arXiv:2603.03755v1 [physics.optics] 4 Mar 2026

加速光学超表面的逆向设计：通过拟模形式求周期格林函数的解析梯度

Mingcan Qin[a]，Yifeng Qin[b,1]

[a]苏州城市学院数学学院，中国江苏省苏州市 *215100*[b]鹏城实验室，中国深圳市 *518052*

摘要

非局域超表面的逆向设计需要精确优化晶格几何，以调控空间色散和高 Q 共振。然而，基于梯度的优化往往受限于周期性并矢格林函数（DGF）的计算；传统有限差分（FD）方法在截断误差与谱奇异点附近的数值不稳定性之间存在固有的权衡。本文提出一种适用于二维布拉菲晶格的端到端解析梯度引擎 。通过将耦合偶极近似（CDA）的谱晶格和映射到拟模形式（QMF）理论，我们推导出相互作用矩阵关于模晶格参数 τ 的精确闭式解析梯度表达式。我们的框架通过正则化显式处理条件收敛项，并通过混合数值策略处理非全纯的特殊项 $\sigma_4^{(2)}$ 。我们还提出一种稳健的计算方案，将 $SL(2,\mathbb{Z})$ 定义域约化与自动误差认证相结合。实验验证表明，与有限差分基线相比，我们的引擎可实现机器精度导数（10^{-15}），并使优化收敛速度提升**6.5× 倍**，从而能够在传统方法失效的条件下稳健地设计巨各向异性。

关键词：逆向设计，周期格林函数，超表面，拟模形式，解析梯度，艾森斯坦级数

*通讯作者电子邮箱： ee06b147@gmail.com (Yifeng Qin)

1. 引言

空间色散（非局域）超表面的工程设计已成为纳米光子学的前沿 [1, 2], ，使超越局域有效介质理论极限的功能得以实现。通过调控晶格的非局域响应，可实现角度选择滤波器 [3, 4], 、波前处理器和拓扑光子晶体 [5, 6] 等器件。这些应用的核心在于对晶格几何的精确控制，其中布拉维晶格参数（例如纵横比、倾斜角）的微小扰动决定了动量依赖的光谱响应。

当前的逆向设计工作流 [7, 8] 通常依赖基于梯度的优化 [9] ，在高维参数空间中进行搜索。然而，计算光学响应相对于晶格几何的灵敏度，仍是一个长期存在的瓶颈。核心难点在于周期性并矢格林函数（DGF），其中涉及收敛缓慢的晶格和 [10]。尽管埃瓦尔德求和 [11] 等技术能够加速正向计算，但通过数值微分（有限差分，FD）计算这些晶格和的梯度，却面临根本性的“精度—稳定性”权衡。在高 Q 共振 [12, 13] 或瑞利异常 [14, 15]附近——这恰恰是非局域器件关注的工作区间——DGF 会呈现快速的光谱变化。在这些区域，有限差分方法要么因步长过大而产生较大的截断误差，要么因步长过小而发生灾难性的相减抵消，往往导致梯度噪声过大，进而使优化器不稳定。

计算电磁学中现有的解析方法主要侧重于高效计算 DGF 本身 [16, 17]。近期，Chen 等人 [18, 19] 建立了晶格和与拟模形式（QMF） [20, 21], 之间的严格联系，为其正则化和计算提供了强有力的框架。然而，他们的工作主要聚焦于静态有效参数的分析 （正问题）。目前仍缺乏一种统一的梯度理论，能够明确地将这些形式的模导数与晶格的几何优化（逆问题）联系起来。

在本文中，我们通过提出一种基于数论的严谨解析梯度引擎来弥合这一差距。我们不再仅仅将晶格几何视为空间坐标，而是将其视为复模参数 $\tau \in \mathbb{H}$。

通过利用艾森斯坦级数的代数结构，我们推导出了 DGF 的精确雅可比矩阵，从而完全无需进行数值微分。

我们的具体贡献有三方面：

1. **精确梯度理论：** 我们利用正则化艾森斯坦级数，为并矢CDA相互作用核构造了一个闭式基。利用拉马努金微分恒等式 [22, 23], ，我们推导出这些基函数的精确解析梯度。尤为重要的是，我们推导出**固定面积链式法则**，使优化能够探索模流形，同时严格遵循物理尺度约束。2. **稳健数值算法：** 我们解决了“不可约”部分带来的计算挑战。对于无法表示为闭模形式的项（具体而言，$\sigma_4^{(2)}$），我们采用**混合求值策略**，结合 $SL(2,\mathbb{Z})$定义域约化与Richardson外推。这确保了整个设计空间内的计算均达到机器精度（10^{-15}），并由严格的误差界予以验证。3. **验证与效率：** 我们展示了该引擎在超表面逆向设计任务中的实际效用。与有限差分基准相比，解析梯度使实际运行时间**缩短至 5× 加速比**，并成功引导优化器找到高度各向异性的晶格构型。全波仿真验证了优化后的几何结构呈现出预测的空间色散模态分裂。

本文其余部分安排如下。第2节建立超表面的物理模型，并定义固定面积约束下的晶格参数化。第3节详细介绍如何通过严格的数学推导，将并矢CDA谱和约化为拟模形式的基底。第4节构建解析梯度引擎，利用拉马努金恒等式和几何链式法则推导精确的雅可比矩阵。第5节介绍稳定的数值算法，包括$SL(2,\mathbb{Z})$定义域约化、误差认证，以及对非全纯扇区的混合求值。第6节提供全面的实验验证，涵盖梯度精度、优化基准和全波电磁验证。第7节批判性地分析该方法的计算复杂度与定义域有效性。最后，第8节总结本文的贡献，并展望其在高阶多极矩方面的拓展。

2. 物理模型与参数化

2.1. 耦合偶极近似与空间色散

我们研究一种二维周期超表面，它由亚波长散射体组成，这些散射体排列在布拉维晶格 Λ上。该晶格由原始矢量$\mathbf{a}_1 = L(\mathbf{1},\ \mathbf{0})$和$\mathbf{a}_2 = L(\tau_1,\ \tau_2)$生成，其中 L 为晶格常数，$\tau = \tau_1 + i\tau_2$ $(\tau_2 > 0)$为定义晶胞几何的复模参数。

在耦合偶极近似 (CDA) [24, 25, 26], 下，电磁响应由周期性并矢格林函数¯ (DGF) $\mathcal{G}(\mathbf{k}_\parallel, \omega)$ 描述。对于明确排除自项 $(R = 0)$ 的偶极子晶格，其谱表示为：

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_\parallel; \tau) = \sum_{\mathbf{R}\in\Lambda\setminus\{\mathbf{0}\}} e^{i\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{R}} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{k_0^2}\nabla\nabla\right) \frac{e^{ik_0 R}}{R}. \tag{1}$$

