arXiv:2602.02101v1 [physics.optics] 2 Feb 2026

促进纳米光子学信息驱动研究的 T 矩阵数据库

Nigar Asadova,[1,*] Kaoutar Boussaoud,[2,*] J¨orgMeyer,[2] Frank Tristram,[3] 以及 Carsten Rockstuhl[1,4,51]纳米技术研究所，卡尔斯鲁厄理工学院，凯撒大街*12*号，*76131* 卡尔斯鲁厄，德国[2]科学计算中心，卡尔斯鲁厄理工学院，凯撒大街*12*号，*76131* 卡尔斯鲁厄，德国[3] *3D Matter Made to Order*，卡尔斯鲁厄理工学院，凯撒大街*12*号，*76131* 卡尔斯鲁厄，德国[4]理论固态物理研究所，卡尔斯鲁厄理工学院，凯撒大街*12*号，*76131* 卡尔斯鲁厄，德国[5]集成量子科学与技术中心（*IQST*），卡尔斯鲁厄理工学院，沃尔夫冈-盖德街*1*号，*76131* 卡尔斯鲁厄，德国

摘要

用于探索超表面以及更广义的光子系统光学响应的机器学习与人工智能信息驱动方法，依赖于标注完善的数据集进行训练。对于由散射体的周期排列或非周期排列构成的超表面，编码其响应的主要信息是这些单个散射体的光学性质。在线性区间内，该响应完全包含于单个散射体的跃迁矩阵或T矩阵之中。然而，尽管这些T 矩阵在更大的研究群体中被广泛用于探索先进光子材料，目前仍没有公共基础设施能够以一致的元数据和标准表示形式分发它们。这对于避免全球研究人员对这些T 矩阵进行重复且耗费资源的计算，并促成数据驱动研究而言十分重要。为克服这一局限，我们推出位于 https://tmatrix.scc.kit.edu/ 的 Daphona T 矩阵门户，这是一个基于网络的平台，支持交互式搜索、筛选和导出标准化数据，其中包含以T 矩阵表达的、适用于多种散射体的结构-性质关系。除介绍这一基础设施外，我们还展示了现有数据如何能够在信息驱动研究的更广阔背景下解答科学问题。本文中的多个示例既涵盖代理正向模型，也涵盖逆向设计模型，其运算既可直接针对T矩阵，也可针对由这些散射体构成的超表面的光学可观测量。

引言

转移矩阵（T矩阵）是描述光与空间局域物体相互作用的关键数学工具。当电磁波遇到纳米颗粒、分子或任何微结构等物体时，会引发复杂的物理现象：部分光线改变传播方向，部分被吸收，还有部分会激发物体内部的多极共振。T矩阵通过描述入射场的多极分量如何转化为散射场的多极分量，以紧凑形式完整呈现这一散射行为。其主要优势在于，借助T矩阵，我们可以将麦克斯韦方程组的求解重新表述为代数问题。一次基本的矩阵—向量乘法就能表示任意照明与给定散射体之间的相互作用。而

* 这些作者对本项工作贡献相同。通讯作者：nigar.asadova@kit.edu

最好的一点是，这个矩阵甚至并不大。根据入射场和散射场展开中保留的多极阶数，我们所讨论的矩阵规模至多为一百个元素的平方。虽然单个物体的光散射描述已经可以方便地表达，但将 T矩阵方法应用于由许多单独散射体组成的各种现代光子材料时，其优势才得以充分展现。可高效研究的光子材料包括超表面、超材料、光子晶体、胶体组装体、无序材料、光学天线等诸多类型 [1–6]。当采用量子化学方法计算单个分子的 T 矩阵时，许多分子材料同样可以得到非常高效的描述 [7, 8]。此外，尽管本文仅讨论线性相互作用，但T矩阵框架可以扩展以纳入非线性效应，从而为研究光与物质相互作用提供一种综合方法 [9–11]。凭借其多功能性，T 矩阵已成为纳米光学、光子学、大气科学和计算电磁学领域的一个重要概念 [12–18]。尤其是，大气科学和遥感领域的研究群体一直在积极为特定应用建立散射特性数据库 [19–22]。

然而，获取准确的 T 矩阵需要在多种照明条件下求解麦克斯韦方程组，这一过程计算量大、耗时且能耗高。在探索涉及几何形状、取向、材料色散和光谱范围的参数扫描时，这一点尤为明显。该领域长期面临的一项挑战是，T 矩阵往往被反复重新计算，而非系统地重复利用。研究团队通常依赖求解器专用脚本和内部存储规范，导致数据集格式种类繁多、彼此不一致且互不兼容 [23, 24]。格式上的差异使可复现性和数据共享变得困难，也阻碍了共享数据库和存储库的开发。建立此类存储库至少能从以下三个方面带来益处：

首先，反复计算相同或相似的结构不仅浪费科研资源，还会增加不必要的能耗，这与人们日益重视可持续高性能计算实践的趋势相悖。其次，收集、归档和共享 T 矩阵，将使人们能够应用人工智能和机器学习领域的各种现代工具，来解决新颖的数据驱动科学研究问题。除了开发代理求解器

来求解麦克斯韦方程组之外，只要使用足够大的数据集进行训练，人工神经网络就能用于解决各种逆问题。第三，归档 T 矩阵并向所有人开放，可以让其他人更轻松地复现模拟。得益于丰富的工具生态系统，这些工具能够利用和处理 T 矩阵来研究特定的光子材料；开放获取 T 矩阵有助于我们履行使研究结果可复现的责任。建立专门存储 T 矩阵的存储库或许还有许多其他动机，但上述几点最为迫切。

为克服这些局限，近期的努力（包括我们与更广泛的社群合作、致力于定义统一 T 矩阵数据格式的工作） [25], 凸显了对标准化文件和结构良好的元数据的需求，以使 T 矩阵数据集清晰、兼容且易于重用。所提出的基于 HDF5 [26] 的格式将 T 矩阵、电磁模式的定义、散射体几何结构与材料，以及有关数据计算方式的所有信息，整合到单一、有序且机器可读的结构中。这项标准对于大规模共享 T 矩阵以及支持纳米光学界的 FAIR（可查找、可访问、可互操作、可重用）数据实践至关重要 [27] 。

在此基础上，我们在这里推出一个专用门户网站，旨在简化 T 矩阵的存储、探索与重用。该门户可通过 https://tmatrix.scc.kit.edu访问。研究人员可以通过多种上传方式导入标准化 HDF5 文件，包括单个文件、压缩归档文件（ZIP）或文件夹；门户还会自动提取、验证并为其元数据编制索引。用户友好的界面支持基于几何形状、材料、波长及其他关键属性的高级搜索、筛选和可视化功能。此外，该平台还提供开放 API，支持自动查询、上传和检索 T 矩阵，从而便于与外部仿真流程和机器学习工作流无缝集成。通过将 T 矩阵数据汇集到一个共享平台，该门户是迈向社群范围内标准化光学散射数据生态系统的重要一步，也为未来的大规模 T 矩阵存储库和分析工具奠定了基础。

然而，我们在此并不仅仅是要介绍该数据库。同时，我们还希望概述几个说明性示例，展示如何利用这些数据，在由散射结构组成的光子材料这一更广泛的背景下，解决信息驱动研究问题。基本上，我们可以沿着不同的

维度对研究问题进行分类。一方面，我们可以讨论正向问题与逆问题。在正向问题中，我们希望根据给定的结构 [28, 29], 计算其光学响应；而在逆问题中，我们旨在确定能够产生所需光学响应的结构 [30–33]。通常，可以利用基于此类数据库中的数据训练的人工神经网络，高效地学习这种结构-性质关系。另一方面，我们可以区分这样两类情形：一类是某个物体的 T矩阵（或光学响应的另一种表示）具有相关性 [34–38]；另一类是由此类散射体构成的光子材料的光学响应具有相关性 [39–41]。许多研究工作聚焦于物理信息神经网络或其他优化方法 [42–46]。在本文中，我们将通过精选示例说明，如何利用当前数据库中已有的数据来解决此类及类似的研究问题。

作为一项总体构想和长远愿景，我们提议开发一种人工神经网络，使其能够充当通用麦克斯韦求解器，适用于广泛频率范围内的任意结构。经过训练后，即使面对大型、空间结构复杂的光子材料，也能以相对较低的资源消耗，在较短时间内完成推理。然而，不应仅仅为了生成训练数据这一特定目的而生成此类网络的训练数据。那将耗费前所未有的能源和资源，难以令人信服。反之，如果我们整个学界将所有仿真的结果——这些仿真本就是日常研究的一部分——汇集到一个公共存储库中，就能根据具体需求加以利用，尤其是用于训练一个适用于通用麦克斯韦方程组的代理求解器。目前，我们很难设想如何整合各种麦克斯韦求解器产生的结果；不过，在这里，我们将整合范围限定为广义上依赖散射形式体系的那部分方法。

