基于空间耦合模理论的介质超表面逆向设计

ZHICHENG WU1、XIAOYAN HUANG2、NANFANG YU2、ZONGFU YU[1]

[1]系 统工程系，威斯康星大学麦迪逊分校，麦迪逊，威斯康星州 *53706*，美国
[2]系 应用物理与应用数学系，哥伦比亚大学，纽约，纽约州 *10027*，美国。

摘要:

由于超表面具有小于波长的特征尺寸，却拥有远大于波长的整体尺寸，因此要对其进行高精度、高效率的建模颇具挑战。全波仿真虽然准确，但速度非常慢。局部周期近似（LPA）等常用设计范式通过忽略或部分忽略超构单元之间的近场相互作用，并将各单元视为彼此孤立，从而降低计算成本。 通过应用时间耦合模理论对超表面进行建模，已充分考虑超构单元之间的耦合。然而，该方法仅适用于基于共振的超表面。为了对基于导模传播、受到广泛研究的介质超表面进行建模，我们提出使用空间耦合模理论（SCMT）对整个系统建模，并将介质超表面视为由截断波导构成的数组。随后，我们基于该模型设计了一套逆向设计流程，并将其应用于多个场景，以实现相较于 LPA 的性能提升，例如高数值孔径透镜、多波长聚焦以及彗差抑制。 凭借其准确性和效率，所提出的框架可成为提升介质超表面在各类任务中性能的有力工具。

1. 引言

超表面是由具有特定光学响应的散射体构成的亚波长数组，近年来受到了广泛关注。通过精心设计各个元件（或超构单元）的几何形状，研究人员已在超表面上实现了多种光学功能，例如超薄透镜、全息术、波束偏转和解复用 [1]–[6]。超表面的独特优势包括能够以亚波长分辨率按需塑造波前、微米级的外形尺寸，以及CMOS兼容制造，因此有望成为传统笨重光学元件的替代方案。

超表面通常由大量亚波长散射体构成，其形状和尺寸需要经过优化才能实现特定功能。为此，人们提出了多种方法，力求兼顾高精度与低计算成本。为了通过准确预测光学响应来实现高性能，研究人员对基于全波仿真的超表面逆向设计进行了研究。这些流程包括正向问题和反向问题：正向问题使用麦克斯韦求解器预测超构单元的散射，反向问题则采用数值优化技术，根据性能优化超表面设计。全波仿真无需对超构单元的几何形状和布局作出假设，能够准确预测任意超表面的相位和振幅响应，但其计算负担极重，超表面规模增大时，计算成本很快变得难以承受。为降低这一成本，人们进行了许多尝试。常用的“局部周期”近似（LPA）[7] 假设超构单元的几何形状及其光学响应在局部变化较小，因此可将散射场近似为表面各个超构单元单独产生的散射场之和。在这种情况下，超构单元的响应被视为与其副本构成的无限周期数组的响应相同；利用时域有限差分（FDTD）或严格耦合波分析（RCWA）算法即可方便地进行仿真，并通过选取局部相位误差最小的超构单元，轻松设计整个布局。该方法虽然极快，但在存在较大相位梯度的情形下（例如高数值孔径透镜）会损失精度。LPA精度下降的一个主要原因是它未能充分考虑超构单元与其邻近单元之间的倏逝波耦合。近期，有研究提出了一种基于时间耦合模理论的逆向设计范式 [8]。在该研究中，作者将超构单元建模为微型谐振器，并对其耦合进行解析处理，从而实现快速且准确的数值设计方法。然而，该方法仅适用于基于共振的超表面，不适合模拟基于导模传播、且已得到广泛研究的介质超表面 [9]。

本文提出了一种基于空间耦合模理论（SCMT）的逆向设计范式 [10], [11]。我们将超构单元建模为截断波导，并计算其支持的模式。与 LPA 方法不同，我们通过解析方法计算相邻超构单元之间的耦合系数，从而共同准确地描述超表面中的近场耦合效应。另一方面，该方法非常

高效，计算速度比全波仿真快数个数量级。我们实现了这一逆向设计范式，并在多个场景中展示了其相较于 LPA 的显著改进，包括高数值孔径透镜和可见光波段的多波长透镜。此外，为了证明该模型适用于任意输入场，我们考虑入射角最高达 40 度的光，对单透镜的彗差进行优化。我们通过全波仿真对结果进行了基准测试和验证。我们认为，该方法在设计大规模、高性能超表面方面具有巨大潜力。

2. 正向求解器

2.1 超表面的 *SCMT* 模型

我们将简要介绍如何利用耦合模理论，根据任意输入场计算超表面的远场。详细的数学模型见附录9.1–9.3。如图1所示，输入场耦合进入被视为截断波导的超构单元，其中仅考虑导模。随后，将光在超表面中的传播近似为所有受支持波导模式的叠加，并根据耦合系数，使这些模式与相邻波导中的模式相互作用。在波导出口处，模式重新耦合回自由空间，从而获得超表面的近场分布（即超表面正上方的场）。最后，使用瑞利-索末菲衍射理论，将近场自由传播给定的传播距离至焦平面 [12]。不失一般性，我们假设入射光为 S偏振（垂直于入射面）。因此，波导中只有 TE模会被激发。加入 P偏振只会使计算成本增加一倍。

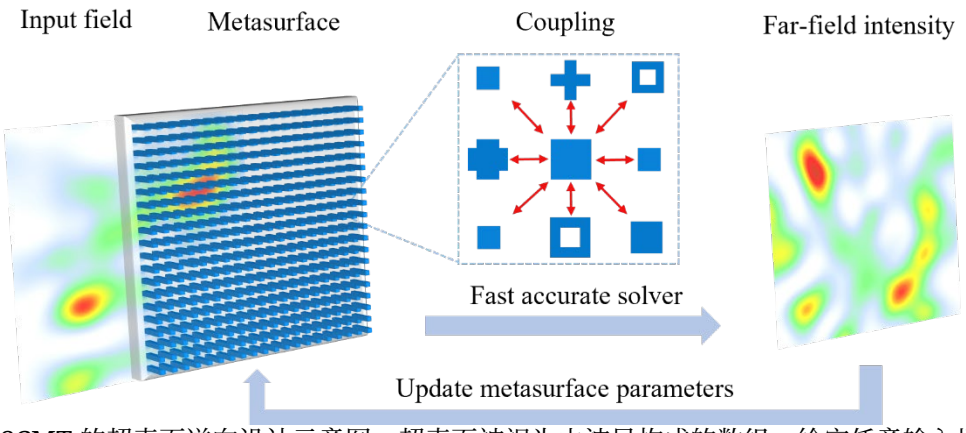

图1. 基于 SCMT 的超表面逆向设计示意图。超表面被视为由波导构成的数组。给定任意输入场，计算超表面散射场的过程如下：首先，输入场耦合进入波导。然后，使用 SCMT 对波导内的场传播进行建模，该方法能够完整捕捉超构单元之间的耦合。在波导出口处，模式场重新耦合回自由空间，从而获得近场。最后，使用瑞利-索末菲衍射方程将近场转换为远场。基于前向仿真，可根据任务更新超表面的超参数。