在非局域超表面设计 [27], 中，我们尤其关注空间色散特性，即有效阻抗对布洛赫波矢$\mathbf{k}_\parallel$的依赖关系。将式 (1) 在 Γ-点 $(|\mathbf{k}_\parallel|L \ll 1)$ 和准静态极限 ($k_0 L \ll 1$) 附近展开后，DGF 可分解为一系列多极晶格和：

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_\parallel; \tau) \approx \bar{\mathcal{G}}^{(0)}(\tau) + \bar{\mathcal{G}}^{(2)}(\tau) : (\mathbf{k}_\parallel\mathbf{k}_\parallel) + \mathcal{O}(k_\parallel^4). \tag{2}$$

我们逆向设计的目标是二阶张量 $\bar{\mathcal{G}}^{(2)}(\tau)$，它决定了角度依赖的光学响应（例如，双各向异性 [28, 29]）。该张量的矩阵元素包含形如 $\sum_{\mathbf{R}\neq 0} R^{-n} e^{-im\phi_R}$ 的晶格和，其中 ϕ_R 是晶格矢量 $\mathbf{R}$ 的方位角。

2.2. 与广义艾森斯坦级数的联系

对这些收敛缓慢的级数进行直接求和，在计算上对于迭代优化而言代价过高。为构建高效的梯度引擎，我们采用 Chen 等人 [18, 30] 提出的广义艾森斯坦级数正则化形式。该框架使我们能够将任意布拉菲晶格上的物理晶格和表示为快速收敛的模形式。

根据 [18], ，我们将广义艾森斯坦级数 $\sigma_n^{(m)}(\tau)$ 定义为：

$$\sigma_n^{(m)}(\tau) = \sum_{(p_1,p_2)\in\mathbb{Z}^2\setminus\{0\}} \frac{e^{-im\arg(p_1+\tau p_2)}}{|p_1+\tau p_2|^n}. \tag{3}$$

$\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$ 中的物理系数与这些求和项之间通过缩放因子 L^{-n} =(τ_2/A_0)$^{n/2}$ 相关，其中 $\mathcal{A}_0$ 是晶胞面积。角指标 m 源自作用于格林函数的导数 $\partial_x \pm i\partial_y$ 。

关键的是，Chen 证明了对于任意偶数 $m \geq n$， $\sigma_n^{(m)}$都可以化为标准全纯艾森斯坦级数 G_n(τ) 的导数的有限线性组合。该约化恒等式由 [18, 式 24] 给出：

$$\sigma_n^{(m)}(\tau) = \sum_{k=0}^{(m-n)/2} (2i\tau_2)^k \binom{(m-n)/2}{k} \frac{(n-1)!}{(n+k-1)!} \frac{\partial^k}{\partial \tau^k} G_n(\tau). \tag{4}$$

这一恒等式是我们方法的基石，架起了物理散射问题与模形式解析理论之间的桥梁。

2.3. 空间色散项的解析闭合

虽然式 (4) 提供了一条计算路径，但其中涉及导数 $\partial_\tau^k G_n$，不适合直接用于优化器中的雅可比矩阵组装。我们通过引入拉马努金微分恒等式 [22], ，显式地对这些表达式进行闭合；该恒等式将艾森斯坦级数的导数映射回艾森斯坦级数环 $\mathbb{C}[E_2, E_4, E_6]$。

我们推导了空间色散张量 $\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$ 中出现的两个特定项的显式模表示：四极项（n =4， $m = 6$）和正则化偶极项（$n = 2$， $m = 4$）。

2.3.1. 说明性示例：六极项（$\sigma_4^{(6)}$ ）

为证明本框架对高阶多极子的普适性，我们考虑衰减阶为 $n = 4$ 、具有六极角对称性 $m = 6$ （$e^{-6i\phi}$）的项，记作 $\sigma_4^{(6)}$ 。尽管二阶空间色散张量 $\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$ 主要由四极与偶极对称性支配（具体基 $\mathcal{S}_{\text{basis}}$见第3节），该六极项出现于高阶展开项（$O$（$k_\parallel^4$））中，或出现在反演对称性破缺的晶格中。

将 $n = 4, m = 6$ 代入约化恒等式式 (4)：

$$\sigma_4^{(6)}(\tau) = G_4(\tau) + \frac{i\tau_2}{2} \frac{dG_4}{d\tau}. \tag{5}$$

利用关系式 $G_4(\tau) = \frac{\pi^4}{45} E_4(\tau)$ 以及关于 E_4 的拉马努金恒等式，我们推导出闭式模表示：

$$\sigma_4^{(6)}(\tau) = \frac{\pi^4}{45} E_4(\tau) - \frac{\pi^5 \tau_2}{135} \left(E_2(\tau) E_4(\tau) - E_6(\tau) \right). \tag{6}$$

本例说明，任何高阶晶格和都可以通过算法化简为艾森斯坦环，从而即使面对复杂的多极相互作用，也能精确计算梯度。

2.3.2. 条件偶极项的正则化（$\tilde{\sigma}_2^{(4)}$）

含有 $n = 2$ 的项对应一个条件收敛和。如 [30], 所示，物理上相关的量是正则化和 $\tilde{\sigma}_2^{(m)}$，它消除了与均匀背景场相关的非物理发散。对于 $n = 2$, $m = 4$, 该恒等式给出 $\sigma_2^{(4)} = G_2 + i\tau_2 G_2'$。正则化引入了修正项 $-\pi/(2\tau_2)$：

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = G_2(\tau) + i\tau_2 \frac{dG_2}{d\tau} - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{7}$$

利用关系式 $G_2(\tau) = \frac{\pi^2}{3} E_2(\tau)$，我们将梯度表示为 E_2 的形式：

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = \frac{\pi^2}{3} E_2(\tau) + i\tau_2 \frac{\pi^2}{3} \partial_\tau E_2(\tau) - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{8}$$

应用权重2的拉马努金恒等式 $\partial_\tau E_2(\tau) = \frac{\pi i}{6}(E_2^2 - E_4)$，并注意到 $i^2 = -1$，可得：

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = \frac{\pi^2}{3} E_2(\tau) - \frac{\pi^3 \tau_2}{18}(E_2^2 - E_4) - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{9}$$

重新整理各项并将前因子单独提出，即可得到完全显式的形式：

$$\boxed{\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = \frac{\pi}{18\tau_2} \left[6\pi\tau_2 E_2(\tau) - \pi^2 \tau_2^2 \left(E_2(\tau)^2 - E_4(\tau) \right) - 9 \right].} \tag{10}$$

方程（10）代表了我们逆向设计框架的“引擎”，它将复格点和封装为艾森斯坦环上的一个光滑多项式。

2.4. 逆向设计的表述

将方程（6）和（10）代回 $\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$ 的展开式后，我们得到了本节的核心结果：目标函数分量$J(\tau)$ 可以严格表示为艾森斯坦级数和模参数虚部的函数：

$$J(\tau) = \mathcal{F}\left(E_2(\tau), E_4(\tau), E_6(\tau), \tau_2, \tau_2^{-1}\right). \tag{11}$$