本文分为四个主要部分。在介绍研究动机的篇幅较长的引言之后，第二部分简要概述 T 矩阵形式体系的科学基础。第三部分介绍 T 矩阵数据库的功能及其访问方式。第四部分通过多种方法展示如何将机器学习方法应用于这些 T 矩阵数据。最后，本文以结论收尾。

T矩阵方法概要

T矩阵方法用于描述电磁相互作用，其核心思想是在给定频率下，将电磁场展开为矢量球面波（VSW）：入射场对应正则波，散射场对应奇异波 [47]。这些矢量球面波是球坐标系中频域麦克斯韦方程组的解析解。将展开入射场的矢量球面波的振幅系数（以向量 $\mathbf{a}$ 表示）映射到展开散射场的矢量球面波的振幅系数（以向量 $\mathbf{p}$ 表示）的线性映射，可用以下矩阵—向量乘积表示：

$$\mathbf{p} = \mathbf{T}\mathbf{a}\,. \tag{1}$$

这里出现了T矩阵$\mathbf{T}$ ，其中包含了物体在线性近似下与光相互作用的全部信息。获得T矩阵后，即可计算任意线性入射场所产生的响应。因此，它非常适合用于存储。

对于球体，可通过米氏理论 [48]解析计算T矩阵。对于任意形状，则必须采用麦克斯韦方程组的数值求解器 [49–52]。由于对于非轴对称散射体，使用全波求解器计算T矩阵并达到足够大的多极阶数 $l_{\max}$ ，至少需要 $2l_{\max}(l_{\max}+2)$种照明情形，因此计算量相当大；若仅为后续单次使用T矩阵而进行这种计算，效率并不高。为确保不同计算代码之间的一致性，我们采用固定的矢量球面波（VSW）归一化约定，遵循Jackson [53] （不同于 [54]）。基模的排序也按 [25]中的说明固定。

当某个散射体将用于许多不同的排列方式时，基于T矩阵的散射方法尤为有用 [55, 56]。这是因为计算工作主要在于获取每个散射体的T矩阵，而计算由这些散射体组成的更复杂光子材料的响应所需的工作量则相当小。VSW 的平移定理允许将一个散射体散射的场展开到另一个散射体的原点处。这样便可将一个散射体产生的散射场纳入所有其他散射体的入射场中，从而在同一代数框架内实现完整的多重散射描述。通常，多重散射问题可表示为

$$\mathbf{p} = \left(\mathbb{1} - \mathbf{T}\mathbf{C}^{(3)}\right)^{-1}\mathbf{T}\mathbf{a}\,, \tag{2}$$

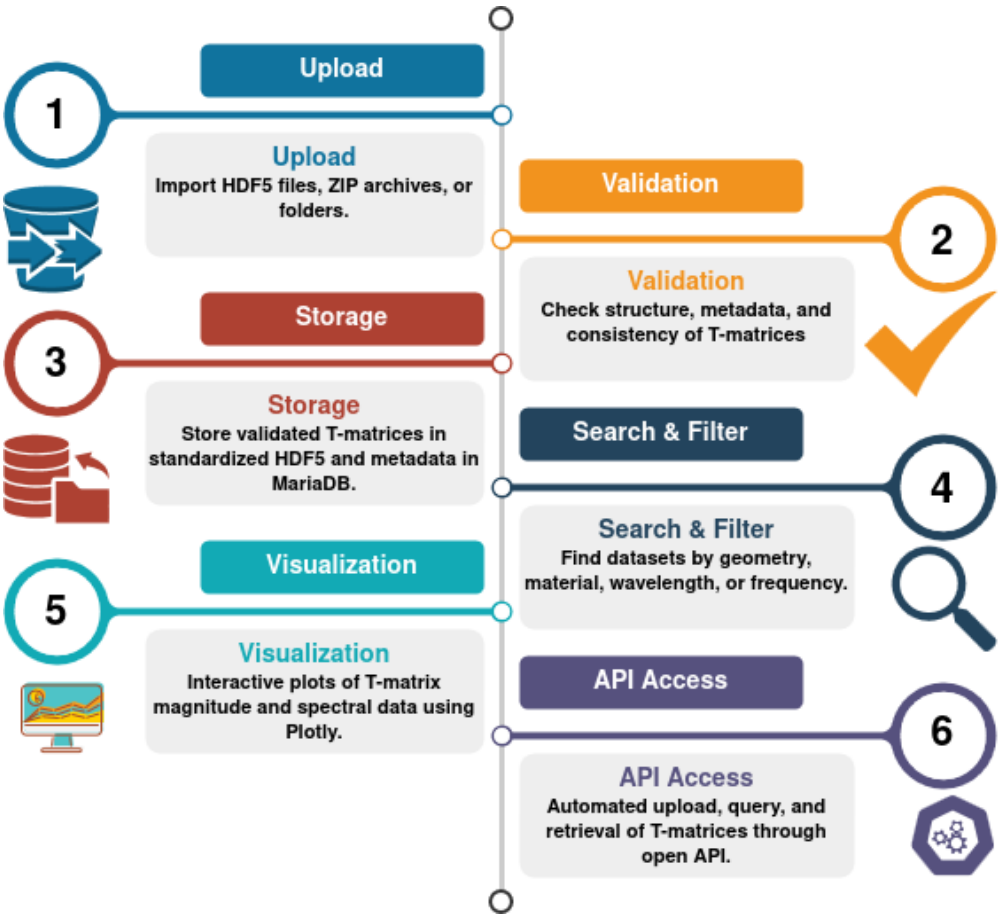


图 1：Daphona T 矩阵门户主要功能概览，包括上传、验证、存储、搜索与筛选、可视化和 API访问。

其中，$\mathbf{T}$ 是由各个散射体的T矩阵构成的分块对角矩阵，$\mathbf{C}^{(3)}$ 是包含平移系数的矩阵，而1是单位矩阵。这个简洁的公式不仅可用于描述有限簇，也可用于描述无限周期结构；本研究也将讨论后者的响应。为高效计算周期求和，我们采用Ewald求和法 [57]。需要注意的是，当各个散射体的外接球相互重叠时，底层的球面波展开不再能保证有效。不过，有几种策略可以克服这一限制 [58–61]。

T 矩阵数据库

为支持对 T 矩阵数据集的结构化访问、探索和复用，我们开发了 Daphona T 矩阵门户。这是一个基于网页的平台，可交互式搜索、筛选并导出以 T 矩阵形式表示的标准化光散射数据。它是核心 T 矩阵数据库的主要用户界面，支持围绕预计算光散射数据开展的研究工作流。门户不会将 T 矩阵视为简单的上传文件，而是将其作为结构化科学记录导入，并附上描述散射体几何形状、材料属性、光谱范围和计算细节的元数据。在将 T 矩阵文件添加到数据库之前，文件须经过验证，以确保满足两项关键要求：（i）数据集尚未存储在数据库中；（ii）数据集完全符合我们在相关出版物 [25]中提出的预定义 T 矩阵数据标准。只有通过验证且符合标准的数据集才会被编入索引并可供搜索。这种方法使用户能够获取一致、易于解读且可靠的数据，用于后续仿真和分析。

该门户提供结构化筛选系统，帮助用户提取在物理上一致的 T 矩阵数据子集。用户可根据几何形状、材料类型、光谱范围及其他元数据进一步细化结果，从而精准选择面向特定应用的数据集。筛选条件会动态应用，用户可逐步细化查询，而无需中断工作流程。因此，Daphona 门户既便于精准检索数据，也支持在大型 T 矩阵数据库中进行全面探索。

系统概述与功能工作流程

Daphona T 矩阵门户旨在构建一套完整的基础设施，用于预计算 T 矩阵的导入、验证、存储、发现与再利用。图 1 展示了其功能工作流程。用户可以单独上传 HDF5 文件、压缩归档文件或完整的目录集合。每份提交的数据都会经过自动验证，以确保结构正确、元数据完整，并符合 T 矩阵数据标准 [25]。只有符合要求的数据集才会被接收至存储库，并以标准化的 HDF5 格式存储，同时将结构化元数据保存于关系数据库中。

