu. Obtaining super resolution light spot using surface plasmon assisted sharp ridge nanoaperture[J]. Applied Physics Letters, 2005, 86(11): 11106.
- [10]D. K. Gramotnev, S. I. Bozhevolnyi. Plasmonics beyond the diffraction limit[J]. Nature Photonics, 2010, 4(2): 83-91.
- [11]A. B. Khanikaev, C. Wu, G. Shvets. Fano-resonant metamaterials and their applications[J]. Nanophotonics, 2013, 2(4): 247-264.
- [12]T. Zhang, J. Dai, Y. Dai, et al. Dynamically tunable plasmon induced absorption in graphene-assisted metallodielectric grating[J]. Optics Express, 2017, 25(21): 26221-26227.
- [13]R. D. Kekatpure, E. S. Barnard, W. Cai, et al. Phase-coupled plasmon-induced transparency[J]. Physical Review Letters, 2010, 104(24): 243902.
- [14]X. Han, T. Wang, X. Li, et al. Ultrafast and low-power dynamically tunable plasmon-induced transparencies in compact aperture-coupled rectangular resonators[J]. Journal of Lightwave Technology, 2015, 33(14): 3083-3090.

- [15] H. Li, L. Wang, J. Liu, et al. Investigation of the graphene based planar plasmonic filters[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 103(21): 211104.
- [16] X. Han, T. Wang, X. Li, et al. Dynamically tunable plasmon induced transparency in a graphene-based nanoribbon waveguide coupled with graphene rectangular resonators structure on sapphire substrate[J]. *Optics Express*, 2015, 23(25): 31945-31955.
- [17] H. Lu, X. Gan, D. Mao, et al. Graphene-supported manipulation of surface plasmon polaritons in metallic nanowaveguides[J]. *Photonics Research*, 2017, 5(3): 162-168.
- [18] L. Chen, T. Zhang, X. Li, et al. Novel hybrid plasmonic waveguide consisting of two identical dielectric nanowires symmetrically placed on each side of a thin metal film[J]. *Optics Express*, 2012, 20(18): 20535-20544.
- [19] Y. Zhu, X. Hu, H. Yang, et al. On-chip plasmon-induced transparency based on plasmonic coupled nanocavities[J]. *Scientific Reports*, 2014, 4: 3752-3760.
- [20] Z. Chai, X. Hu, Y. Zhu, et al. Ultracompact chip-integrated electromagnetically induced transparency in a single plasmonic composite nanocavity[J]. *Advanced Optical Materials*, 2014, 2(4): 320-325.
- [21] Z. Chai, X. Hu, H. Yang, et al. All-optical tunable on-chip plasmon-induced transparency based on two surface-plasmon-polaritons absorption[J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 108(15): 151104.
- [22] H. A. Haus. *Waves and fields in optoelectronics*[M]. Prentice-Hall, 1984, 68-75.
- [23] X. Han, T. Wang, B. Liu, et al. Tunable triple plasmon-induced transparencies in dual T-shaped cavities side-coupled waveguide[J]. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2016, 28(3): 347-350.
- [24] Z. Chen, L. Yu. Multiple Fano resonances based on different waveguide modes in a symmetry breaking plasmonic system[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2014, 6(6): 1-8.
- [25] S. Inampudi, H. Mosallaei. Neural network based design of metagratings[J]. *Applied Physics Letters*, 2018, 112(24): 241102.
- [26] L. F. Frellsen, Y. Ding, O. Sigmund, et al. Topology optimized mode multiplexing in silicon-on-insulator photonic wire waveguides[J]. *Optics Express*, 2016, 24(15): 16866-16873.
- [27] A. Y. Piggott, J. Lu, K. G. Lagoudakis, et al. Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer[J]. *Nature Photonics*, 2015, 9(6): 374-377.