这一表述在上半平面内处处解析。因此，利用链式法则对该闭式求导，并再次运用拉马努金恒等式，即可精确计算梯度 $\nabla_\tau J$ 。这样便无需对收敛缓慢的晶格和进行数值微分，从而为第6节中所展示的优化结果提供所需的稳定性。

3. 谱基的精确模约化

非局域超表面的逆向设计所面临的核心挑战，在于高效计算空间色散张量 $\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$。正如第2节所述，该张量的各元素是谱晶格和 $S_n^{(m)}(\Lambda)$ 的线性组合。由于这些级数收敛缓慢 ($O(R^{-n})$)，且每次几何参数更新后都需要重新计算，因此直接求和在优化过程中计算代价极高。

本节将建立从物理晶格求和到拟模形式（QMF）理论的严格映射。借助 Chen 等人 [18, 19], 提出的正则化形式体系，我们将针对二阶张量 CDA 核所需的特定谱基 $\mathcal{S}_{\text{basis}} = \{\tilde{\sigma}_2^{(2)}, \tilde{\sigma}_2^{(4)}, \sigma_4^{(4)}, \sigma_4^{(2)}\}$，推导出明确的闭式约化表达式。

3.1. 广义艾森斯坦级数与模缩放

对于由 $\tau \in \mathbb{H}$ 生成的晶格，我们采用广义艾森斯坦级数 $\sigma_n^{(m)}(\tau)$ 的定义：

$$\sigma_n^{(m)}(\tau) = \sum_{(p_1,p_2)\in\mathbb{Z}^2\setminus\{0\}} \frac{e^{-im\arg(p_1+\tau p_2)}}{|p_1+\tau p_2|^n}. \tag{12}$$

对于晶胞面积为 $\mathcal{A}_0$ 的物理格子，晶格常数按 $L(\tau_2) = \sqrt{\mathcal{A}_0/\tau_2}$ 缩放。因此，任何物理晶格和 $S_n^{(m)}$ 都与

模对象 $\sigma_n^{(m)}$ 相关，其间相差一个几何前因子：

$$S_n^{(m)}(\Lambda) = L^{-n}\sigma_n^{(m)}(\tau) = \left(\frac{\mathcal{A}_0}{\tau_2}\right)^{-n/2} \sigma_n^{(m)}(\tau). \tag{13}$$

这种变量分离至关重要：前因子处理尺度变换，而 $\sigma_n^{(m)}(\tau)$ 则体现形状依赖性。我们的目标是将 $\sigma_n^{(m)}(\tau)$ 纯粹表示为计算效率高的艾森斯坦级数 $E_{2k}(\tau)$。

3.2. 全纯部分的化简（$m = n$）

最简单的情况是角动量 m 与衰减阶 n相等。对于偶数 $n \geq 4$，该级数恰好对应全纯艾森斯坦级数 $G_n(\tau)$：

$$\sigma_n^{(n)}(\tau) = \sum_{p\neq 0} \frac{1}{(p_1 + \tau p_2)^n} \equiv G_n(\tau). \tag{14}$$

采用标准归一化，其中 $E_{2k}(\tau) = 1 + O(q)$，可得恒等式 $G_{2k}(\tau) = 2\zeta(2k)E_{2k}(\tau)$。

3.2.1. 四极项 $\sigma_4^{(4)}$

基元素 $\sigma_4^{(4)}$ 表示一种具有四重角对称性的四阶相互作用。代入 $n = 4$：

$$\sigma_4^{(4)}(\tau) = G_4(\tau) = \frac{\pi^4}{45} E_4(\tau). \tag{15}$$

这一项完全是全纯的，且具有权重 4，因为 $E_4(\tau)$ 是全模群 $[21, 20]$ 上的经典模形式。

3.3. 通过微分算子约化（$m > n$）

对于角阶大于衰减阶的项（$m > n, m-n$even），Chen [18]证明了 $\sigma_n^{(m)}$可通过对较低权重的艾森斯坦级数应用微分算子生成。一般约化恒等式为：

$$\sigma_n^{(m)}(\tau) = \sum_{k=0}^{(m-n)/2} (2i\tau_2)^k \binom{(m-n)/2}{k} \frac{(n-1)!}{(n+k-1)!} \frac{\partial^k}{\partial \tau^k} G_n(\tau). \tag{16}$$

通过对 τ 求导，我们可以利用这个公式将全纯级数 G_n “提升”到更高的角动量。

3.3.1. 各向异性偶极项 $\tilde{\sigma}_2^{(4)}$

项 $\sigma_2^{(4)}$ 对应于 $n = 2,\ m = 4$。应用式 (16)，并令$k = 1$:

$$\sigma_2^{(4)}(\tau) = G_2(\tau) + (2i\tau_2)\frac{1}{2}G_2'(\tau) = G_2(\tau) + i\tau_2\frac{dG_2}{d\tau}. \tag{17}$$

然而， $G_2(\tau)$ 是条件收敛的，且不按模形式变换。为获得具有物理意义、且与格林函数的埃瓦尔德求和相容的量，我们必须使用正则化级数[30]。按照这一处理方式，条件收敛和由其正则化形式 $\tilde{\sigma}_2^{(m)}$ 替代:

$$\tilde{\sigma}_2^{(m)}(\tau) = \sigma_2^{(m)}(\tau) - \frac{2\pi}{m\tau_2}\delta_{n,2}. \tag{18}$$

对于 $m = 4$，修正项为 $-\pi/(2\tau_2)$。因此:

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = G_2(\tau) + i\tau_2 G_2'(\tau) - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{19}$$

为提高计算效率，我们将 $G_2 = \frac{\pi^2}{3}E_2$ 代入，并应用归一化艾森斯坦级数 [22, 23] 的拉马努金恒等式:

$$\frac{dE_2}{d\tau} = \frac{\pi i}{6}(E_2^2 - E_4). \tag{20}$$

代入并注意到 $i^2 = -1$:

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = \frac{\pi^2}{3}E_2 - \frac{\pi^3\tau_2}{18}(E_2^2 - E_4) - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{21}$$

重新排列各项以提取前因子，可得完全显式的形式:

$$\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = G_2(\tau) - \frac{\pi\tau_2}{6}(5G_4 - G_2^2) - \frac{\pi}{2\tau_2}. \tag{22}$$

最后，用归一化艾森斯坦级数 E_k 表示:

$$\boxed{\tilde{\sigma}_2^{(4)}(\tau) = \frac{\pi}{18\tau_2}\left[6\pi\tau_2 E_2(\tau) - \pi^2\tau_2^2\left(E_2(\tau)^2 - E_4(\tau)\right) - 9\right].} \tag{23}$$