2.2 全波验证

我们使用时域有限差分仿真来评估 SCMT 模型的准确性。首先，我们使用时域有限差分和 SCMT 对金属透镜（$\lambda = 650nm$，NA = 0.8，周期 = 240nm）的近场进行仿真。图 2(a) 和 (b) 展示了 SCMT 预测结果与时域有限差分仿真的对比。(a) 展示了近场相位的对比。由于金属透镜的近场振幅几乎恒定，因此我们未展示近场振幅。(b) 展示了远场强度的对比。可以看出，SCMT 结果与全波仿真结果非常吻合。使用 LPA 方法设计超表面时，必须假设具有固定入射角的平面波。这是因为需要对所有可能的超构单元进行时域有限差分仿真，并且所有仿真都应采用相同的平面波输入。不同于 LPA 方法，我们的模型可以模拟超表面在任意输入场下的响应。由于斜入射尤其值得关注，作为示例，图 (c) 和 (d) 展示了 15° 入射平面波下，SCMT 预测结果与时域有限差分仿真的近场相位和焦平面强度对比。我们的方法与 LPA 方法的完整准确性分析见附录9.4。

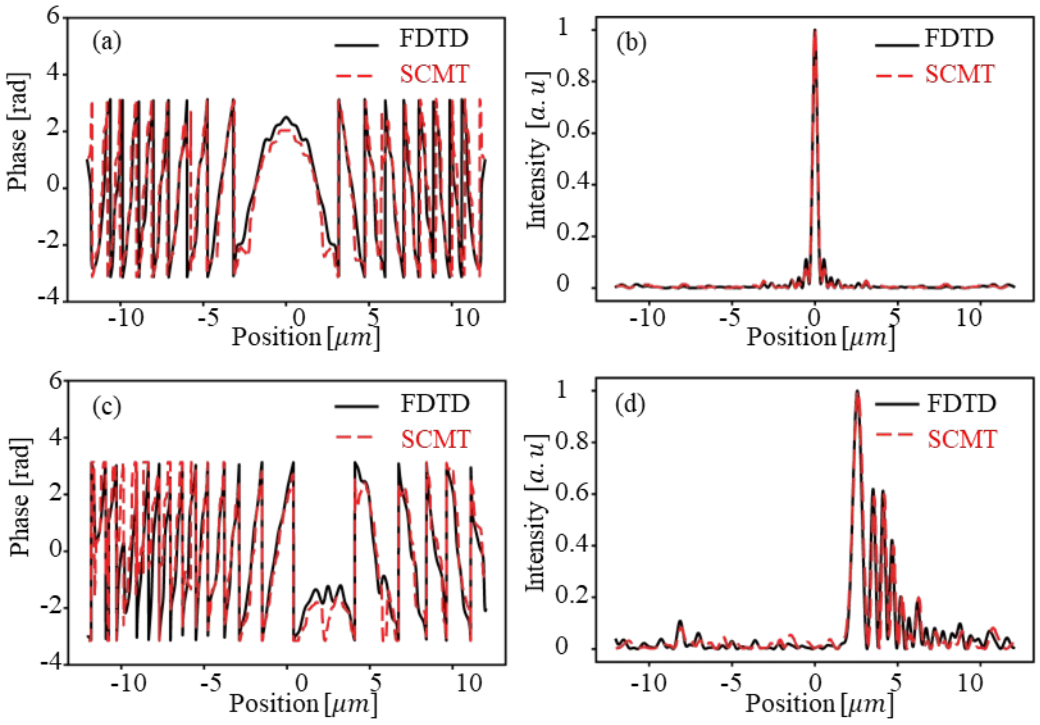

图 2. 通过时域有限差分验证了 SCMT 方法的准确性。在法向入射平面波照射下，(a) 和 (b) 展示了 SCMT 预测与时域有限差分仿真的近场相位和焦平面强度对比。强度以焦斑强度进行归一化。(c) 和 (d) 展示了 15° 入射平面波照射下，SCMT 预测与时域有限差分仿真的相位和强度对比。

3. 优化

在正向求解器中，最终，给定输入场时，远场强度可以看作波导宽度 w 的非线性函数，如图 3 所示。我们将输出强度写为:

$$I_{far} = f(w_1, w_2, \dots w_n | E_{in}) \tag{1}$$

我们希望远场强度 I_{far} 尽可能接近目标强度分布 I_{target} 。因此，可将两者之间的 L2 距离定义为损失函数（目标函数）：

$$L = \left|\left| I_{far} - I_{target} \right|\right|^2 \tag{2}$$

因此，超表面设计问题可以视为一个优化问题:

$$w_{opt} = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \left|\left| f(E_{in}) - I_{target} \right|\right|^2 \tag{3}$$

其中 $w = [w_1, w_2, \dots w_n]$。

有许多现成的基于梯度的优化方法可以解决这个问题 [13]–[15]。关键在于准确且高效地计算梯度 $\frac{\partial L}{\partial w}$。然而，$I_{far}$ 对 w 的依赖关系非常复杂，无法用解析形式显式表示。为解决这一问题，我们使用全连接神经网络拟合模型中的子函数，如图 3 所示。拟合的详细信息见附录9.7。由于我们的模型完全可微，因此在构建前向模型后，我们不使用伴随法，而是使用 PyTorch [16] 自动计算梯度，并采用 Adam优化算法 [14] 优化超表面布局。

除了支持基于梯度的优化外，我们还优化了求解器的内存使用量。对于包含 $N \times N$ 个超构单元的超表面，耦合矩阵 C 和 K 的大小为 $N^2 \times N^2$，理论上会占用

O（N^4）内存。由于距离超过 2 个周期的两个超构单元之间的耦合可以忽略不计，因此我们可以放心地设定 C_{ij}、$K_{ij}=0$，其中 $|i-j|>2$。因此，在实现中，矩阵 B、C、K 可以用稀疏矩阵表示，仅占用 O（N^2）内存。虽然稀疏矩阵的逆通常是稠密矩阵，但 C 矩阵的逆具有很好的性质：远离对角线的元素值会接近于零。我们成功地用 O（N^3）内存表示了 C^{-1}，且未损失精度。详情请参阅附录 9.8。