存储后，数据集即可通过交互式网页界面访问，该界面支持物理感知搜索与筛选，并可视化所选散射量

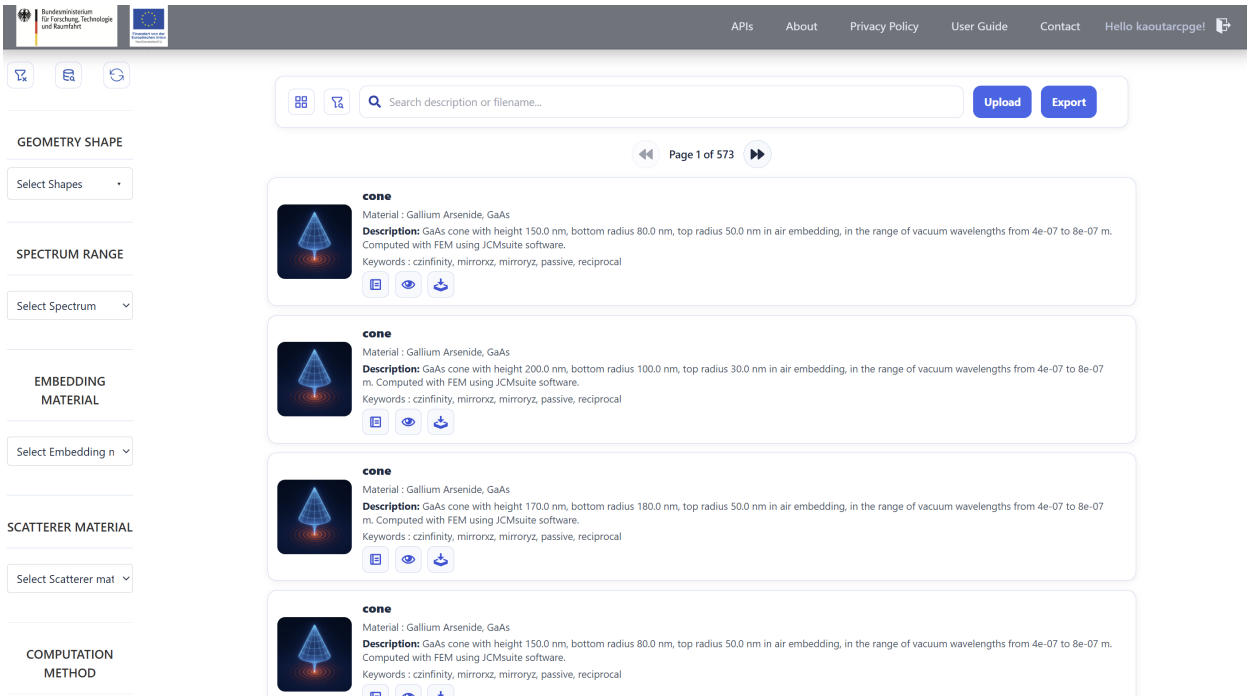


图 2：Daphona T 矩阵门户的主探索界面，展示了可搜索的存储库视图，其中包含结构化的数据集卡片和物理感知筛选控件。

。除了图形界面，该平台还提供开放 API，以支持自动上传、查询和检索工作流，从而能够集成到仿真流程和可复现研究环境中。

数据集存储库与探索界面

Daphona T 矩阵门户的主界面提供了一个结构清晰、直观易用的工作区，便于探索大量预先计算的 T 矩阵。完成身份验证后，用户将看到一个集中的存储库视图，其中包含数百个经过科学整理的数据集。每个条目均以交互式卡片呈现，概述关键的物理和计算元数据，包括几何形状、材料、维度参数、光谱范围及相关关键词。分页、网格/列表可视化模式和全局搜索栏有助于高效浏览。

左侧侧边栏提供物理感知筛选控件，用户可以按几何类型、光谱范围、嵌入介质、散射体

材料或数值计算方法筛选所显示的数据集。这样一来，主页不仅是浏览界面，也是一个科学工作空间，能够帮助用户快速识别并选择适用于其应用的相关 T 矩阵数据集。

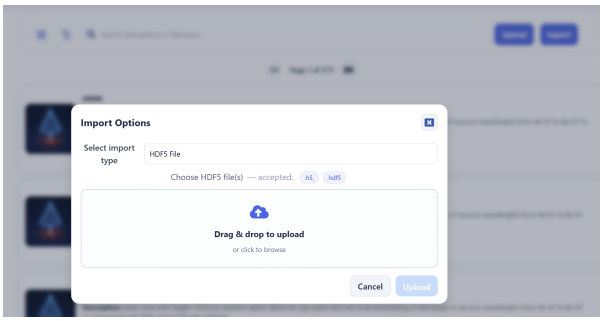
T 矩阵文件、验证与程序化访问

该门户通过直观的网页界面和程序化 OpenAPI 端点（见图 3）支持结构化数据上传。用户可以上传单个 HDF5 文件、压缩归档文件，或包含完整 T 矩阵数据集的目录集合。每次提交都会经过专门的自动验证流水线，严格检查结构完整性、元数据完整性、内部物理一致性，以及是否完全符合已发布的 T 矩阵数据标准 [25]。系统还会执行重复检测，以避免冗余存储并确保数据集溯源清晰。

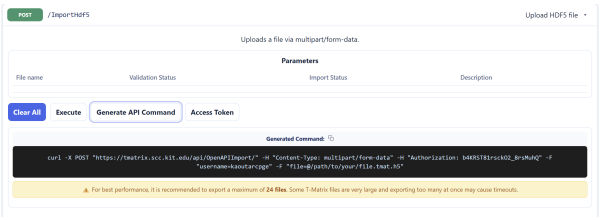
如果数据集不符合要求，上传将被安全拒绝，同时系统会向用户提供详细的诊断反馈，包括结构化错误消息以及如何更正文件的指导。相比之下，通过验证的数据集将被纳入存储库、建立索引，并立即整合到可搜索数据库中。数据集获准后，既可以通过图形界面以交互方式检索，也可以通过 OpenAPI 端点以程序化方式检索。导出功能同时支持筛选检索和批量检索，从而能够无缝集成到数值模拟工作流和大规模光学研究中。凭借稳健的上传机制、严格的验证流程、透明的反馈以及灵活的导出能力，Daphona T 矩阵门户不仅仅是一个浏览平台，更是一个用于提供高质量、标准化且可复用电磁散射数据的可信科学基础设施。其中包含的数据可用于回答更广泛的信息驱动研究背景下的具体科学问题。我们将在下一节对此进行详细阐述。

基于 T 矩阵数据的机器学习

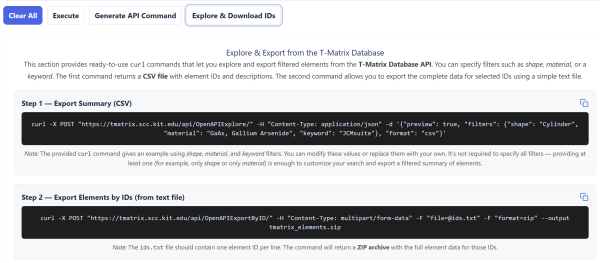
如上所述，纳米光子学中的深度学习方法涵盖正向和逆向任务。在这里，我们重点讨论 T 矩阵数据如何支持这些任务。正向问题具有确定性，可通过专用软件计算。不过，



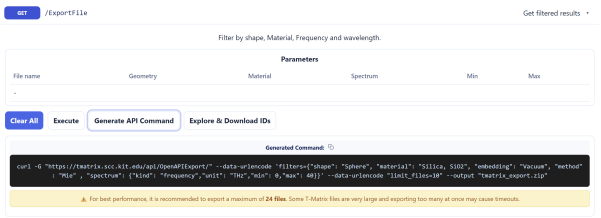
(a) 通过用户界面上传。



(b) 通过 OpenAPI 接口上传。



(c) 通过 API 探索并下载筛选数据集。



(d) 通过 API 或生成的命令导出筛选数据集。

图 3：Daphona T 矩阵门户通过图形用户界面和 OpenAPI 端点提供的上传、探索与导出功能。

训练模型可以大幅提高预测速度。逆问题本质上适定性不良且不唯一，因此无法通过解析求逆获得逆映射。

在这些工作流程中使用 T矩阵 的明显优势在于，当考虑平面波时，紧凑存储的数据包含了所有可能偏振和入射角照明下的响应。这使得能够高效生成针对各种目标定制的训练数据。虽然存储的 T 矩阵通常对应于单个散射体，但广泛使用的多重散射代码使我们能够模拟给定散射体的周期性排列和非周期性排列的光学响应，并将其响应同样用作目标 [62–68]。因此，T 矩阵数据库的存在提供了便捷、现成的训练数据来源。

为展示该数据库的实用价值，我们给出几个示例，并将结果分别按正向问题和逆问题进行组织。这些示例基于数据库中一个为说明目的而选取的子集。为此，我们从数据库中检索了三种