- [28]B. Shen, P. Wang, R. Polson, et al. An integrated-nanophotonics polarization beamsplitter with $2.4 \times 2.4 \mu\text{m}^2$ footprint[J]. *Nature Photonics*, 2015, 9(6): 378-382.
- [29]Z. Yu, H. Cui, X. Sun. Genetic-algorithm-optimized wideband on-chip polarization rotator with an ultrasmall footprint[J]. *Optics Letters*, 2017, 42(16): 3093-3096.
- [30]J. C. Mak, C. Sideris, J. Jeong, et al. Binary particle swarm optimized 2×2 power splitters in a standard foundry silicon photonic platform[J]. *Optics Letters*, 2016, 41(16): 3868-3871.
- [31]Z. Lin, X. Liang, M. Lončar, et al. Cavity-enhanced second-harmonic generation via nonlinear-overlap optimization[J]. *Optica*, 2016, 3(3): 233-238.
- [32]T. W. Hughes, M. Minkov, I. A. Williamson, et al. Adjoint method and inverse design for nonlinear nanophotonic devices[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(12): 4781-4787.
- [33]Z. Yu, H. Cui, X. Sun. Genetically optimized on-chip wideband ultracompact reflectors and Fabry-Pérot cavities[J]. *Photonics Research*, 2017, 5(6): 15-19.
- [34]E. Bor, C. Babayigit, H. Kurt, et al. Directional invisibility by genetic optimization[J]. *Optics Letters*, 2018, 43(23): 5781-5784.
- [35]P. H. Fu, K. L. Lee, P. C. Tsai, et al. Optimization for gold nanostructure-based surface plasmon biosensors using a microgenetic algorithm[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(6): 2320-2327.
- [36]G. Carleo, M. Troyer. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks[J]. *Science*, 2017, 355(6325): 602-606.
- [37]J. Peurifoy, Y. Shen, L. Jing, et al. Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks[J]. *Science Advances*, 2018, 4(6): 4206-4217.
- [38]K. Kojima, B. Wang, U. Kamilov, et al. Acceleration of FDTD-based inverse design using a neural network approach[C]. *New Orleans: Integrated Photonics Research, Silicon and Nanophotonics*, 2017.
- [39]D. Liu, Y. Tan, E. Khoram, et al. Training deep neural networks for the inverse design of nanophotonic structures[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(4): 1365-1369.
- [40]M. H. Tahersima, K. Kojima, B. Wang, et al. Deep neural network inverse design of integrated nanophotonic devices[J]. *arXiv preprint arXiv: 1809.03555*, 2018.
- [41]W. Ma, F. Cheng, Y. Liu. Deep-learning enabled on-demand design of chiral metamaterials[J]. *ACS Nano*, 2018, 12(6): 6326-6334.
- [42]I. Malkiel, A. Nagler, M. Mrejen, et al. Deep learning for design and retrieval of nano-photonic structures[J]. *arXiv preprint arXiv: 1702.07949*, 2017.

- [43]R. Andrawis, M. Swillam, E. Gamal, et al. Artificial neural network modeling of plasmonic transmission lines[J]. *Applied Optics*, 2016, 55(10): 2780-2790.
- [44]M. Turduev, E. Bor, C. Latifoglu, et al. Ultra-compact photonic structure design for strong light confinement and coupling into nano-waveguide[J]. *Journal of Lightwave Technology*, 2018, 36(14): 2812-2819.
- [45]E. Bor, O. Alparslan, M. Turduev, et al. Integrated silicon photonic device design by attractor selection mechanism based on artificial neural networks: optical coupler and asymmetric light transmitter[J]. *Optics Express*, 2018, 26(22): 29032-29044.
- [46]S. X. Xia, X. Zhai, L. L. Wang, et al. Plasmonically induced transparency in double-layered graphene nanoribbons[J]. *Photonics Research*, 2018, 6(7): 692-702.
- [47]H. Li, C. Ji, Y. Ren, et al. Investigation of multiband plasmonic metamaterial perfect absorbers based on graphene ribbons by the phase-coupled method[J]. *Carbon*, 2019, 141: 481-487.
- [48]T. Zhang, J. Wang, Q. Liu, 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.
- [49]J. Schmidhuber. Deep learning in neural networks: an overview[J]. *Neural Networks*, 2015, 61: 85-117.
- [50]T. Young, D. Hazarika, S. Poria, et al. Recent trends in deep learning based natural language processing[J]. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, 2018, 13(3): 55-75.
- [51]G. Hinton, L. Deng, D. Yu, et al. Deep neural networks for acoustic modeling in speech recognition: the shared views of four research groups[J]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 2012, 29(6): 82-97.
- [52]M. Längkvist, L. Karlsson, A. Loutfi. A review of unsupervised feature learning and deep learning for time-series modeling[J]. *Pattern Recognition Letters*, 2014, 42(1): 11-24.
- [53]M. Bojarski, D. Testa, D. Dworakowski, et al. End to end learning for self-driving cars[J]. *arXiv preprint arXiv: 1604.07316*, 2016.
- [54]V. Mnih, K. Kavukcuoglu, D. Silver, et al. Playing atari with deep reinforcement learning[J]. *Scientific Research*, 2013, 7: 352-355.
- [55]S. Gu, E. Holly, T. Lillicrap, et al. Deep reinforcement learning for robotic manipulation with asynchronous off-policy updates[C]. *Singapore: IEEE International Conference on Robotics and Automation*, 2017.