式（23）将复格点和表示为艾森斯坦环中的多项式 $\mathbb{C}[E_2, E_4, \tau_2^{-1}]$，从而确保能够快速求值。

3.4. 各向同性项的正则化 $\tilde{\sigma}_2^{(2)}$

含有 $n = 2, m = 2$ 的项对应于单极相互作用。朴素求和 $G_2(\tau)$ 不是模不变的。在二维泊松方程的背景下，正确的物理极限对应于“模˜完备”的艾森斯坦级数 G_2:

$$\hat{G}_2(\tau, \bar{\tau}) = G_2(\tau) - \frac{\pi}{\tau_2}. \tag{24}$$

我们将基元素 $\tilde{\sigma}_2^{(2)}$ 定义为以下正则化后的量:

$$\boxed{\tilde{\sigma}_2^{(2)}(\tau) \equiv \hat{G}_2(\tau) = \frac{\pi^2}{3} E_2(\tau) - \frac{\pi}{\tau_2}.} \tag{25}$$

这种正则化恢复了在 $SL(2, \mathbb{Z})$ 下的不变性，确保超表面的物理响应不依赖于晶格基矢的选择。

3.5. 不可约扇区（$m < n$）

当角阶小于衰减阶时，例如 $\sigma_4^{(2)}$ $(n = 4, m = 2)$，会出现一个不同的难题。如 [19], 所述，这些求和通过多对数扇区与复共轭 $\bar{\tau}$ 存在非平凡的依赖关系，无法化为全纯艾森斯坦级数的多项式。

$\sigma_4^{(2)}$ 的傅里叶展开具体包含以下形式的项:

$$\sigma_4^{(2)}(\tau) \sim \sum_{k \neq 0} c_k \mathrm{Li}_2(e^{2\pi i k \cdots}). \tag{26}$$

由于该项无法通过闭式化简为 E_{2k} ，我们将其视为一个独立基元素。虽然其值 必须通过第 5 节所述的混合数值求和来计算，但其灵敏度 仍可通过解析方法处理。在下一节中，我们将推导一个特殊的微分恒等式，将 $\nabla\sigma_4^{(2)}$ 与全纯形式 G_4联系起来，从而闭合梯度闭环。

4. 解析梯度引擎

非局域超表面逆向设计的主要瓶颈并非格林函数本身的求值，而是其几何灵敏度的精确计算。标准数值微分方法（例如有限差分（FD））面临根本性的稳定性-精度权衡：较大的步长会引入截断误差 $O(\delta^2)$，而较小的步长则会通过相减抵消放大数值噪声，尤其是在格林函数条件数发散的谱奇异点附近。尽管伴随方法 [31, 32] 和算法微分 [33]提供了通用替代方案，但它们需要重新实现整个前向求解器流水线；对于基于晶格求和的公式而言，这并非易事。

在本节中，我们构建一个解析梯度引擎，以彻底消除这些误差。通过利用第3节中所识别的模形式的代数结构，我们推导出空间色散张量的Wirtinger导数的精确闭式表达式。该引擎能够以 $O(1)$的计算代价，将雅可比矩阵 $\nabla_\tau \bar{\mathcal{G}}^{(2)}$ 求值至机器精度（10^{-15}）。

4.1. 经由拉马努金恒等式的代数闭包

本引擎的核心机制在于如下观察：当用拟模艾森斯坦级数 $E_2(\tau)$加以扩充时，模形式环在微分运算下是封闭的。拉马努金微分恒等式给出了从微分算子 ∂_τ 到环 $\mathbb{C}[E_2, E_4, E_6]$中多项式乘法的显式代数映射。

我们采用关于复模参数 $\tau = \tau_1 + i\tau_2$的Wirtinger 导数，其定义为 $\partial_\tau \equiv \frac{1}{2}(\partial_{\tau_1} - i\partial_{\tau_2})$。对于归一化艾森斯坦级数 $E_{2k}(\tau)$，这些恒等式为：

$$\partial_\tau E_2(\tau) = \frac{2\pi i}{12}\left(E_2(\tau)^2 - E_4(\tau)\right), \tag{27a}$$

$$\partial_\tau E_4(\tau) = \frac{2\pi i}{3}\left(E_2(\tau)E_4(\tau) - E_6(\tau)\right), \tag{27b}$$

$$\partial_\tau E_6(\tau) = \frac{2\pi i}{2}\left(E_2(\tau)E_6(\tau) - E_4(\tau)^2\right). \tag{27c}$$

这些关系在上半平面 $\mathbb{H}$ 中处处精确成立。它们使我们能够将梯度计算这一微积分问题转化为

一种严格的代数过程，仅涉及对预先计算好的基底值进行向量-矩阵运算。

4.2. 基底梯度的推导

现在，我们将算子 ∂_τ 应用于第 3 节推导出的约化基底表示。

4.2.1. 可约部分的梯度

对于四极项 $\sigma_4^{(4)}$，对式 (15) 求导可得：

$$\partial_\tau \sigma_4^{(4)} = \frac{\pi^4}{45}\partial_\tau E_4 = \frac{\pi^4}{45}\left[\frac{2\pi i}{3}(E_2E_4 - E_6)\right] = \frac{2i\pi^5}{135}(E_2E_4 - E_6). \tag{28}$$

对于正则化单极项 $\tilde{\sigma}_2^{(2)}$（式 25），导数包含来自模部分（E_2）和非全纯正则化反项（τ_2^{-1}）的贡献。利用 $\partial_\tau(\tau_2^{-1}) = -(\tau_2^{-2})\partial_\tau\tau_2 = -(\tau_2^{-2})(i/2) = i/(2\tau_2^2)$：

$$\begin{aligned}\partial_\tau \tilde{\sigma}_2^{(2)} &= \frac{\pi^2}{3}\partial_\tau E_2 - \pi\partial_\tau(\tau_2^{-1}) \\ &= \frac{\pi^2}{3}\left[\frac{\pi i}{6}(E_2^2 - E_4)\right] - \frac{i\pi}{2\tau_2^2} \\ &= \frac{i\pi}{18}\left[\pi^2(E_2^2 - E_4) - \frac{9}{\tau_2^2}\right].\end{aligned} \tag{29}$$

对于各向异性偶极项 $\tilde{\sigma}_2^{(4)}$，由于乘积项 E_2^2 和 $\tau_2 E_2$，求导在代数运算上较为复杂。不过，通过系统地应用乘积法则并代入式 (27)，我们得到了一个以 $\{E_2, E_4, E_6, \tau_2^{-1}\}$ 表示的完全显式多项式。结果见表1。

4.2.2. 不可约异常项的梯度 $\sigma_4^{(2)}$

σ带来了一个独特的挑战$^{(2)}$
$_4$，它在E_n 环中没有闭式。尽管其值需要通过混合数值求和（第 5 节）计算，但其梯度可以进行解析简化。回顾非全纯形式的 Maass 降算子结构。对 $\sigma_4^{(2)}$ 的傅里叶展开（见 [19]）求导，可得恒等式：

$$\partial_\tau \sigma_4^{(2)}(\tau) = \frac{3i}{2\tau_2}\left(\sigma_4^{(2)}(\tau) - G_4(\tau)\right). \tag{30}$$