几何形状的 T 矩阵：圆柱体、圆锥体和长方体，它们均由硅制成并嵌入空气中。相应的 T 矩阵在 700 nm 至 1000 nm 的波长范围内可用，这也是我们分析所考虑的光谱范围。每个 T 矩阵均截断至第五多极阶数。由此得到的数据集每类约包含 3000 个样本，规模紧凑，足以满足我们的需求。以下所有示例均使用该数据集。

求解正向问题

我们首先处理正向问题，并根据表征散射体的一组给定参数预测光学响应。这里我们考虑两条路径。既可以单独预测单个散射体的T矩阵，也可以预测相关散射体实际排布的光学响应，因为这些性质可用现有的多重散射代码快速计算。T矩阵的维度通常高于例如超表面的反射光谱，因此似乎更难预测。我们希望研究在这两种情况下能否达到相当的预测精度。

预测T矩阵

首先，我们将目标设为T矩阵，将其表示为各个元素实部和虚部的拼接。每个波长的数据被视为独立的输入样本。在将数据划分为训练集、验证集和测试集时，我们确保训练集中出现的几何结构不会以不同波长出现在验证集和测试集中。

我们在此考虑的神经网络如图4(a)所示。它从每个数据集中接收类别标签、归一化后的几何参数和归一化后的波长作为输入，并将这些输入传递给一个多层感知机（MLP）。该多层感知机由一个带 GELU 激活函数的初始全连接层和四个宽度为 1024 的残差块组成。最后一层输出一个向量，其中包含给定物体的 T矩阵。在我们的实现中，我们使用 PyTorch 构建神经网络，并采用基于梯度的 AdamW 优化器进行训练。以下讨论的所有模型也采用这一做法

。该网络共有 27,021,528 个可训练参数。我们根据验证性能，通过手动扫描来选择超参数。整个网络如图4(a)所示，最终充当麦克斯韦方程组的代理求解器，用于预测给定输入物体的 T矩阵。

我们使用归一化对称 Frobenius 损失来训练网络，该损失定义为

$$\ell = \frac{\|\mathrm{T}_{\mathrm{pred}} - \mathrm{T}_{\mathrm{true}}\|_F^2}{\|\mathrm{T}_{\mathrm{pred}}\|_F^2 + \|\mathrm{T}_{\mathrm{true}}\|_F^2 + \varepsilon}\,, \tag{3}$$

其中， $\varepsilon > 0$ 是为保证数值稳定性而引入的一个小常数。与针对 T矩阵各项的标准均方误差相比，这种相对归一化方式能让整个数据集中的权重分配更加均衡。模型训练了 150 次迭代，并在此过程中达到收敛。

需要指出的是，很难整体评判预测得到的 T矩阵有多大用处，因为单个矩阵元素不一定对应通常考虑的任何可观测实验量。因此，我们还研究了由所考察散射体周期排列构成的超表面的反射率。为此，我们将预测得到的 T矩阵作为多重散射代码 `treams`[68]的输入，计算无限延伸的散射体二维周期排列的反射率。晶格周期根据散射体外接球的直径设定，并在两个面内方向各留出额外的 100 nm 间隙，以确定晶胞。在三个入射角下，计算平面波照明时的反射率：$0°$，$30°$ 和 $45°$；偏振为两种正交偏振，即宇称基中的横电和横磁。后续示例中也均采用这一设置。

我们在测试集上评估结果，并将其展示于图4(b)–(d)。为直观展示代理求解器能够预测的 T 矩阵，我们在图4(b)中展示了一个有代表性的测试样本。我们选取反射光谱变化幅度最大的测试样本，并展示该几何结构在预测误差最大的波长处的预测 T 矩阵和参考 T 矩阵。从这个意义上说，该样本可视为测试集中最难的样本。所研究对象的具体几何形状为圆柱体，半径为 110 nm，高度为 190 nm。图中还显示了预测 T矩阵与真实值之间的误差。我们可以清楚地看到，即使在这个例子中，整体 T矩阵的预测也相当准确，而误差仅出现在个别分量上。

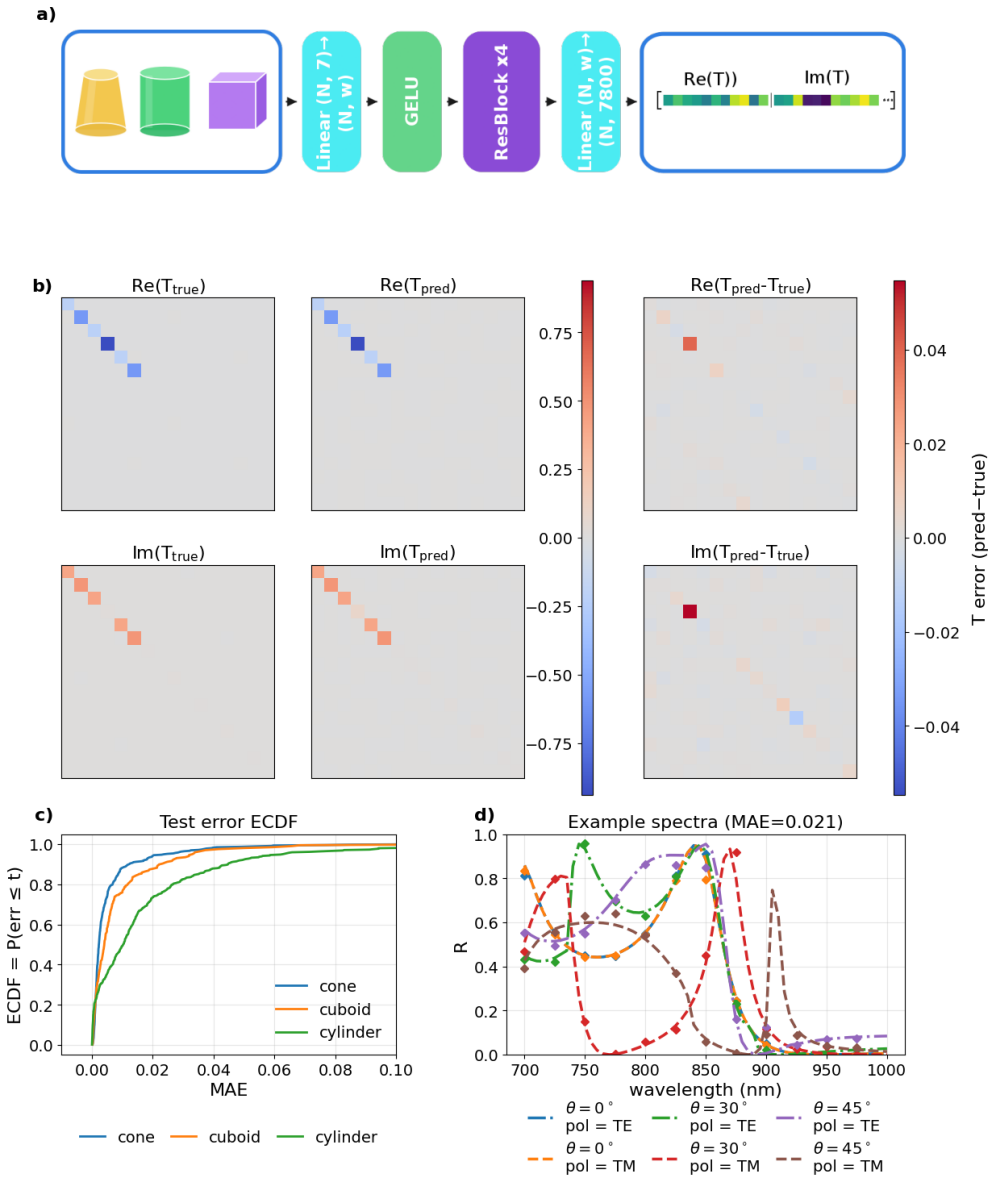


图4：用于预测 T 矩阵的代理模型的测试集评估。a) 代理网络示意图：该模型将几何类别和参数映射为各个散射体 T矩阵的实部和虚部。(b) 代表性测试几何结构（半径为 110 nm、高度为 190 nm 的圆柱体）的参考值（T_{true}）和预测值（T_{pred}）的 T矩阵元素实部和虚部，以及残差 $T_{pred} - T_{true}$。(c) 根据测试数据中所含样本的几何类别，计算由预测 T 矩阵得到的反射率值的经验累积分布函数（经验累积分布函数）。(d) 同一样本在三个入射角下的预测反射光谱（标记）和参考反射光谱（实线） $R(\lambda)$，以及两个