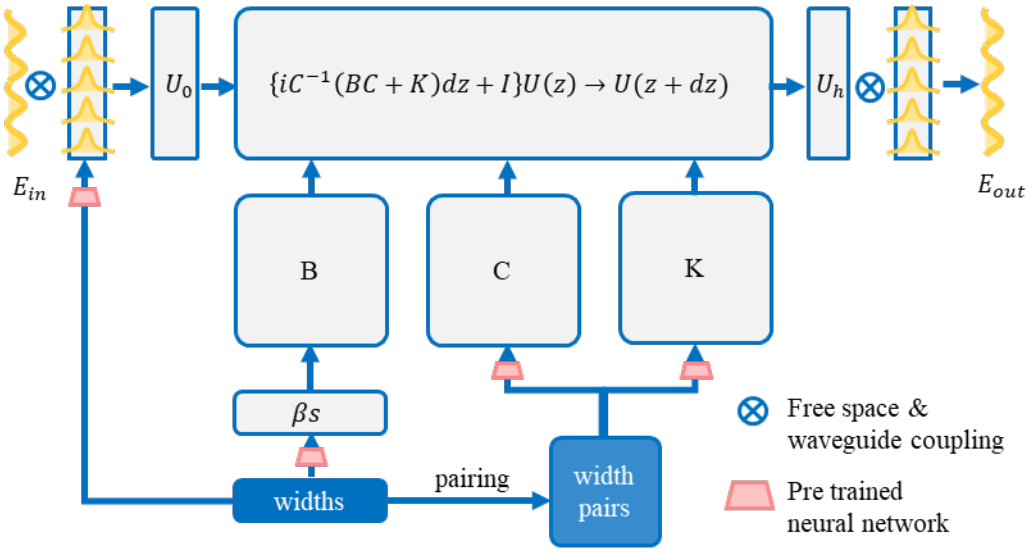

图 3。SCMT 模型的混合架构。正向求解器可视为一个非线性函数，其输出为：近场 E_{out}，输入为：波导宽度 w 和入射场 E_{in}。βs 是各个波导的传播常数数组。B 是一个对角矩阵，其对角元素为β。C 和K 是耦合矩阵。各项的定义见附录 9.1。β的计算

i、c_{ij}、k_{ij} 替换为预训练神经网络，以提高效率并支持计算宽度的梯度。波导中的模式传播采用欧拉方法进行微分计算，而非使用附录 9.1 中给出的解析解，以节省内存。

4. 逆向设计

4.1 大数值孔径透镜

大数值孔径透镜的相位分布在靠近边界处变化迅速，因此 LPA 方法的准确性较低。在这里，我们使用 SCMT 提高 NA 为 $= 0\ 8$ $= 650nm$ 的径向超透镜在波长为 2 2 400 处的聚焦效率。该超表面由二氧化硅基底上的二氧化钛方形波导构成，周期为 nm。各个波导的高度为 $800nm$，宽度范围为 $160nm$ 至 $380nm$。作为对照组，我们首先使用 LPA 方法设计了一款超透镜。随后，在优化流程中以 LPA 设计为初始方案，使用 SCMT 方法提高该透镜的聚焦效率。目标函数是使焦斑的强度最大化。两款透镜焦点处的全波仿真结果如图4(a)和(b)所示。聚焦效率的定义为聚焦在以焦点为圆心、直径为焦点半高全宽3倍的圆内的入射功率占比；该效率从35%提高到40%。斯特列尔比定义为设计透镜与理想透镜的峰值强度之比，从58%提高到66%。

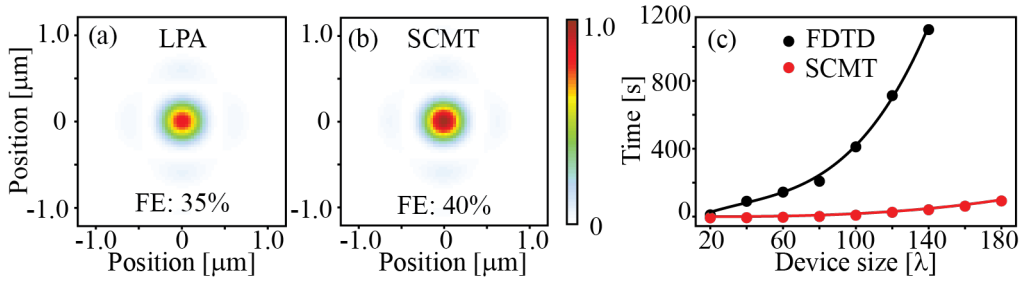

图4. 通过时域有限差分仿真验证的两种超构透镜的聚焦效率对比。(a) 由 LPA 设计的金属透镜的焦斑；(b) 由 SCMT 设计的超构透镜的焦斑。两种透镜的半高全宽（FWHM）均为 0.72λ。LPA 透镜的斯特列尔比为 0.58，SCMT 透镜的斯特列尔比为 0.66。(c) SCMT 与 FDTD 求解器（Tidy3d）的计算效率对比。使用这两种方法对不同尺寸的三维超构透镜进行仿真。

4.2 色差减小透镜

与高数值孔径超构透镜类似，在多个波长下聚焦的超透镜也往往会降低 LPA 方法的准确性。为了展示 SCMT 相较于 LPA 的改进效果，我们使用两种方法设计超透镜，使其能够同时在 650nm 和 450nm 下聚焦。此类超表面的数值孔径为0.4，同样由二氧化硅基底上的二氧化钛方形波导构成，周期为280nm。波导高度为 800nm，宽度范围为 80nm 至 240nm。两种设计在两个不同波长下的时域有限差分验证结果如图5所示。尽管在 650nm 下，SCMT 设计的透镜效率略低于 LPA（图5(a)和(c)），但在 450nm 下，其效率远高于 LPA（图5(b)和(d)）。SCMT 设计透镜在 650nm 下的聚焦效率为42%，在 at 450nm 下为32%。LPA 设计透镜在 650nm 下的聚焦效率为47%，在 at 450nm 下为22%。