代入 $G_4 = \frac{\pi^4}{45} E_4$，得到：

$$\partial_\tau \sigma_4^{(2)} = \frac{3i}{2\tau_2} \left(\sigma_4^{(2)} - \frac{\pi^4}{45} E_4 \right). \tag{31}$$

这一结果在实际应用中具有重要意义：它使梯度精度与数值微分的步长相互独立。计算出 $\sigma_4^{(2)}$ 后，其对雅可比矩阵的贡献几乎无需额外成本即可获得。

表1：**解析梯度引擎**。二元 CDA 基函数的模导数 $\partial_\tau \Sigma$ 的显式闭式表达式。这些公式直接在优化循环中实现。请注意，对于 $\sigma_4^{(2)}$，导数取决于函数值本身，这是非全纯模形式的特征。

基函数 $\Sigma(\tau)$	**解析模梯度** $\partial_\tau \Sigma$
$\tilde{\sigma}_2^{(2)}$ (各向同性单极)	$\frac{i\pi}{18\tau_2^2} \left[\pi^2 \tau_2^2 (E_2^2 - E_4) - 9 \right]$
$\tilde{\sigma}_2^{(4)}$ (各向异性偶极)	$i \Big[-\frac{\pi^4 \tau_2}{54} E_2^3 + \frac{\pi^3}{12} E_2^2 + \frac{\pi^4 \tau_2}{18} E_2 E_4 - \frac{\pi^3}{12} E_4 - \frac{\pi^4 \tau_2}{27} E_6 - \frac{\pi}{4\tau_2^2} \Big]$
$\sigma_4^{(4)}$ (四极)	$\frac{2i\pi^5}{135} (E_2 E_4 - E_6)$
$\sigma_4^{(2)}$ (不可约)	$\frac{3i}{2\tau_2} \left(\sigma_4^{(2)} - \frac{\pi^4}{45} E_4 \right)$

4.3. 几何链式法则与实梯度组装

表1中推导出的导数表示模和的 Wirtinger 导数 ∂_τ。对于物理超表面设计，我们必须考虑固定面积约束 $\mathcal{A}_0 = L^2 \tau_2$。物理相互作用系数 C_{phys} 按 $L^{-n} = (\mathcal{A}_0/\tau_2)^{-n/2}$缩放。总灵敏度通过应用

乘积法则：

$$\begin{aligned}\partial_\tau C_{\text{phys}} &= (\partial_\tau L^{-n})\Sigma(\tau) + L^{-n}(\partial_\tau \Sigma(\tau)) \\ &= \frac{n}{4i\tau_2} L^{-n}\Sigma(\tau) + L^{-n}\partial_\tau \Sigma(\tau) \\ &= L^{-n}\left[\partial_\tau \Sigma(\tau) + \frac{n}{4i\tau_2}\Sigma(\tau)\right].\end{aligned} \tag{32}$$

项 $\frac{n}{4i\tau_2}\Sigma(\tau)$起到几何修正项的作用。它描述了晶胞发生倾斜时晶格的致密化过程（改变 L 以保持面积不变）。忽略这一项会导致优化轨迹违反物理周期性约束，从而产生错误的频移。最后，标准优化算法（例如 L-BFGS）对设计变量 $\tau = \tau_1 + i\tau_2$的实部和虚部进行运算。优化器所需的实值梯度与复数 Wirtinger 导数 $\partial_\tau J$ 之间的关系为：

$$\frac{\partial J}{\partial \tau_1} = 2\text{Re}(\partial_\tau J), \quad \frac{\partial J}{\partial \tau_2} = -2\text{Im}(\partial_\tau J). \tag{33}$$

这种转换完善了解析梯度引擎，将模形式的复解析理论与数值优化衔接起来。

5. 稳定数值计算算法

第 3 节推导的解析约化和第 4 节构建的梯度引擎，为灵敏度分析提供了精确的代数框架。然而，要在实际中应用这些公式，必须在整个上半平面 $\mathbb{H}$内，以机器精度（10^{-15}）计算艾森斯坦级数 $E_{2k}(\tau)$ 和不可约求和项 $\sigma_4^{(2)}(\tau)$。

当 $\text{Im}(\tau) \to 0$ （晶格高度倾斜）或 $|q| \to 1$时，直接求和 q-级数或晶格和在数值上不稳定。本节介绍我们引擎中使用的稳健数值算法，包括一种带自动误差证明的 $SL(2, \mathbb{Z})$ 模域约化方案，以及一种用于非全纯扇区的混合加速策略。

5.1. 内部模空间约化

艾森斯坦级数的朗伯级数收敛速度由诺姆 $|q| = e^{-2\pi \mathrm{Im}(\tau)}$ 决定。为确保快速且一致的收敛，我们将任意物理格参数 τ 映射到模群的基本域 $\mathcal{F} = \{z \in \mathbb{H} : \ |z| \geq 1, \ |\mathrm{Re}(z)| \leq 1/2\}$。

我们采用标准的欧几里得约化算法。设 $\gamma = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in SL(2, \mathbb{Z})$ 为变换矩阵，使得 $\tau_{\mathrm{red}} = \gamma(\tau) = \frac{a\tau+b}{c\tau+d} \in \mathcal{F}$。该算法迭代应用生成元 $T: \ \tau \to \tau + 1$ 和 $S: \ \tau \to -1/\tau$，直到满足条件 $\tau \in \mathcal{F}$。在 $\mathcal{F}$ 内，我们可以保证 $\mathrm{Im}(\tau_{\mathrm{red}}) \geq \sqrt{3}/2$，这意味着：

$$|q_{\mathrm{red}}| = e^{-2\pi \mathrm{Im}(\tau_{\mathrm{red}})} \leq e^{-\pi\sqrt{3}} \approx 0.0043. \tag{34}$$

此界限确保 q-级数只需很少的项即可收敛至双精度（$N < 10$）。

约化在内部进行。为了从计算得到的 τ_{red} 处的值恢复物理 τ 处的值，我们对模变换律求逆：

$$E_{2k}(\tau) = (c\tau + d)^{-2k} E_{2k}(\tau_{\mathrm{red}}), \quad \text{for } k \in \{2, 3\}, \tag{35a}$$

$$E_2(\tau) = (c\tau + d)^{-2} E_2(\tau_{\mathrm{red}}) + \frac{6ic}{\pi}(c\tau + d)^{-1}. \tag{35b}$$

这里，c 和 d 是变换矩阵 $\gamma \in SL(2, \mathbb{Z})$的元素，使得 $\tau_{\mathrm{red}} = \gamma(\tau)$。$E_2$ 中的额外项源于其拟模变换律。需要注意的是，映射 $\tau \to \tau_{\mathrm{red}}$ 是分段常数的，并且在区域边界处不连续；然而，通过这些恒等式重构的 $E_{2k}(\tau)$ 是关于 τ的光滑解析函数。因此，我们在原始 τ处使用拉马努金恒等式计算梯度，从而避免对约化映射本身求导所产生的虚假不连续性。