- [56]I. Balin, V. Garmider, Y. Long, et al. Training artificial neural network for optimization of nanostructured VO₂-based smart window performance[J]. Optics Express, 2019, 27(16): 1030-1040.
- [57]A. M. Hammond, R. M. Camacho. Designing integrated photonic devices using artificial neural networks[J]. Optics Express, 2019, 27(21): 29620-29638.
- [58]D. Gostimirovic, N. Y. Winnie. An open-source artificial neural network model for polarization-insensitive silicon-on-insulator subwavelength grating couplers[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electron, 2019, 25(3): 825-831.
- [59]J. He, C. He, C. Zheng, et al. Plasmonic nanoparticle simulations and inverse design using machine learning[J]. Nanoscale, 2019, 11(37): 17444-17459.
- [60]S. An, C. Fowler, B. Zheng, et al. A deep learning approach for objective-driven all-dielectric metasurface design[J]. ACS Photonics, 2019, 6(12): 3196-3207.
- [61]C. C. Nadell, B. Huang, J. M. Malof, et al. Deep learning for accelerated all-dielectric metasurface design[J]. Optics Express, 2019, 20(27): 27523-27535.
- [62]J. Baxter, A. C. Lesina, J. M. Guay, et al. Plasmonic colours predicted by deep learning[J]. Scientific Reports, 2019, 9: 8074.
- [63]T. Asano, S. Noda. Optimization of photonic crystal nanocavities based on deep learning[J]. Optics Express, 2018, 26(25): 32704-32717.
- [64]T. Asano, S. Noda. Iterative optimization of photonic crystal nanocavity designs by using deep neural networks[J]. Nanophotonics, 2019, 12(8): 2243-2256.
- [65]Y. Li, Y. Xu, M. Jiang, et al. Self-learning perfect optical chirality via a deep neural network[J]. Physical Review Letters, 2019, 21(123): 213902.
- [66]X. Li, J. Shu, W. Gu, et al. Deep neural network for plasmonic sensor modeling[J]. Optics Express, 2019, 9(9): 3857-3862.
- [67]Y. Chen, J. Zhu, Y. Xie, et al. Smart inverse design of graphene-based photonic metamaterials by an adaptive artificial neural network[J]. Nanoscale, 2019, 11(19): 9749-9755.
- [68]L. Gao, X. Li, D. Liu, et al. A bidirectional deep neural network for accurate silicon color design[J]. Advanced Materials, 2019, 31(51): 165-176.
- [69]Y. Qu, L. Jing, Y. Shen, et al. Migrating knowledge between physical scenarios based on artificial neural networks[J]. ACS Photonics, 2019, 5(6): 1168-1174.
- [70]Z. Liu, D. Zhu, S. P. Rodrigues, et al. Generative model for the inverse design of metasurfaces[J]. Nano Letters, 2018, 10(18): 6570-6576.