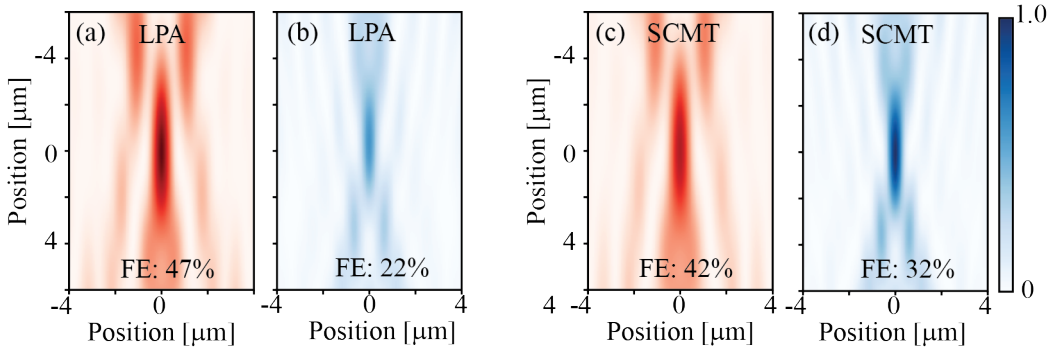

图5. LPA 和 SCMT 在多波长透镜设计中的聚焦效率对比。我们使用这两种方法设计支持两个波长 650nm 和 450nm的透镜。使用 FDTD 求解器对两种设计透镜的远场进行仿真。(a) (b) 由 LPA 设计的透镜在 650nm 和 450nm下的焦斑。(c) (d) 由 SCMT 设计的透镜在 650nm 和 450nm下的焦斑。(FE：聚焦效率)。

4.3 彗差减小透镜

通常，彗差会通过多元件光学系统来抑制。也有人提出采用超表面双透镜组来抑制彗差[17], [18], , 但这会增加成本并引发对准问题。因此，更理想的方案是采用彗差较小的单层超构透镜。然而，这要求对不同入射角下的平面波进行准确的超表面建模，而 LPA 方法无法做到这一点。我们利用 SCMT 模型，针对不同入射角对焦斑强度进行均等最大化，设计出一种单片超构透镜；如图6所示，该透镜在最高达+/-40 度的入射角下仍能大幅抑制彗差。图6（a）和（c）展示了理想平面透镜的焦斑，该透镜能够将法向入射平面波完美聚焦。然而，可以看到，随着入射角增大，彗差也随之增大。相比之下，（b）和（d）展示了采用 SCMT 设计的超构透镜的性能。据我们所知，超表面领域此前尚未设想过这种单片设计。

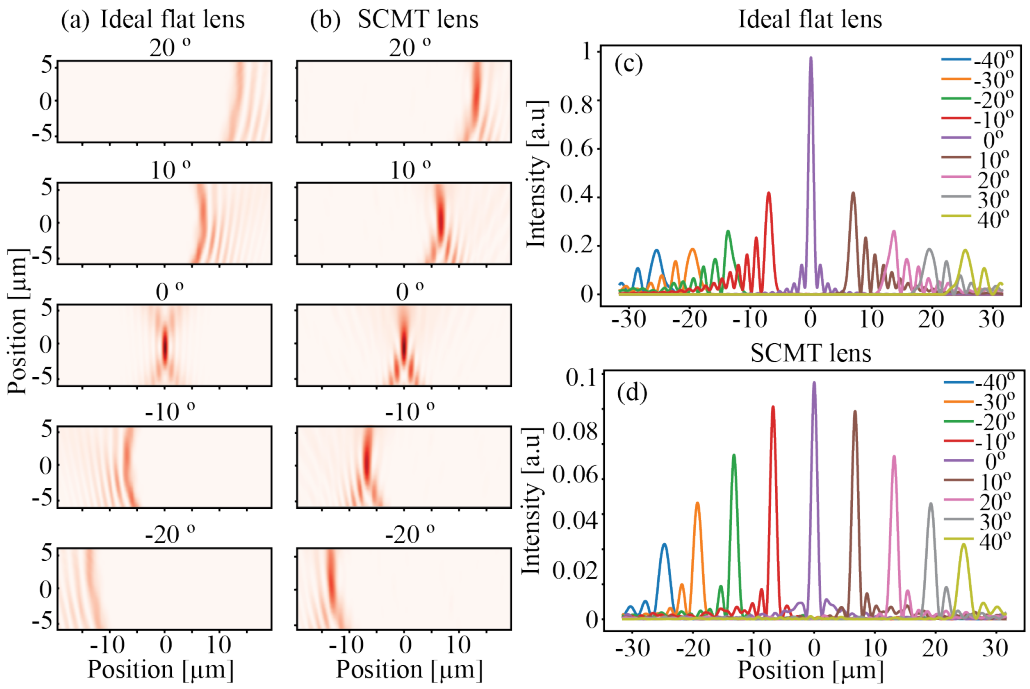

图6。（a）不同入射角下理想平面透镜焦斑的侧视图。（b）不同入射角下经 SCMT 优化的透镜焦斑的侧视图。（c）不同入射角下理想平面透镜焦平面上的强度。（d）不同入射角下经 SCMT 优化的透镜焦平面上的强度。图中结果由时域有限差分仿真得到。

5. 计算效率

最后，我们将求解器的效率与当前最先进的 FDTD 求解器（Tidy3d [19]）进行比较。我们使用这两种方法仿真不同尺寸的三维超构透镜，并评估其时间复杂度。如图4（c）所示，Tidy3d FDTD 求解器是同类求解器中速度最快的之一，能够在 10 分钟内仿真一个100λ × 100λ 3D 超表面的聚焦效果。得益于高效的仿真算法和多 GPU 加速，我们的求解器速度至少比 Tidy3d 快 10 倍。为了仿真180 λ x 180 λ 超表面，我们使用了 4 块 NVIDIA TITAN Xp GPU，每块均配备 12GB 随机存取存储器。

6. 讨论

SCMT 已广泛用于多波导系统的研究与设计。最简单且最实用的情形是研究定向耦合器，这是一种由两个波导组成的系统，可用作功率分配器、光开关和波长滤波器 [20]–[23]。此外，SCMT 也已用于包含多个波导的系统，例如多芯光纤 [24], 激光器阵列 [25], 和微梳 [26]。与全波数值仿真相比，SCMT 能显著加快器件设计与优化过程，因为基于 SCMT 的方法只需要各个独立组件的电磁场 [27]–[29]。尽管 SCMT 应用广泛，据我们所知，它尚未用于设计通常由数万个耦合波导组成的超表面。我们的研究表明，SCMT 也能准确地对大规模多波导系统进行建模。

逆向设计问题的主要难点在于，给定一个目标函数后，如何计算超参数的导数。逆向设计领域主要采用三种方法。最直接的方法是有限差分法 [30]，：对每个输入施加微小扰动，并测量由此产生的输出。这种方法适用于输出数量较多、但参数数量较少的问题。对于由麦克斯韦方程建模的前向问题，通常使用伴随法 [31]，通过加入伴随源再次运行前向仿真来求得导数。相反，这种方法更