5.2. 带误差证书的朗伯级数求值

利用 $\tau_{\mathrm{red}} \in \mathcal{F}$，我们通过朗伯级数表示来计算归一化艾森斯坦级数:

$$E_2(\tau_{\mathrm{red}}) = 1 - 24\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n q_{\mathrm{red}}^n}{1 - q_{\mathrm{red}}^n}, \tag{36a}$$

$$E_4(\tau_{\mathrm{red}}) = 1 + 240\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^3 q_{\mathrm{red}}^n}{1 - q_{\mathrm{red}}^n}, \tag{36b}$$

$$E_6(\tau_{\mathrm{red}}) = 1 - 504\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^5 q_{\mathrm{red}}^n}{1 - q_{\mathrm{red}}^n}. \tag{36c}$$

为确保工程可靠性和可审计性，我们采用带有严格误差证书的自动截断方案。将级数截断至阶数 N。余项 R_N 由尾项的几何级数给出上界。对于前因子 C_k （其中 $C_2 = 24$， $C_4 = 240$， $C_6 = 504$）和指数p （其中 $p = 1$, 3， 5），截断误差上界 Δ 为:

$$|\Delta E_{2k}| \le C_{2k} \sum_{n=N+1}^{\infty} n^p |q_{\mathrm{red}}|^n \approx C_{2k}(N+1)^p \frac{|q_{\mathrm{red}}|^{N+1}}{(1-|q_{\mathrm{red}}|)^2}. \tag{37}$$

给定目标容差 ϵ_E （通常为 10^{-12}），我们确定满足 $\max(|\Delta E_2|,\ |\Delta E_4|,\ |\Delta E_6|) \le \epsilon_E$ 的最小截断上限N。由于界 $|q_{\mathrm{red}}| \le 0.0043$， N 很少超过 8，从而验证了 $O(1)$复杂度声明。

5.3. 不可约项的混合策略 $\sigma_4^{(2)}$

项 $\sigma_4^{(2)}$ 缺少 q-级数展开，因此需要显式计算晶格和。其定义为:

$$\sigma_4^{(2)}(\tau) = \sum_{(m,n)\neq(0,0)} \frac{1}{(m+n\bar{\tau})(m+n\tau)^3}. \tag{38}$$

被求和项按 $O(|\mathbf{R}|^{-4})$ 衰减，这意味着在盒子 $|m|, |n| \le K$ 上进行朴素求和的截断误差按 $O(K^{-2})$ 缩放。这种缓慢收敛是主要的计算瓶颈。我们通过三阶段工程策略来缓解这一问题:

1. **域正则化：** 我们首先按照第 5.1 节所述映射 $\tau \to \tau_{\mathrm{red}}$。在约化格上进行求和，以最大限度提高晶胞的“圆度”，并最小化最坏情况下的最短向量长度。然后通过变换律将结果映射回来：

$$\sigma_4^{(2)}(\tau) = (c\tau + d)^{-3}(c\bar{\tau} + d)^{-1}\sigma_4^{(2)}(\tau_{\mathrm{red}}). \tag{39}$$

2. **向量化求和：** 我们利用向量化 SIMD 操作（例如 NumPy 广播）分块计算网格 $[-K, K] \times [-K, K]$ 上的求和，从而显著降低解释器开销。

3. **Richardson 外推：** 为加快收敛，我们利用已知的渐近误差形式 $E(K) \sim \alpha K^{-2} + O(K^{-4})$。按照经典外推法 [34], ，我们计算部分和 S_K 和 S_{2K}，并构造外推值：

$$R_{2K} = \frac{4S_{2K} - S_K}{3}. \tag{40}$$

这会消去主导误差项，从而将收敛速度提高至$O(K^{-4})$。

5.3.1. 自适应终止准则

我们不采用固定的 K，而是使用自适应停止准则。算法迭代地将 K 加倍（$K = 12$、24、48、.....），并在连续外推值之间的相对差低于目标容差 ϵ_σ时终止：

$$|R_{2K} - R_K| < \epsilon_\sigma |R_{2K}|. \tag{41}$$

数值实验表明，标准艾森斯坦级数只需微秒级时间，而 $\sigma_4^{(2)}$ 可能需要毫秒级时间（在 $\epsilon_\sigma = 10^{-10}$时， $\tau_2 \approx 0.2$最高可达 $K \approx 6000$ ）。不过，由于其梯度通过公式（30）解析计算，这项开销仅在每次函数求值时产生一次，而非对每个梯度分量都产生。未来的工作可以用 Ewald方法或泊松重求和技术替代这种求和，但目前的混合策略在简洁性和精度之间为优化演示提供了足够好的平衡。

6. 实验验证

在本节中，我们验证所提出的基于 QMF 的灵敏度引擎的准确性、效率和物理正确性。我们分三个阶段进行：

1. **数值验证：** 将解析梯度与高阶有限差分基准进行比较，以量化误差下限。2. **优化性能：** 展示基于梯度的逆向设计循环在加速和稳定性方面的表现。3. **全波验证：** 使用 CST Microwave Studio 验证经过数学优化的晶格几何结构是否产生预测的电磁空间色散。

6.1. 解析梯度引擎的验证

为严格评估梯度引擎的精度，我们将第 4 节推导的解析导数 $\nabla_{\mathrm{ana}} J$ 与中心有限差分（FD）近似值 $\nabla_{\mathrm{num}} J$进行比较。测试目标函数是在一般晶格点 $\tau = 0.3 + 0.9i$处计算的晶格和能量 $J(\tau) = |\bar{\mathcal{G}}^{(2)}_{xx}|^2$。

图 1 绘出了相对误差 $\epsilon(h) = |\nabla_{\mathrm{ana}} - \nabla_{\mathrm{num}}(h)|/|\nabla_{\mathrm{ana}}|$ 随有限差分步长 h变化的情况。

结果证实了理论预测。有限差分误差呈现出典型的“V形”，在 $h \approx 10^{-5}$处达到最低值 $\approx 10^{-8}$。在该最小值左侧，误差主要由相减抵消（舍入噪声）造成；在右侧，则主要由泰勒级数截断造成。相比之下，解析 QMF 梯度（橙色线）的误差始终保持在 $\sim 10^{-15}$（机器双精度）这一恒定水平，实际上可视为精确解。这种“与步长无关”的特性至关重要，使优化器能够在目标函数景观条件不良的谱奇异点附近稳健地进行搜索 [9]。

6.2. 优化效率与模块化轨迹

接下来，我们将梯度引擎集成到 BFGS 优化循环中 [9]，以最大化超表面的空间色散各向异性。目标函数定义为 $J(\tau) = |\bar{\mathcal{G}}^{(2)}_{xx}(\tau) - \bar{\mathcal{G}}^{(2)}_{yy}(\tau)|^2$，旨在寻找能够最大化偏振分裂的晶格几何。