偏振。

测试误差的经验累积分布函数（ECDF），即测试样本中 MAE 低于阈值 t 的比例，揭示了如图 4(c) 所示的类别相关精度。圆锥体的误差最低（按几何形状划分，中位数为 0.002，第90百分位数为 0.012），其次是长方体（中位数为 0.004，p_{90} =0.022），而圆柱体最具挑战性（中位数为 0.01，$p_{90} = 0.045$）。这种类别差异可归因于数据集底层光谱依赖性和参数分布的不同。在所考虑的波长范围内，圆柱体呈现出更尖锐的共振，而圆锥体在参数空间中占据的区域更紧凑，因此更容易预测。

图 4(d) 中预测的反射光谱与参考反射光谱再现了所考虑波长范围内的主要光谱特征。即使对于测试集中最难的样本，整体光谱响应及其细节也都得到了准确预测。此前遇到的 T矩阵单个元素的误差，并未显著降低我们预测这一可观测量的能力。

预测超表面的反射光谱

接下来，我们评估正向问题中对反射光谱的直接预测，并训练一个专用网络来预测反射率，而不是预测T矩阵的所有元素。与之前相同，我们使用具有相同输入的残差MLP骨干网络，但由于输出维度较低，简化了输出头。在这种情况下，网络共有8,411,142个可训练参数。最后，应用sigmoid激活层，将预测结果限制在物理范围内。经过与前一个网络相同次数的迭代训练后，我们评估相同的特征曲线。图4(b)中的经验累积分布函数（ECDF）曲线现在是根据反射光谱的平均绝对误差（MAE）计算得出的。在这种情况下，ECDF曲线上升更快，同时保持了相同的性能排序。

图 5(c) 中同一代表性示例的光谱很好地再现了整体光谱行为。使用当前网络时，圆锥体的表现仍然最好（几何结构公平的中位数为 0.007 和 $p_{90} = 0.024$），其次是长方体（中位数为 0.013，$p_{90} = 0.048$），而圆柱体仍是最难处理的情况（中位数为 0.013，$p_{90} = 0.061$）。与这些结果相比，先前的网络表现更好，其中位数和 90^{th} 百分位数的误差都更低。这

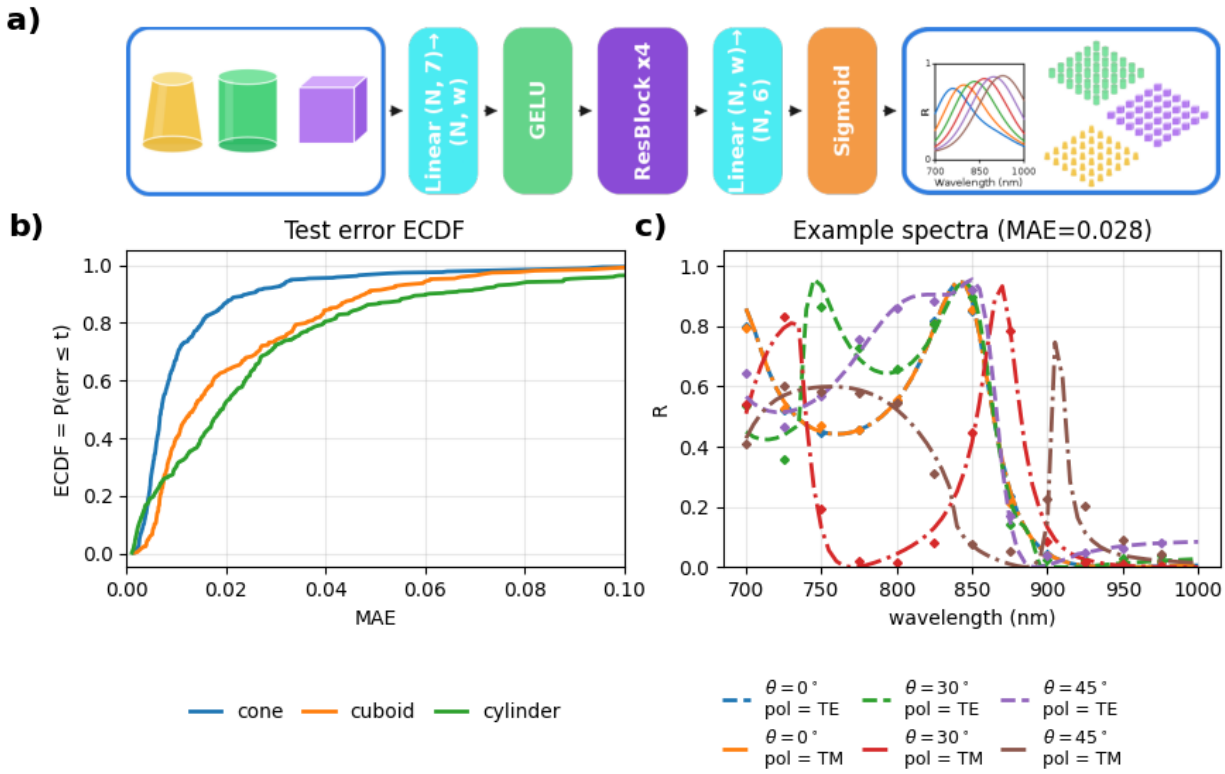


图5：反射率代理模型的测试集评估。(a) 代理网络示意图：该模型将几何类别及其参数映射为不同入射角和偏振下随波长变化的反射光谱。(b) 按几何类别展示预测反射光谱的平均绝对误差（MAE）经验累积分布函数（ECDF）。

(c) 对于一个具有代表性的测试几何结构，在入射角为 0°、 30°和 45° 时，横电和横磁偏振下预测的（标记）与参考的（实线）反射光谱 $R(\lambda)$。预测是在比实际训练网格更密的波长网格上进行评估的。

即使在使两个网络的参数量彼此更为接近之后，这一结论仍然成立。这表明，将T矩阵作为输出进行预测，可以有效地充当物理信息神经网络的第一部分，其中物理层通过多重散射形式体系实现。此外，由于预测T矩阵能够针对任意排布快速计算任意观测到的光学响应，因此采用这种方式可能更为有益。

求解逆问题

在建立了用于求解正向问题的代理模型之后，我们接下来讨论逆向设计。与上一节相同，我们将工作分为两个小节。一方面，我们展示如何推断散射体的几何参数，使其给出预先定义的T矩阵。另一方面，我们展示如何推断散射体的几何参数，使其在空间中周期性排列以形成超表面时给出预先定义的反射光谱。

根据 T 矩阵预测几何参数

我们在此考虑的第一个任务是推断形状类别和几何参数，使散射体能够产生目标 T 矩阵。该问题存在于多种场景中，从验证提交至数据库的 T 矩阵所声明的元数据，到逆向设计场景——在后者中，人们希望找到一种几何形状，使其 T 矩阵呈现预先规定的结构，例如电多极和磁多极贡献之间的特定关系。

需要补充的是，仅根据 T 矩阵，结合对称性考量，便已能够区分这三种形状。具体而言，长方体关于z轴具有镜像对称性，这可以通过以下宇称基公式进行验证：

$$T^{ij}_{\ell,m;\ell',m'} = (-1)^{\,i+j+\ell+\ell'+m+m'}\, T^{ij}_{\ell,m;\ell',m'}\,.$$

圆锥体具有轴对称性，因此满足旋转对称性约束

$$T^{ij}_{\ell,m,\ell',m'} = \delta_{mm'}\, T^{ij}_{\ell,m,\ell',m'}\,, \qquad T^{ij}_{\ell,m,\ell',m'} = (-1)^{i+j}\, T^{ij}_{\ell,-m,\ell',-m'}\,,$$

其中偏振指标为 $i,\ j \in \{1,2\}$。圆柱体同时满足上述两条选择规则。不过，我们将分类作为一项额外任务，以评估网络的性能。

训练该模型有不同的方法。在此，我们直接将整个T矩阵作为输入，并据此预测几何参数。图6(a)示意了为此所用的人工神经网络。除归一化 T 矩阵元素外，我们还将归一化波长作为输入。接下来，该网络以与先前基于多层感知机的模型相同的方式进行，使用初始全连接