适用于参数数量较多、但输出数量较少的问题。本文采用的是自动微分（AD）[32]。自动微分是机器学习领域计算导数的主流方法，因为它能够高效地计算具有大量参数的标量目标函数的梯度。在这种方法中，只需手动实现前向仿真，反向梯度则会自动生成。不过，其限制在于前向实现必须是可微的，这一要求称为可微编程。整个计算过程可以表示为有限个基本运算的组合，而这些运算的导数已知。在我们的模型中，给定预先计算好的模态特性，基于 SMCT 的前向仿真是可微的。然而，通过几何参数获取模态特性的过程不可微，因此完整的自主逆向设计范式仍缺少关键环节。为解决这一问题，我们采用预训练神经网络替代本征模求解过程，如图 3 所示。这一策略提供了一种将不可微模型转化为可微模型的方法，同时仍能保持相当高的精度。分子动力学模拟领域 [33], 也采用了相同的思路，即使用神经网络拟合原子的势能面。

总之，受[8] 利用时域耦合模理论基于共振对超表面进行建模的启发，我们采用 SCMT 方法，在指导下提高超表面仿真的准确性和效率。本研究拓展了耦合模理论在超表面建模中的应用。此外，我们通过与广泛使用的 LPA 方法和全波仿真进行比较，展示了本方法的准确性。最后，我们提出并验证了一种基于自动微分的逆向设计范式，并观察到性能有所提升。本方法简化了设计流程，能够实现复杂功能。

本方法仍有若干方面可以改进。首先，如图 A.3 所示，本方法对振幅响应的预测还不够准确。与采用抗反射涂层的传统光学元件相比，超表面的透射效率相对较低，这是制约其实现复杂功能的主要缺点之一，而复杂功能通常需要光线依次通过多个光学元件。要优化超表面的透射效率，就需要高效、准确地预测振幅响应。其次，我们的框架要求所设计的超构单元位于周期网格上，这限制了超表面功能的充分发挥。已有多项研究 [34], [35] 证明，这一限制可以通过拓扑优化克服。后续工作还需将 SCMT 方法纳入拓扑优化框架。

7. 数据可用性

用于生成所有结果的程序已公开发布于https://github.com/airPeter/Meta_SCMT。

8. 致谢

作者感谢　　美国国家科学基金会提供的支持（资助编号：QII-TAQS-1936359 和
编号：ECCS-2004685）。

9. 附录

9.1 波导阵列的耦合模

本节将介绍任意波导阵列中的耦合模传播。对于孤立波导，导模沿其纵向传播，并保持恒定的横向电磁模场分布。传播常数 β 和模场分布可通过求解波导的本征模获得。原则上，可以对整个阵列进行相同的模态分析，以获得超模（即整个波导阵列的本征模）及其传播常数。为简化计算，超模近似表示为孤立波导模式的线性组合。SCMT 的作用是推导这些组合的系数及其传播常数。详细推导见[10]。下面总结相关结果。

为简化说明，我们假设对于孤立波导 i，该介质波导仅支持单个导模，其横向场分量为 $\{E_t^i(x,y), H_t^i(x,y)\}$，传播常数为 β。（实际上，超构单元尺寸始终显著小于波长，通常最多仅支持 2 个模式。）假设数组中有 N 个波导，对于数组中传播的任意场，根据我们的假设，都可以近似分解为孤立波导的模式。场分布可表示为：

$$E(x,y,z)_t = \sum_{i=1}^{N} u_i(z) E_t^i(x,y) \quad \text{(A.1)}$$

$$H(x,y,z)_t = \sum_{i=1}^{N} u_i(z) H_t^i(x,y) \quad \text{(A.2)}$$

其中，位置 $[u_1\ z\ \ u_2\ z\ \ \ \ u_N\ z\ ]$ 处模式 i 的模式振幅为 ( )。系数向量 U( ) ( )、( )、… ( ) 的动力学可由以下方程描述:

$$C\frac{dU(z)}{dz} = i(BC + K)U(z) \quad \text{(A.3)}$$

其中，C、K 是耦合矩阵，B 是由传播常数（$B_{ii} = \beta_i$）构成的对角矩阵。矩阵 C 的元素 c_{pm} 是模式 p 的电场与模式 m的磁场的模式重叠:

$$c_{pm} = 2\,\hat{z} \cdot \iint_{-\infty}^{\infty} E_t^p \times H_t^m dxdy \quad \text{(A.4)}$$

并且，模式振幅的归一化方式满足 $C_{pp} = 1$、$\forall p$。

矩阵 K 的元素 k_{pm} 是考虑介电常数微扰后，模式 p 的电场与模式 m 的电场之间的耦合系数:

$$k_{pm} = \omega \iint_{-\infty}^{\infty} \Delta\epsilon^p [E_t^p \cdot E_t^m] dxdy \quad \text{(A.5)}$$

其中，$\Delta\epsilon$（x、 y） $= \epsilon$（x、 y） $- \epsilon^p$（x、 y），ϵ（x、y）是整个波导系统的介电常数。ϵ^p 是由孤立波导 p 构成的介电质。

请注意，一旦波导阵列固定，矩阵 B、C、K 便是常数。对于超构单元库，这些值可以预先计算，并基于超构单元几何结构进行参数化。通过求解方程（1），给定输入 U 0，即可得到系数向量 U（z）:

$$U(z) = exp\ exp\ [iC^{-1}(BC + K)z]\ U(0) \quad \text{(A.6)}$$

公式（6）是我们构建正向求解器所需的公式。虽然我们不需要超模传播常数σ 和超模系数向量 V，但为求完整起见，计算它们所用的特征值方程如下:

$$[C^{-1}(BC + K)]V = \sigma V \quad \text{(A.7)}$$

9.2 自由空间与波导耦合

要计算 U(0)，一种直接的方法是将入射场分解到由超模构成的基底上。不过，为避免计算超模，u_i(0)近似为入射场与孤立波导 i [36] 之间的耦合系数:

$$u_i(0) = \epsilon_0 c \frac{2n_0 n_{eff}^i}{n_0 + n_{eff}^i} \int\int E_{incident} E_t^i(x,y) dxdy \quad \text{(A.8)}$$

其中，有效折射率为 $n_{eff} = \frac{\beta}{k}$，且 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$。λ 为波长，ϵ_0 为真空介电常数，c 为真空中的光速。

单个波导的透射系数 i 为:

$$\eta_i = \frac{n_0 n_{eff}^i}{n_0 + n_{eff}^i} \quad \text{(A.9)}$$

输出场近似为:

$$E(x,y,h)_t = \sum_{i=1}^{N} \eta_i\, u_i(h) E_t^i(x,y) \quad \text{(A.10)}$$

其中，u_i(h) 根据方程 (6) 计算，符号 h 表示波导的长度。

9.3 自由空间传播

我们使使用瑞利-索末菲衍射理论 [12] 对自由空间中的光传播进行建模 .