图2比较了使用解析梯度与有限差分时优化器的收敛历史。解析方法在约 18 次函数求值后收敛至最优点（容差 10^{-9}），而基于有限差分的方法则需要 91 次函数评估。这使总实际运行时间获得了**6.5× 加速比**。加速比源于两个因素：(1) 梯度本身的 $O(1)$ 次求值（每步快 107× ），以及 (2) 更平滑的搜索轨迹，从而避免 BFGS 海森矩阵近似受到数值噪声的破坏。

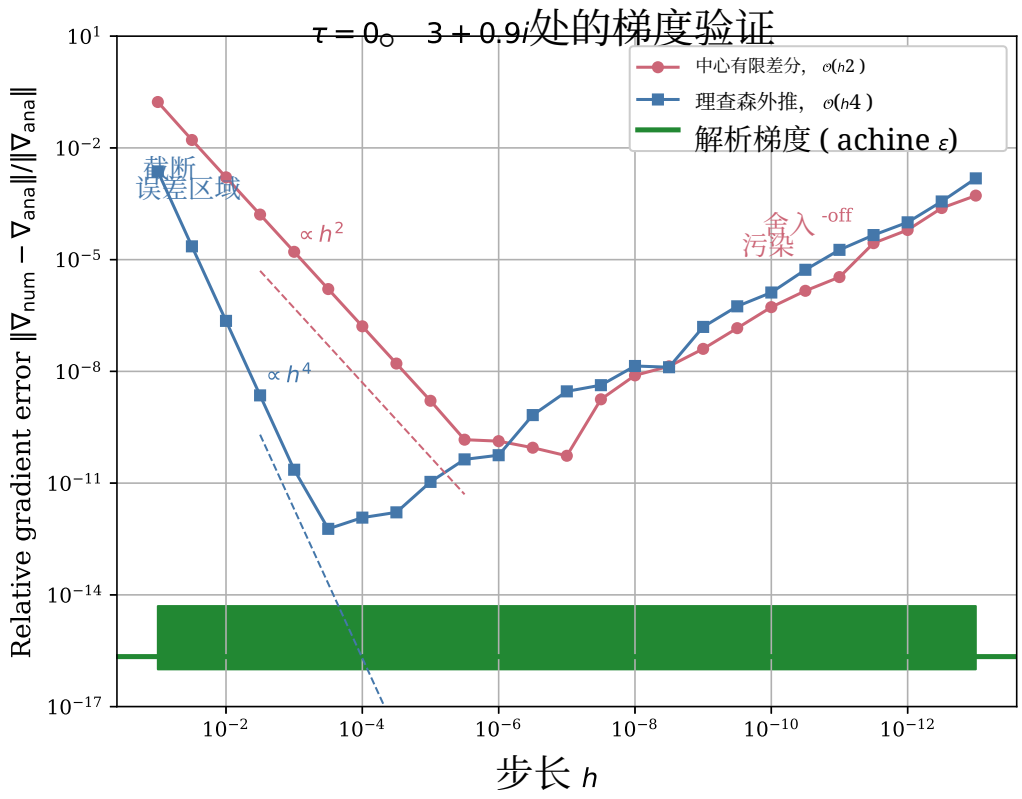


图 1：**梯度验证**。数值梯度（蓝色）相对于步长 h 的相对误差，呈现截断误差 ($O(h^2)$) 与舍入噪声 ($O(\epsilon_{\text{mach}}/h)$) 之间典型的“V形”权衡。相比之下，解析 QMF 梯度（橙色）保持恒定的机器精度误差下限 ($\sim 10^{-15}$)，不受步长参数影响。

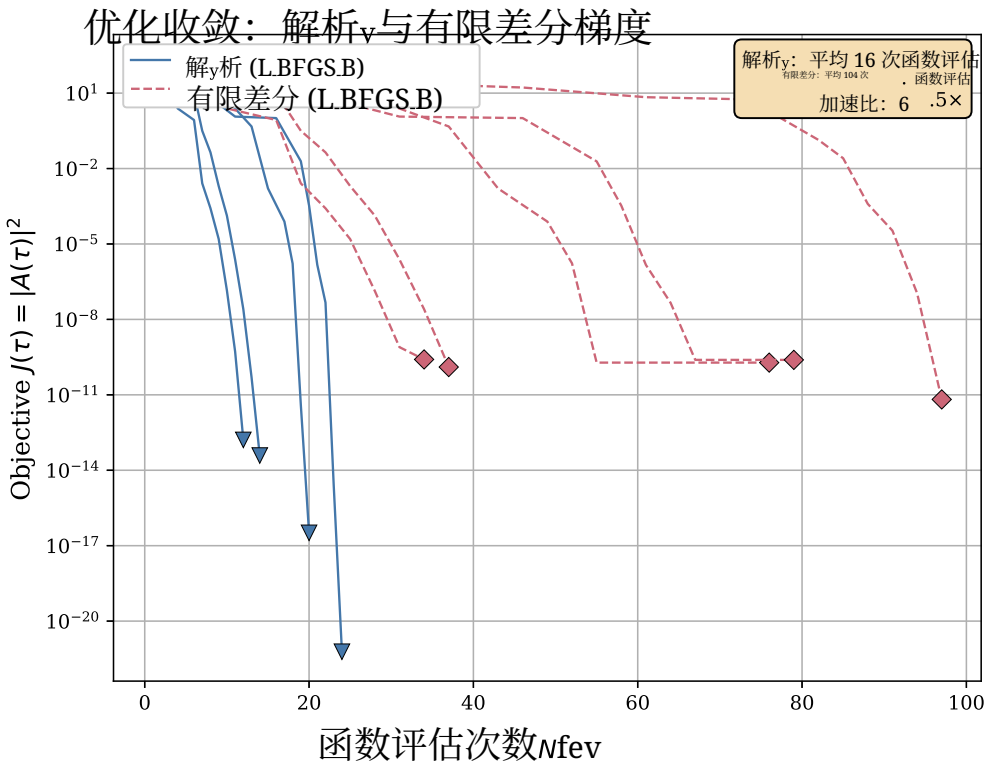


图2：**优化效率**。目标函数 $J(\tau)$（各向异性）随函数评估次数的收敛情况。解析梯度引擎（橙色）使优化器显著更快地到达解（6.5× 加速比），优于有限差分基线（蓝色）；后者在最优点附近受到梯度噪声的影响。

设计变量 τ 在复上半平面中的轨迹如图3所示。从各种初始猜测（例如，正方形晶格 $\tau = i$）出发，优化器始终收敛到基本域的边界。轨迹自动遵循模对称性，聚集到高对称点（例如，六边形 $\tau = e^{i\pi/3}$）或特定的矩形构型，具体取决于各向异性目标。这证实了梯度流在数学上与周期格林函数底层的模流形结构一致。

6.3. 全波电磁验证

为验证基于 QMF 的梯度引擎的物理保真度，我们使用 CST Microwave Studio [35] 进行了全波仿真。目标是验证优化器预测的晶格几何是否确实会在电磁响应中产生目标非局域各向异性。