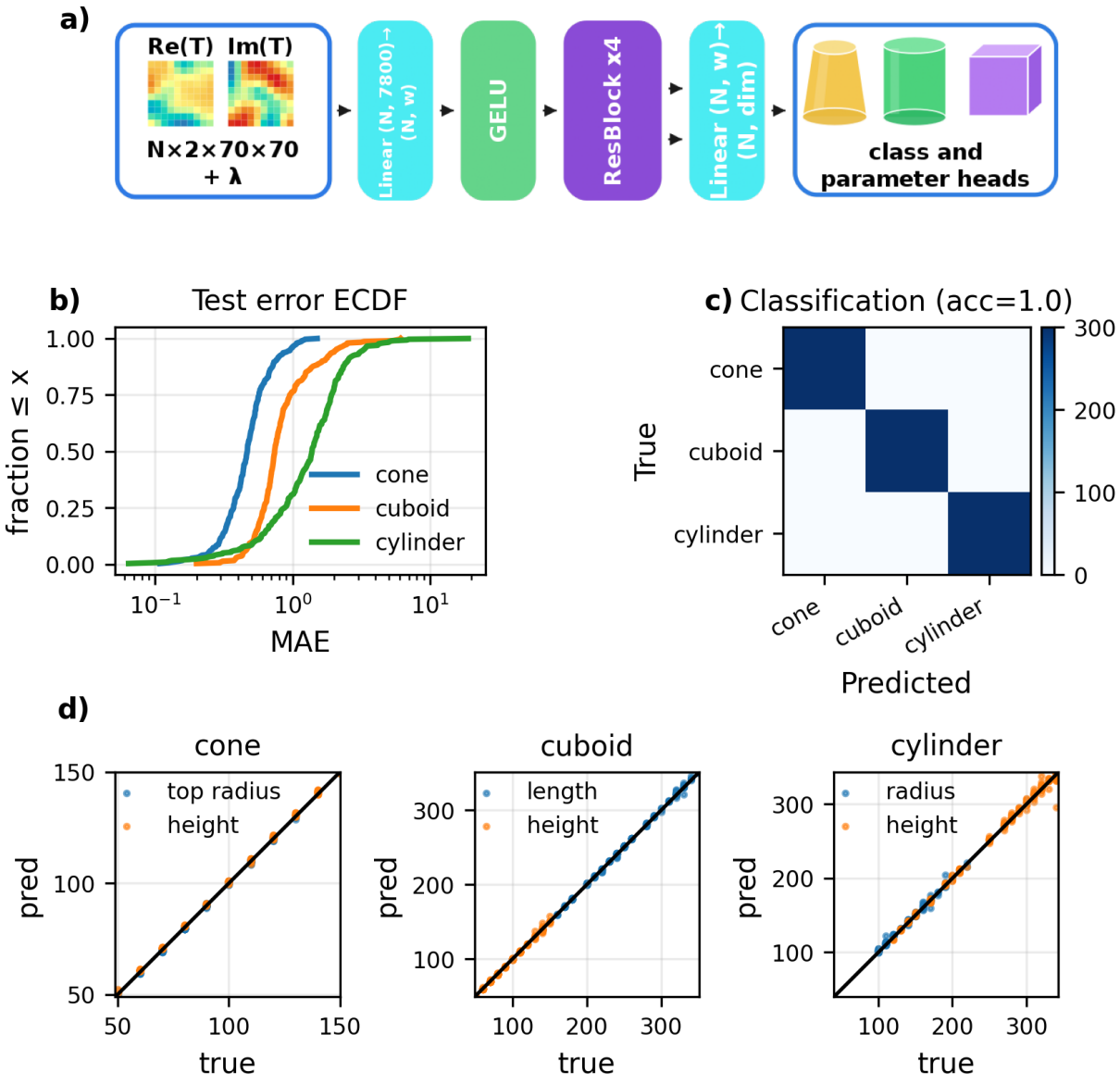


图6：基于T矩阵输入的多任务逆向模型在测试集上的评估。(a) 网络示意图：T矩阵和波长作为输入，残差多层感知机骨干网络生成潜在特征，并将其输入独立输出头，分别用于形状分类和几何回归。(b) 逐样本回归误差的逐类经验累积分布函数（ECDF）。(c) 预测形状标签（圆锥体、长方体、圆柱体）的混淆矩阵。(d) 圆锥体、长方体和圆柱体的预测几何参数与真实几何参数的奇偶图；对角线表示完全一致。

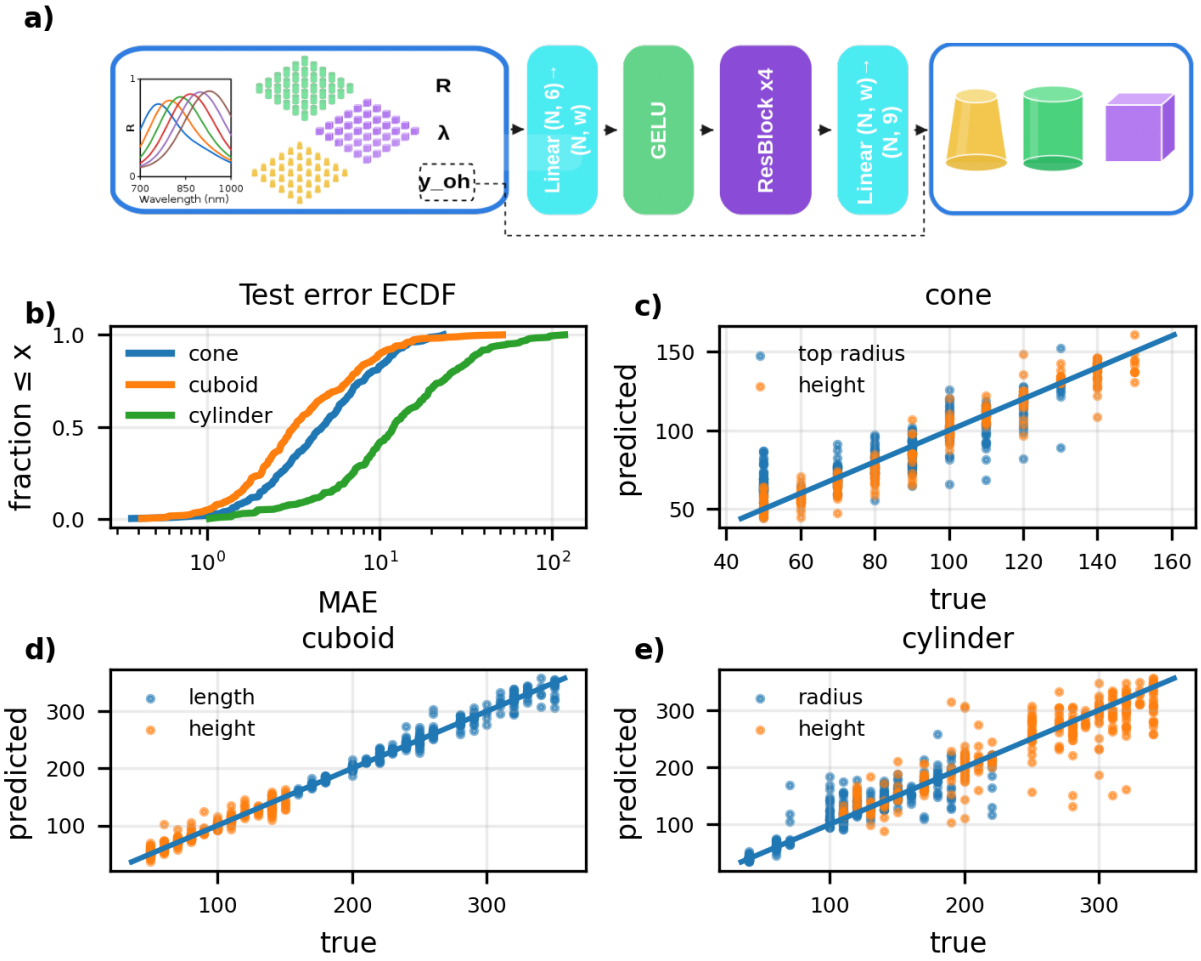


图 7：基于反射率输入的多任务逆向模型测试集评估。(a) 逐样本回归误差的逐类经验累积分布函数（ECDF）。(b) 各类别预测几何参数与真实几何参数的奇偶图（每种形状展示两个具有代表性的参数）；对角线表示完全一致。

层后接残差块。该网络采用多任务设置进行训练。因此，最终输出头中的一个用于预测形状类别，另一个用于回归相应的几何参数。总损失是加权和

$$\mathcal{L} = w_{\text{ce}}\,\mathcal{L}_{\text{cls}} + w_{\text{reg}}\,\mathcal{L}_{\text{reg}}\,, \tag{4}$$

其中，训练过程中逐渐增大 w_{reg}。与之前一样，我们在图 6(b) 中观察到圆锥数据集的误差分布更佳，其次是长方体数据集和圆柱体数据集。图 6(c) 中完美的分类结果体现了其出色的性能，而回归

误差也较小　所有结果均如此，这一点可从图 6(d 中数据紧密聚集在奇偶线周围看出).