$$E_{far}(x,y) = \frac{z}{r^2}\left(\frac{1}{2\pi r} + \frac{1}{j\lambda}\right) exp\left(\frac{j2\pi r}{\lambda}\right) E_{near}(x',y') \tag{A.11}$$

其中，r 是点 (x',y') 与 (x,y) 之间的距离，z 是传播距离。

9.4 *LPA*、*SCMT* 与无耦合方法的精度比较

我们比较了在不同耦合强度下 LPA、SCMT 和无耦合方法的精度。耦合强度的定义见附录 9.5。基本而言，超构单元之间的距离越近，其耦合强度越大。图 A.1 (a) 使用三种方法预测不同耦合强度下金属透镜的近场相位。图中绘出了 SCMT 和无耦合方法的相对误差，并将 LPA 方法相对于时域有限差分仿真的误差设为 100%。可以看出，在强耦合区域，SCMT 比 LPA 更准确；在弱耦合区域，三种方法的精度相近。图 A.1 (b) 绘出了 SCMT 和无耦合方法的振幅预测相对误差。也可以看出，在强耦合区域，SCMT 更准确。（LPA 通常不用于预测振幅，因为其预测值在整个超构表面上几乎保持不变。）相对误差的定义见附录 9.6。

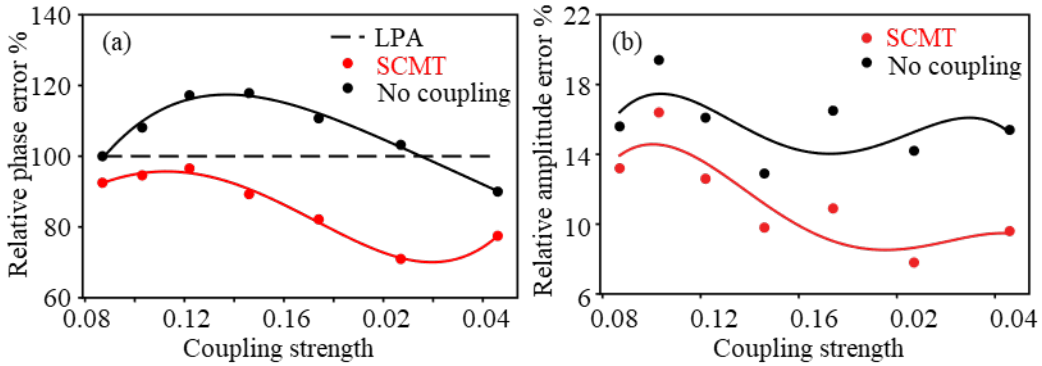

图 A.1. 通过时域有限差分验证了 SCMT 方法的准确性分析。(a) 使用 3 种方法预测不同耦合强度下金属透镜的近场相位。绘制了 SCMT 方法和无耦合方法的相对误差，并将 LPA 方法相对于全波仿真的误差设为 100%。(b) 不同耦合强度下 SCMT 方法和无耦合方法的振幅预测相对误差。

9.5 耦合强度的定义

对于两个波导的耦合，耦合强度可定义为模式场的重叠：

$$c_{12} = 2\,\hat{z}\cdot\iint_{-\infty}^{\infty} E_t^1 \times H_t^2\, dxdy \tag{A.12}$$

$$coupling\ trength = \frac{c_{12}+c_{21}}{2} \tag{A.13}$$

对于波导阵列，我们可以用相同的方式定义耦合强度。假设超构单元为具有正方形横截面的波导。对于给定的周期，允许的波导宽度范围为 $[w_{min}, w_{max}]$。根据分辨率要求选择合适的步长 dw 后，可选波导宽度的数量为 $N_c = \frac{w_{max}-w_{min}}{dw}$ 。因此，不同的最近邻耦合组合数量为 N_c^2。上述系统的耦合强度为：

$$coupling\ trength = \frac{\sum_{i=1}^{N_c}\sum_{j=1}^{N_c} c(w_i, w_j)}{N_c^2} \tag{A.14}$$

9.6 相对误差的定义

绝对相位误差定义如下：

$$ape(p1,p2) = \left|\left|e^{ip1} - e^{ip2}\right|\right|_1 \tag{A.15}$$

在此，我们使用 L_1 范数来提高误差对异常值的稳健性。

SCMT 方法的相对误差定义为:

$$rpe_{SCMT} = \frac{ape(p_{SCMT}, p_{FDTD})}{ape(p_{LPA}, p_{FDTD})} \tag{A.16}$$

p_{SCMT} 是由 SCMT 方法给出的相位预测。我们可以用相同的方式定义无耦合方法的相对误差。

相对振幅误差的定义很直接:

$$rae_{method} = \frac{\left|\left|amp_{method} - amp_{FDTD}\right|\right|^2}{\left|\left|amp_{FDTD}\right|\right|^2} \tag{A.17}$$

9.7 神经网络子模块

对于输出 c_{ij} 的子模块，网络的输入为：波导 i 与波导 j 之间的距离（对于二维模型，距离用一个数值 x 编码；对于三维模型，距离用一个元组 (x, y) 编码）、模式索引 m_i 和 m_j（例如，波导 $m = 0$ 的基模），以及波导宽度 h_i、h_j。

训练数据集的数量等于所有输入组合的总数。以二维系统为例，可选宽度的数量为 N_h，可选模式的数量为 2，可选距离的数量为 5（{-2, - 1, 0, 1, 2} 个周期）。因此，训练数据集的大小为 $10N_h^2$。我们训练全连接网络，使模型预测与真实值之间的相对误差小于 0.1%。

对于输出 k_{ij} 的子模块，根据方程 (5)，我们注意到 k_{ij} 不仅取决于波导 i 和 j，还取决于它们之间的波导（来自项 $\Delta\epsilon$）。实际中，忽略中间波导所产生的误差为 $< 1\%$。因此，我们将子模块的输入定义为与 c_{ij} 子模块相同。