- [71]J. Jiang, J. A. Fan. Simulator-based training of generative neural networks for the inverse design of metasurfaces[J]. *Nanophotonics*, 2019, 42(15): 387-392.
- [72]W. Ma, F. Cheng, Y. Xu, et al. Probabilistic representation and inverse design of metamaterials based on a deep generative model with semi-supervised learning strategy[J]. *Advanced Materials*, 2020, 35(31): 4825-4835.
- [73]J. Jiang, D. Sell, S. Hoyer, et al. Free-form diffractive metagrating design based on generative adversarial networks[J]. *ACS Nano*, 2019, 13(8): 8872-8878.
- [74]S. Molesky, Z. Lin, A. Y Piggott, et al. Inverse design in nanophotonics[J]. *Nature Photonics*, 2018, 12(11): 659-670.
- [75]T. W. Hughes, M. Minkov, Y. Shi, et al. Training of photonic neural networks through in situ backpropagation and gradient measurement[J]. *Optica*, 2018, 7(5): 864-871.
- [76]A. Y. Piggott, J. Lu, K. G. Lagoudakis, et al. Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer[J]. *Nature Photonics*, 2015, 6(9): 374-377.
- [77]N. M. Estakhri, B. Edwards, N. Engheta. Inverse-designed metastructures that solve equations[J]. *Science*, 2019, 6433(363): 1333-1338.
- [78]T. Zhang, J. Wang, Y. Dan, et al. Efficient training and design of photonic neural network through neuroevolution[J]. *Optics Express*, 2019, 27(26): 37150-37163.
- [79]S. D. Campbell, D. Sell, R. P. Jenkins, et al. Review of numerical optimization techniques for meta-device design[J]. *Optical Materials Express*, 2019, 9(4): 1842-1863.
- [80]J. Nagar, S. D. Campbell, Q. Ren, et al. Multi-objective optimization-aided metamaterials-by-design with application to highly directive nanodevices[J]. *IEEE Journal on Multiscale and Multiphysics Computational Techniques*, 2017, 2(63): 147-158.
- [81]A. V. Zayats, I. I. Smolyaninov, A. A. Maradudin. Nano-optics of surface plasmon polaritons[J]. *Physics Reports*, 2005, 408(3-4): 131-314.
- [82]M. Jablan, H. Buljan, M. Soljačić. Plasmonics in graphene at infrared frequencies[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(24): 245435.
- [83]T. Zhang, L. Chen, X. Li. Graphene-based tunable broadband hyperlens for far-field subdiffraction imaging at mid-infrared frequencies[J]. *Optics Express*, 2013, 21(18): 20888-20899.
- [84]A. Vakil, N. Engheta. Transformation optics using graphene[J]. *Science*, 2011, 332(6035): 1291-1294.

- [85]L. Ju, B. Geng, J. Horng, et al. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials[J]. *Nature Nanotechnology*, 2011, 6: 630-634.
- [86]M. A. Othman, C. Guclu, F. Capolino. Graphene-based tunable hyperbolic metamaterials and enhanced near-field absorption[J]. *Optics Express*, 2013, 21(6): 7614-7632 .
- [87]S. Xiao, T. Wang, T. Liu, et al. Active modulation of electromagnetically induced transparency analogue in terahertz hybrid metal-graphene metamaterials[J]. *Carbon*, 2018, 3(126): 271-278.
- [88]R. Alaei, M. Farhat, C. Rockstuhl, et al. A perfect absorber made of a graphene micro-ribbon metamaterial[J]. *Optics Express*, 2012, 20: 28017-28024.
- [89]D. Rodrigo, O. Limaj, D. Janner, et al. Mid-infrared plasmonic biosensing with graphene[J]. *Science*, 2015, 349(25): 165-168.
- [90]T. Zhang, L. Chen, B. Wang, et al. Tunable broadband plasmonic field enhancement on a graphene surface using a normal-incidence plane wave at mid-infrared frequencies[J]. *Scientific Reports*, 2015, 5:11195-11206.
- [91]A. Y. Nikitin, F. Guinea, F. J. García-Vidal, et al. Edge and waveguide terahertz surface plasmon modes in graphene microribbons[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(16): 161407.
- [92]T. Zhang, J. Zhou, J. Dai, et al. Plasmon induced absorption in a graphene-based nanoribbon waveguide system and its applications in logic gate and sensor[J]. *Journal of Physics D Applied Physics*, 2018, 51(5): 055103.
- [93]I. Sajedian, T. Badloe, R. Junsuk. Double-deep q-learning to increase the efficiency of metasurface holograms[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(42): 1-8.
- [94]A. Sakurai, K. Yada, T. Simomura, et al. Ultranarrow-band wavelength-selective thermal emission with aperiodic multilayered metamaterials designed by Bayesian optimization[J]. *ACS Central Science*, 2019, 5(2): 319-326.
- [95]D. Melati, Y. Grinberg , M. K. Dezfouli, et al. Mapping the global design space of nanophotonic components using machine learning pattern recognition[J]. *Nature Communications*, 2019, 10(36): 4775-4782.
- [96]K. Were, D. T. Bui, B. Dick, et al. A comparative assessment of support vector regression, artificial neural networks, and random forests for predicting and mapping soil organic carbon stocks across an afro-montane landscape[J]. *Ecological Indicators*, 2015, 52: 394-403.