根据超表面反射光谱预测几何参数

作为代理网络的一项互补逆向任务，我们考虑一种不同的设置：将超表面的反射率值用作网络输入。原则上，这相当于正向代理模型的架构镜像版本，只是交换了输入和输出的角色，如图 7(a) 所示；此外，还提供了形状标签，并省略了 sigmoid 函数。我们还将波长和目标形状标签作为模型的条件，以减少逆映射非唯一性所带来的歧义。在这种设置下，回归任务更加困难，因为反射率值无法提供唯一的信息，相似的数值可能对应不同的几何结构。因此，这个问题本质上适定性不良。从图 7(c)–(e) 中奇偶图的分布范围较广，以及图 7(b) 中经验累积分布函数图上的误差大得多，可以看出模型性能有限。即使使用完整的 T矩阵，也不能保证逆映射唯一。不过，在此处考察的可区分形状族中，歧义有所减少。

总的来说，这些示例表明，T 矩阵数据库可作为正向建模和逆向设计的起点，目标范围从完整的 T 矩阵到可测光谱。与此同时，当我们转而使用反射率等压缩观测量时，逆问题可能会变得更加模糊，这凸显了获取完整 T 矩阵的价值。

结论

我们介绍了 Daphona T 矩阵门户，这是一种以一致、标准化的形式存储、验证和重复使用 T 矩阵数据集的实用方式。我们诚邀更广泛的社群使用这一门户。通过结合统一的 HDF5 结构、自动验证和元数据索引，该门户让用户能够轻松找到相关散射数据，并通过网页界面或 API 获取数据，以用于脚本化工作流。

这些机器学习示例凸显了获取完整 T 矩阵的价值，它远不止于

简单的数据归档。对于正向问题，代理模型能够以合理的精度预测 T 矩阵；将这些预测结果输入多重散射求解器后，得到的反射光谱能够再现参考仿真的主要趋势和共振特征。对于逆问题，直接从 T 矩阵中学习能够可靠地识别形状，并针对所考虑的形状族准确地进行参数回归；相比之下，仅从反射率中学习的稳健性较差，这是因为目标本身存在固有歧义。

总体而言，所提出的基础设施表明，标准化的T矩阵数据集可在不同的数值工作流程和基于机器学习的工作流程中被高效复用，从而提高一致性与可复现性，并加强信息驱动的研究。我们鼓励学界使用该门户，并贡献更多数据集与反馈，以期扩大数据集覆盖范围，并通过复用减少冗余计算。随着覆盖范围不断扩大且元数据保持一致，该存储库还可促进在共同测试案例上对不同T 矩阵计算方法进行基准测试。

致谢

N.A. 感谢卡尔斯鲁厄光学与光子学学院（KSOP）的支持。

披露

作者声明不存在利益冲突。

数据可用性

本文所呈现结果的基础数据可通过 Daphona 门户 `https://tmatrix.scc.kit.edu/` 获取。用于复现结果的脚本可在 `https://github.com/tfp-photonics/tdat_ml` 获取。

[1] T. J. Antosiewicz 和 S. P. Apell，等离激元玻璃：非晶金属-介电质复合材料的光学性质，Optics Express **22**，2031（2014）。

[2] D. Theobald、D. Beutel、L. Borgmann、H. Mescher、G. Gomard、C. Rockstuhl 和 U. Lemmer，采用周期性 T 矩阵方法模拟大型无序纳米结构中的光散射，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**272**，107802（2021）。[3] S. Pourjamal、T. K. Hakala、M. Neˇcada、F. Freire-Fern´andez、M. Kataja、H. Rekola、J.-P. Martikainen、P. T¨orma¨a 和 S. Van Dijken，镍纳米盘阵列中的激光发射，ACS Nano**13**，5686（2019）。[4] O. Zhuromskyy，有效介质近似在介晶光学性质建模中的适用性，Crystals **7**，1（2016）。[5] P. Yazhgur、G. J. Aubry、L. S. Froufe-P´erez 和 F. Scheffold，胶体聚集体在多个长度尺度上的光散射，Optics Express**29**，14367（2021）。[6] W. Zhang、C.T.Chan 和 P.Sheng，由涂层球构成的光子带隙系统的多重散射理论及其应用，Optics Express**8**，203（2001）。[7] B. Zerulla、M. Krsti´c、D. Beutel、C. Holzer、C. W¨oll、C. Rockstuhl 和 I. Fernandez-Corbaton，一种用于模拟腔体内分子材料光学响应的多尺度方法，Advanced Materials**34**，2200350（2022）。[8] M. Poleva、B. Zerulla、C. Holzer、V. Bonaˇci´c-Kouteck´y、A. Pniakowska、J. Olesiak-Banska、R. Antoine、I. Fernandez-Corbaton、C. Rockstuhl 和 M. Krsti´c，采用尺度桥接方法预测有机金属纳米粒子的光学性质：嵌入的重要性，《物理化学杂志 C》**129**，17119（2025），https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c03310。[9] S. Wunderlich、B. Sch¨urer、C. Sauerbeck、W. Peukert 和 U. Peschel，用于二次谐波产生和和频产生的分子米氏模型，Physical Review B**84**，235403（2011）。[10] I. Sekulic、J. T. Wang、J. W. You 和 N. C. Panoiu，用于计算任意粒子簇光波散射时二次谐波产生的 T 矩阵方法：在连续谱束缚态非线性光学相互作用中的应用，Physical Review B**112**，035426（2025）。[11] B. Zerulla、D. Beutel、C. Holzer、I. Fernandez-Corbaton、C. Rockstuhl 和 M. Krsti´c，一种模拟分子纳米材料非线性光学响应的多尺度方法，Advanced Materials**36**，2311405（2024）。

[12] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, 和 A. A. Lacis，小颗粒对光的散射、吸收和发射（剑桥大学出版社，2002）。[13] T. Wriedt，光散射理论与计算机代码，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **110**，833（2009）。[14] G. Gantzounis 和 N. Stefanou，非球形颗粒光子晶体的层多重散射法，Physical Review B **73**，035115（2006）。[15]J. Markkanen 和 A. J. Yuffa，任意形状组成颗粒簇的快速叠加T矩阵解，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**189**，181（2017）。[16] U. Hohenester、M. ˇSimi´c、R. Hauer、L. Huber 和 C. Hill，光镊与光流体力诱导统一仿真平台，ACS Photonics **12**，2242（2025）。[17] L. Bi 和 P. Yang，采用不变嵌入T矩阵法准确模拟大气冰晶的光学性质，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **138**，17（2014）。[18] A. Rahimzadegan、T. D. Karamanos、R. Alaee、A. G. Lamprianidis、D. Beutel、R. W. Boyd 和 C. Rockstuhl，周期性超表面的综合多极理论，《先进光学材料》**10**，2102059（2022）。[19] P. Yang、H. Wei、H.-L. Huang、B. A. Baum、Y. X. Hu、G. W. Kattawar、M. I. Mishchenko 和 Q. Fu，近红外至远红外光谱区非球形冰粒子的散射与吸收特性数据库，《应用光学》**44**，5512（2005）。[20] Z. Meng、P. Yang、G. W. Kattawar、L. Bi、K. Liou 和 I. Laszlo，三轴椭球形矿尘气溶胶的单次散射特性：用于辐射传输计算的数据库，《气溶胶科学杂志》**41**，501（2010）。[21] R. Ekelund、P. Eriksson 和 M. Kahnert，非球形雨滴的微波单次散射特性，《大气测量技术》**13**，6933（2020）。[22] F. Cairo、T. Deshler、L. Di Liberto、A. Scoccione 和 M. Snels，混合相极地平流层云光散射建模研究，《大气测量技术》**16**，419（2023）。[23] J. Hellmers、G. Berg、J. Thomaschewski 和 T. Wriedt，Scattport光散射互联网信息门户：现状与进一步发展，《电磁与光散射 XII》，74（2010）。