对于输出 E_i 的子模块，输入为模式索引 m_i 和波导宽度 h_i。输出为离散化场分布（对于三维模型，是一个矩阵；对于二维模型，是一个数组）。

9.8 近似计算 C^{-1}

假设矩阵 C 的大小为 $N \times N$，占用 $O(N^2)$ 内存。计算 C^{-1} 的一种标准算法是对矩阵 C 进行 LU 分解，然后使用高斯消元法。C^{-1} 的大小也为 $N \times N$。在我们的情况中，矩阵 C 是图 A.2 所示的带状对角矩阵，可以用 $O(N)$ 内存进行稀疏表示。然而，如果使用标准算法计算 C^{-1}，必然会占用 $O(N^2)$ 内存。为克服这一困难，我们按行近似 C^{-1}。这一过程如图 A.2 所示。我们希望在仅允许一条对角带中的元素非零这一约束下，最小化单位矩阵与 $C_{appox}^{-1}C$ 之间的 L2 距离。（非零带的宽度需要在内存占用和精度之间权衡。在我们的情况中，选择宽度 = $11\sqrt{N}$。）这可以转化为图 A.2（b）所示的逐行优化问题，其中 C_s 是 C的一个子矩阵，C_{is}^{-1} 是 C_{approx}^{-1}的一行。I_s 是 I 的一个子行，其中只有 1 个元素非零。存在一个使逐行损失 L_i最小化的解析解:

$$(C_{si}^{-1})^T = argmin(L_i) = (C_s C_s^T)^{-1} C_s I_s^T \tag{A.18}$$

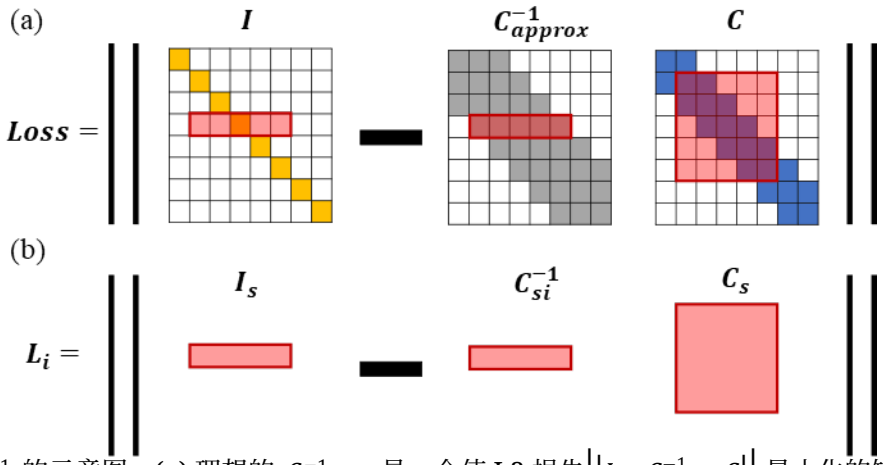

图 A.2. 近似 C^{-1} 的示意图。(a) 理想的 C_{approx}^{-1} 是一个使 L2 损失$\left|\left|I - C_{approx}^{-1}C\right|\right|$ 最小化的矩阵，同时满足只有一条对角元素带可以非零的约束。(b) 优化可以逐行求解。C_s 是C的子矩阵， C_{is}^{-1} 是C_{approx}^{-1}的一行。I_s 是I 的一个子行，其中只有 1 个元素非零。

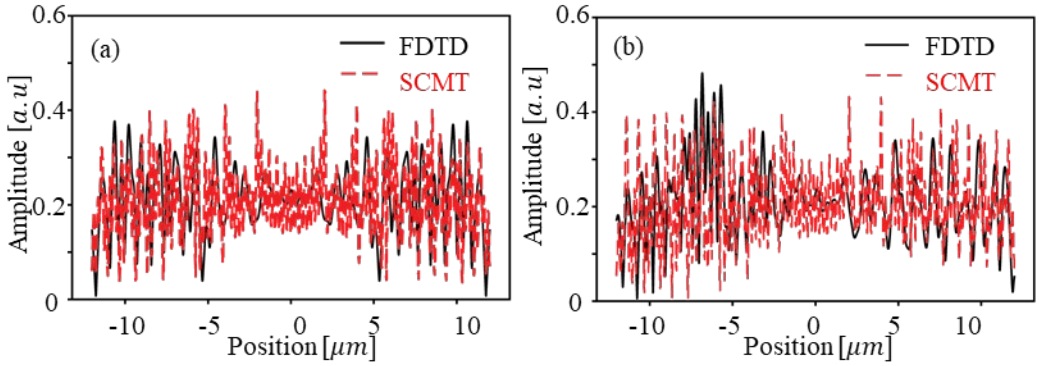

图 A.3. 通过时域有限差分验证了 SCMT 方法的准确性。(a) 法向入射平面波下，SCMT 预测结果与时域有限差分仿真的近场振幅对比。(b) 15° 入射平面波下，SCMT 预测结果与时域有限差分仿真的近场振幅对比。

10. 参考文献

[1] H.-T. Chen、A. J. Taylor 和 N. Yu，“超表面综述：物理学与应用”，《物理学进展报告》，第 79 卷，第 7 期，文章编号 076401，2016 年 6 月，doi：10.1088/0034-4885/79/7/076401。[2] F. Aieta 等，“基于等离激元超表面的电信波段无像差超薄平面透镜和轴锥镜”，《纳米快报》，第 12 卷，第 9 期，第 4932–4936 页，2012 年 9 月，doi：10.1021/nl302516v。[3] S. Shrestha、A. C. Overvig、M. Lu、A. Stein 和 N. Yu，“宽带消色差介质超透镜”，《光：科学与应用》，第 7 卷，第 1 期，文章编号 1，2018 年 11 月，doi：10.1038/s41377-018-0078-x。[4] G. Zheng、H. Mühlenbernd、M. Kenney、G. Li、T. Zentgraf 和 S. Zhang，“效率达 80% 的超表面全息图”，《自然·纳米技术》，第 10 卷，第 4 期，文章编号 4，2015 年 4 月，doi：10.1038/nnano.2015.2。[5] F. Aieta、M. A. Kats、P. Genevet 和 F. Capasso，“通过色散相位补偿实现多波长消色差超表面”，《科学》，第 347 卷，第 6228 期，第 1342–1345 页，2015 年 3 月，doi：10.1126/science.aaa2494。[6] P. Berini，“使用可调谐超表面的光束转向”，*ACS Photonics*，第 9 卷，第 7 期，第 2204–2218 页，2022 年 7 月，doi：10.1021/acsphotonics.2c00439。