- [97]A. Ahmad, M. Hassan, M. Abdullah, et al. A review on applications of ANN and SVM for building electrical energy consumption forecasting[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2014, 33(15): 102-109.
- [98]K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306(5696): 666-669.
- [99]H. W. Kroto, J. R. Heath, S. O'Brien, et al. C₆₀: buckminsterfullerene[J]. Nature, 1985, 318: 162-163.
- [100]S. Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. Nature, 1991, 354: 56-58.
- [101]A. K. Geim, K. S. Novoselov. The rise of graphene[J]. Nature Materials, 2007, 6: 183-191.
- [102]S. A. Mikhailov, K. Ziegler. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and the self-consistent-field effects[J]. Journal of Physics Condensed Matter, 2008, 20(38): 384204.
- [103]周学通. 基于石墨烯和双曲色散超材料的新型光学功能器件性能研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2016.
- [104]T. Zhang, X. Yin, L. Chen, et al. Ultra-compact polarization beam splitter utilizing a graphene-based asymmetrical directional coupler[J]. Optics Letters, 2016, 41(2): 356-359.
- [105]Z. Q. Li, E. A. Henriksen, Z. Jiang, et al. Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy[J]. Nature Physics, 2008, 4(10): 532-535.
- [106]C. Zeng, J. Guo, X. Liu. High-contrast electro-optic modulation of spatial light induced by graphene-integrated Fabry-Pérot microcavity[J]. Applied Physics Letters, 2014, 105: 121103.
- [107]T. Zhang, J. Dai, Y. Dai, et al. Tunable plasmon induced transparency in a metallodielectric grating coupled with graphene metamaterials[J]. Journal of Lightwave Technology, 2017, 35(23): 5142-5149.
- [108]L. Du, D. Tang, X. Yuan. Edge-reflection phase directed plasmonic resonances on graphene nano-structures[J]. Optics Express, 2014, 22(19): 22689-22698.
- [109]E. Hendry, P. J. Hale, J. Moger, et al. Coherent nonlinear optical response of graphene[J]. Physical Review Letters, 2010, 105(9): 097401.

致谢

三年的研究生生涯即将迎来闭幕，回首往事，感慨良多。在北京邮电大学，我见识到了更广阔的天地，领略到了更美的象牙塔风景，不仅在学术上收获了许多知识和方法，磨练了自己的意志，生活上也养成了实事求是的心态和勤恳严谨的作风，也懂得了很多为人处世的道理，这些都是我人生的宝贵财富。

首先感谢我的两位指导老师，尹飞飞副教授和张天老师。感谢尹飞飞老师对我的关怀和教诲，尹老师紧把毕业的每个时间点，对学生认真负责，他学识渊博、严谨治学、严肃而不失幽默、对工作抱有极大的热忱，是我学习的榜样。感谢亲自带我的张天老师，在研究方向、小论文选题、研究方法、仿真过程以及文章撰写甚至期刊投递各方面都悉心指导，在实际工作和精神上都给予了我很大的支持，张老师是我永远的良师益友。

感谢射频光子学实验室的所有老师给予的关怀和帮助，感谢戴一堂教授、戴键副教授、周月副教授和其他老师的关心和帮助。感谢实验室的丁浩、舒亮、刘安妮、克金龙、蓝邱宇翔、周金赞等师兄师姐对我课题研究和生活中的帮助。感谢实验室同级谢佳男、王佳、刘尊唯、裴妍、高圆、张天刚、杨钊颖、张鑫磊、张豪杰、冀冲等同学在学习和生活中给予的关心和帮助。感谢淡一航、胡富荣、李鹏、于帅等同课题组师弟们的陪伴。最后，特别感谢我的父母，是他们无条件的支持我在科研道路上走到现在，给我提供了精神和物质上的支持，助我完成硕士期间的科研任务。特别感谢我的女友，同级的于瑞华同学，无论在精神上还是实际工作中都给予了我莫大的帮助，非常感谢！

攻读学位期间取得的研究成果

- [1]Q. Liu, T. Zhang, Y. H. Dan, et al. Inverse design of graphene metamaterial based on machine learning and evolutionary algorithms[C]. Wuhan: International Photonics and OptoElectronics Meetings, 2019.
- [2]T. Zhang, Q. Liu, Y. H. Dan, et al. Machine learning and evolutionary algorithm studies of graphene metamaterials for optimized plasmon-induced transparency[J]. Optics Express, 2020. (Accepted)