[24] M. I. Mishchenko、G. Videen、V. A. Babenko、N. G. Khlebtsov、T. Wriedt、等，T矩阵理论：粒子电磁散射及其应用——综合参考数据库，J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**88**，357（2004）。[25] N. Asadova、K. Achouri、K. Arjas、B. Augui´e、R. Aydin、A. Baron、D. Beutel、B. Bodermann、K. Boussaoud、S. Burger、M. Choi、K. M. Czajkowski、A. B. Evlyukhin、A. Fazel-Najafabadi、I. Fernandez-Corbaton、P. Garg、D. Globosits、U. Hohenester、H. Kim、S. Kim、P. Lalanne、E. C. Le Ru、J. Meyer、J. Mun、L. Pattelli、L. Pflug、C. Rockstuhl、J. Rho、S. Rotter、B. Stout、P. T¨orm¨a、J. O. Trigo、F. Tristram、N. L. Tsitsas、R. Vall´ee、K. Vynck、T. Weiss、P. Wiecha、T. Wriedt、V. Yannopapas、M. A. Yurkin 和 G. P. Zouros，光散射响应的T矩阵表示：数据格式建议，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **333**，109310（2025）。[26] HDF Group，*HDF5* 文件格式规范，*1.12* 版（2022）。[27]M. D. Wilkinson、M. Dumontier、I. J. Aalbersberg、G. Appleton、M. Axton、A. Baak、N. Blomberg、等，科学数据管理与维护的 FAIR 指导原则，Scientific Data **3**，160018（2016）。[28] P. R. Wiecha 和 O. L. Muskens，深度学习与纳米光子学相结合：一种用于任意三维纳米结构近场和远场的通用精准预测器，Nano Letters **20**，329（2019）。[29] Y. Augenstein、T. Repan 和 C. Rockstuhl，用于自由形状电磁逆向设计的基于神经算子的代理求解器，ACS Photonics **10**，1547（2023）。[30] S. So、T. Badloe、J. Noh、J. Bravo-Abad 和 J. Rho，深度学习赋能纳米光子学逆向设计，Nanophotonics**9**，1041（2020）。[31] C. Kang、C. Park、M. Lee、J. Kang、M. S. Jang 和 H. Chung，大规模光子学逆向设计：计算挑战与突破，Nanophotonics **13**，3765（2024）。[32] P. R. Wiecha、A. Arbouet、C. Girard 和 O. L. Muskens，纳米光子学中的深度学习：逆向设计及其拓展，Photonics Research **9**，B182（2021）。[33] T. Ma、M. Tobah、H. Wang 和 L. J. Guo，纳米光子学逆向设计问题中基于深度学习模型的基准测试，Opto-Electronic Science**1**，210012（2025）。[34] Y. Jing、H. Chu、B. Huang、J. Luo、W. Wang 和 Y. Lai，用于通用散射矩阵的深度神经网络，Nanophotonics **12**，2583（2023）。

[35] S. Rezaei, D. Bronte Ciriza, A. Hassanzadeh, F. Kheirandish, P. G. Gucciardi, O. M. Marag`o, R. Saija, and M. A. Iat`ı, 《利用 T 矩阵数据训练神经网络加速光学捕获计算：在微塑料和纳米塑料中的应用》, ACS Photonics**11**, 3424 (2024).[36] L. Bi, Y. Xi, W. Han, and Z. Du, 《机器学习方法如何帮助计算广泛尺寸参数范围内非球形粒子的光学性质？》, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **323**, 109057 (2024).[37] S. So, J. Mun, and J. Rho, 《通过深度学习同时逆向设计材料与结构：利用核壳纳米粒子展示偶极共振工程》, ACS Applied Materials & Interfaces **11**, 24264 (2019).[38] Z. Zhang, W. Zhang, J. Yang, T. Pan, Y. Xu, and Y. Qin, 《由深度学习辅助的基于球谐函数的任意米氏散射体逆向设计》, Physical Review Applied **24**, 064002 (2025).[39] W. Li, H. Barati Sedeh, D. Tsvetkov, W. J. Padilla, S. Ren, J. Malof, and N. M. Litchinitser, 《利用机器学习设计具有定制多极共振的超原子》, Laser & Photonics Reviews**18**, 2300855 (2024).[40] S. So, J. Mun, J. Park, and J. Rho, 《重新审视超表面设计策略：基础物理、优化及其他》, Advanced Materials**35**, 2206399 (2023).[41] S. Gladyshev, T. D. Karamanos, L. Kuhn, D. Beutel, T. Weiss, C. Rockstuhl, and A. Bog- danov, 《具有偶然连续域束缚态的全介质超表面逆向设计》, Nanophotonics **12**, 3767 (2023).[42] Y. Deng, K. Fan, B. Jin, J. Malof, and W. J. Padilla, 《人工电磁材料中的物理信息引导学习》, Applied Physics Reviews**12**, 011331 (2025).[43] M. Zhelyeznyakov, J. Fr¨och, A. Wirth-Singh, J. Noh, J. Rho, S. Brunton, and A. Majum- dar, 《利用无数据机器学习优化大面积超透镜》, Communications Engineering **2**, 60 (2023).[44] M. V. Zhelyeznyakov, A. Zhan, and A. Majumdar, 《通过逆T矩阵方法设计和优化基于椭球散射体的超表面》, OSA Continuum **3**, 89 (2020).[45] V. Igoshin, A. Kokhanovskiy, and M. Petrov, 《最小化后向散射的米氏谐振器逆向设计》, Optics Letters**50**, 1735 (2025).

[46] O. K. C. Jackson, S. De Liberato, O. L. Muskens, and P. R. Wiecha, 《PyMieDiff：可微分米氏散射库》（2025），版本号：2。[47] P. C. Waterman, 《电磁散射的矩阵表述》，IEEE学报**53**, 805 (2005).[48] G. Mie, 《关于浑浊介质（特别是胶体金属溶液）的光学研究》，《物理学年鉴》**330**, 377 (1908).[49] G. Dem´esy, J.-C. Auger, and B. Stout, 《任意形状物体的散射矩阵：结合有限元与矢量偏波》，《美国光学学会杂志A辑》**35**, 1401 (2018).[50] M. Fruhnert, I. Fernandez-Corbaton, V. Yannopapas, and C. Rockstuhl, 《计算具有多个平面波照明的散射物体的T矩阵》，《贝尔施泰因纳米技术杂志》**8**, 614 (2017).[51] U. Hohenester, N. Reichelt, and G. Unger, 《使用 nanobem 工具箱计算纳米光子共振模式》，《计算机物理通讯》**276**, 108337 (2022).[52] M. Ganesh and S. C. Hawkins, 《三维电磁散射T矩阵计算》，《计算与应用数学杂志》**234**, 1702 (2010).[53] J. D. Jackson, 《经典电动力学》（1998）。[54] A. Doicu, T. Wriedt, and Y. A. Eremin, 《粒子系统的光散射：离散源零场法：理论与程序》（施普林格, 2006）。[55] L. L. Foldy, 《波的多重散射：I. 随机分布散射体的各向同性散射一般理论》，《物理评论》**67**, 107 (1945).[56] D. W. Mackowski and M. I. Mishchenko, 《球体集合的T矩阵与散射矩阵计算》，《美国光学学会杂志A辑》**13**, 2266 (1996).[57] P. P. Ewald, 《光学与静电晶格势的计算》，《物理学年鉴》**369**, 253 (1921).[58] M. Bertrand, A. Devilez, J.-P. Hugonin, P. Lalanne, and K. Vynck, 《用于高效模拟分层介质中非球形粒子密集集合光散射的全局极化率矩阵法》，《美国光学学会杂志A辑》**37**, 70 (2020).[59] T. Martin, 《紧邻障碍物的T矩阵方法》，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**234**, 40 (2019).

[60] A. G. Lamprianidis、C. Rockstuhl 和 I. Fernandez-Corbaton, 《借助分布于散射体拓扑骨架上的多极源，超越瑞利假设》，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **296**, 108455（2023）。[61] D. Schebarchov、E. Le Ru、J. Grand 和 B. Augui´e, 《注意间隙：在相邻椭球体的 T矩阵计算中检验瑞利假设》，Optics Express**27**, 35750（2019）。[62] D. W. Mackowski 和 M. I. Mishchenko, 《用于并行计算机集群的多球体 T矩阵 Fortran 代码》，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **112**, 2182（2011）。[63]A. Egel、L. Pattelli、G. Mazzamuto、D. S. Wiersma 和 U. Lemmer, CELES：借助 CUDA 加速仿真大型球体集合的电磁散射，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**199**, 103（2017）。[64] A. Egel、K. M. Czajkowski、D. Theobald、K. Ladutenko、A. S. Kuznetsov 和 L. Pattelli, 《SMUTHI：用于仿真平面界面附近或之间多粒子光散射的 Python 软件包》，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **273**, 107846（2021）。[65] M. Neˇcada 和 P. T¨orm¨a, 《用于纳米光子学的多重散射 T矩阵仿真：对称性与周期晶格》，计算物理通讯**30**, 357（2021）。[66] D. Schebarchov、A. Fazel-Najafabadi、E. C. Le Ru 和 B. Augui´e, 《纳米颗粒组装体中的多重光散射：terms程序用户指南》，Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**284**, 108131（2022）。[67] A. Shalev、K. Ladutenko、I. Lobanov、V. Yannopapas 和 A. Moroz, 《Multem 3：用于光子晶体透射和能带计算程序的更新与修订版》，《计算机物理通讯》**301**, 109218（2024）。[68] D. Beutel、I. Fernandez-Corbaton 和 C. Rockstuhl, 《treams——一种基于 T矩阵的纳米光子学散射代码》，《计算机物理通讯》**297**, 109076（2024）。