[7] R. Pestourie、C. Pérez-Arancibia、Z. Lin、W. Shin、F. Capasso 和 S. G. Johnson，“大面积超表面的逆向设计”，Opt. Express，第 26 卷，第 26 期，第 33732–33747 页，2018年12月，doi: 10.1364/OE.26.033732。[8] M. Zhou 等，“基于耦合模理论和伴随优化的超表面逆向设计”，ACS Photonics，第 8 卷，第 8 期，第 2265–2273 页，2021年8月，doi: 10.1021/acsphotonics.1c00100。[9] C. Gigli、Q. Li、P. Chavel、G. Leo、M. L. Brongersma 和 P. Lalanne，“惠更斯超表面用于光束整形的基本限制”，Laser Photonics Rev.，第 15 卷，第 8 期，第 2000448 页，2021年，doi: 10.1002/lpor.202000448。[10] A. Hardy 和 W. Streifer，“多波导系统与相控阵中的耦合模”，J. Light. Technol.，第 4 卷，第 1 期，第 90–99 页，1986年1月，doi: 10.1109/JLT.1986.1074633。[11] E. K. Sharma、J. P. Nath 和 N. Dhingra，“耦合模理论与耦合模光子器件：综述”，第 18 页。[12] J. W. Goodman，《傅里叶光学导论》。Roberts and Company Publishers，2005年。[13] I. Sutskever、J. Martens、G. Dahl 和 G. Hinton，“初始化和动量在深度学习中的重要性”，载于《第30届国际机器学习会议论文集》，2013年5月，第 1139–1147 页。访问日期：2023年2月28日。[在线]。可访问：https://proceedings.mlr.press/v28/sutskever13.html [14] D. P. Kingma 和 J. Ba，“Adam：一种随机优化方法”，ArXiv14126980 Cs，2014年12月，访问日期：3月
17, 2019 [ ] 1412 6980 。在线。可访问：
[15]
http://arxiv.org/abs/ 。S. Ruder，“梯度下降优化算法概述”。arXiv，2017年6月15日。doi: 10.48550/arXiv.1609.04747。[16] “PyTorch。”https://www.pytorch.org（访问日期：2022年11月21日）。[17] A. Arbabi、E. Arbabi、S. M. Kamali、Y. Horie、S. Han 和 A. Faraon，“基于经过单色像差校正的广角超表面双合透镜的微型平面光学相机”，Nat. Commun.，第 7 卷，第 1 期，文章编号 1，2016年11月，doi: 10.1038/ncomms13682。[18] D. Tang、L. Chen、J. Liu 和 X. Zhang，“具有大入射角、用于光聚焦的消色差超表面双合透镜”，Opt. Express，第 28 卷，第 8 期，第 12209–12218 页，2020年4月，doi: 10.1364/OE.392197。[19] “Python 驱动的时域有限差分软件：Tidy3D - Flexcompute。”https://www.flexcompute.com/tidy3d/solver/（访问日期：2022年11月21日）。[20] S. Trillo 和 S. Wabnitz，“相干失配定向耦合器中的非线性非互易性”，Appl. Phys. Lett.，第 49 卷，第 13 期，第 752–754 页，1986年9月，doi: 10.1063/1.97536。[21] M. Cada、R. C. Gauthier、B. E. Paton 和 J. Chrostowski，“平面 GaAs/GaAlAs 多量子阱结构中非线性耦合的非线性导波”，Appl. Phys. Lett.，第 49 卷，第 13 期，第 755–757 页，1986年9月，doi: 10.1063/1.97537。[22] X. J. Meng 和 N. Okamoto，“非线性定向耦合器的改进耦合模理论”，IEEE J. Quantum Electron.，第 27 卷，第 5 期，第 1175–1181 页，1991年5月，doi: 10.1109/3.83374。[23] M. L. Cooper 和 S. Mookherjea，“用于硅波导耦合器和阵列波导的数值辅助耦合模理论”，Opt. Express，第 17 卷，第 3 期，第 1583–1599 页，2009年2月，doi: 10.1364/OE.17.001583。[24] C. Xia 等，“耦合多芯波导结构中的超模”，IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.，第 22 卷，第 2 期，第 196–207 页，2016年3月，doi: 10.1109/JSTQE.2015.2479158。[25] P. Debernardi 和 G. P. Bava，“耦合模理论：分析复杂垂直腔面发射激光器和设计先进器件特性的有力工具”，IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.，第 9 卷，第 3 期，第 905–917 页，2003年5月，doi: 10.1109/JSTQE.2003.818839。[26] J. Liu 等，“用于光子集成的超低功耗芯片级孤子微梳”，Optica，第 5 卷，第 10 期，第 1347–1353 页，2018年10月，doi: 10.1364/OPTICA.5.001347。[27] M. A. Popović、C. Manolatou 和 M. R. Watts，“耦合介质多腔滤波器中耦合引起的谐振频率偏移”，Opt. Express，第 14 卷，第 3 期，第 1208–1222 页，2006年2月，doi: 10.1364/OE.14.001208。[28] C. Xiong 等，“硅（100）上的集成氮化镓光子电路及其二次谐波产生”，Opt. Express，第 19 卷，第 11 期，第 10462–10470 页，2011年5月，doi: 10.1364/OE.19.010462。[29] B. E. Little、S. T. Chu、H. A. Haus、J. Foresi 和 J.-P. Laine，“微环谐振器通道下载滤波器”，J. Light. Technol.，第 15 卷，第 6 期，第 998–1005 页，1997年6月，doi: 10.1109/50.588673。[30] T. W. Hughes、M. Minkov、V. Liu、Z. Yu 和 S. Fan，“大面积金属透镜全波仿真的实现路径展望”，Appl. Phys. Lett.，第 119 卷，第 15 期，第 150502 页，2021年10月，doi: 10.1063/5.0071245。

[31] M. Mansouree、A. McClung、S. Samudrala 和 A. Arbabi，“使用伴随优化的大规模参数化超表面设计”，*ACS Photonics*，第 8 卷，第 2 期，第 455–463 页，2021年2月，doi: 10.1021/acsphotonics.0c01058。[32] A. G. Baydin、B. A. Pearlmutter、A. A. Radul 和 J. M. Siskind，“机器学习中的自动微分：综述”。arXiv，2018年2月5日。doi: 10.48550/arXiv.1502.05767。[33] D. Lu 等，“以第一性原理精度对 1 亿个原子进行 86 PFLOPS 深度势分子动力学模拟”，《计算物理通讯》，第 259 卷，第 107624 页，2021年2月，doi: 10.1016/j.cpc.2020.107624。[34] Z. Lin、V. Liu、R. Pestourie 和 S. G. Johnson，“自由形状大面积超表面的拓扑优化”，*Opt. Express*，第 27 卷，第 11 期，第 15765–15775 页，2019年5月，doi: 10.1364/OE.27.015765。[35] T. Phan 等，“高效率、大面积、拓扑优化超表面”，《光：科学与应用》，第 8 卷，第 1 期，文章编号 1，2019年5月，doi: 10.1038/s41377-019-0159-5。[36] C. R. Pollock 和 M. Lipson，《集成光子学》。马萨诸塞州波士顿：Springer US，2003年。doi: 10.1007/978-1- 4757-5522-0。