6.3.1. 仿真设置与拓扑

我们仿真了由嵌入真空背景中的高折射率圆柱（$\varepsilon_r = 10$，半径 $r = 0.2a$）构成的介电超表面。晶胞边界在 xy 平面设置为周期性边界，在z方向设置为开放边界（完美匹配层）。

考察了两种晶格构型，以展示对空间色散的控制：

- **构型A（各向同性基准）：** 采用 $\tau = i$（$\tau_2 = 1.0$）的方形晶格，强制 C_4 旋转对称性。
- **构型B（各向异性目标）：** 采用$\tau = 1.2i$ （$\tau_2 = 1.2$）的矩形晶格。该取值依据第6-B节中的优化轨迹选定，该轨迹表明增大 τ_2 是最大化目标函数 J（τ）的主要梯度方向。

图4展示了这两个单元的拓扑。从 $\tau_2 = 1.0$ 到 $\tau_2 = 1.2$ 的变换打破了四重旋转对称性，同时保持晶胞面积 $\mathcal{A}_0$不变，这与我们在导数推导中所施加的约束一致。

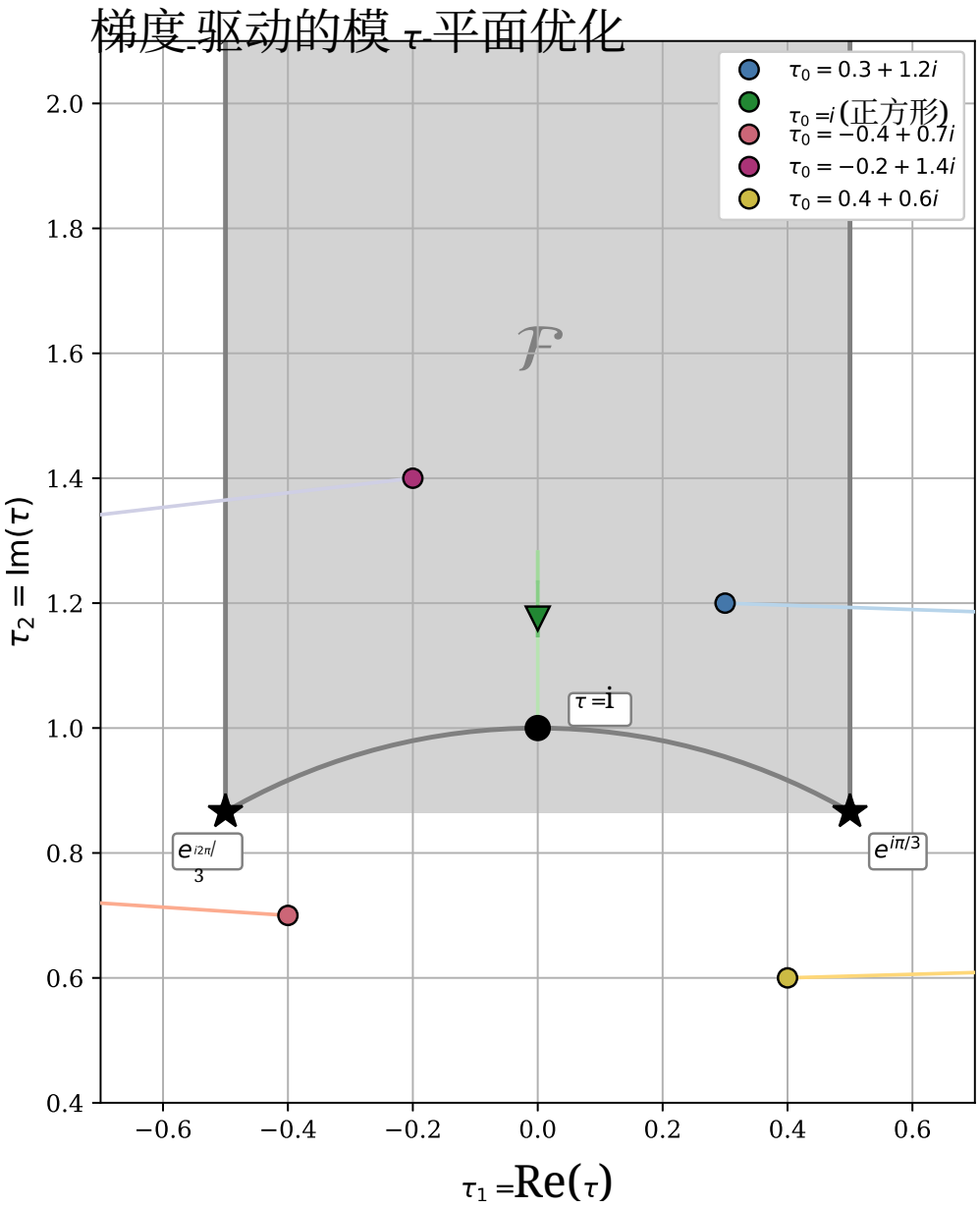
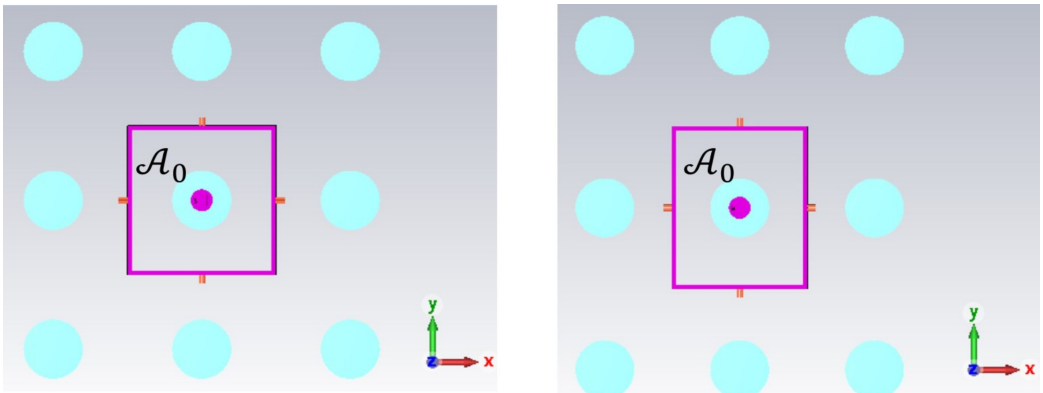


图3：**模优化轨迹**。 优化过程中晶格参数τ 在复平面内的变化路径，叠加显示于模基本域（阴影区域）上。解析梯度成功引导优化器从任意初始猜测（圆圈）收敛至物理最优晶格构型（星形），同时遵循模边界。



(a) (b)

图4：**晶格拓扑**。 介电超表面晶胞的俯视图。(a) 各向同性方形晶格（$\tau_2 = 1.0$）。(b) 各向异性矩形晶格（$\tau_2 = 1.2$），用于验证梯度引擎预测的空间色散分裂。

6.3.2. 通过差分对比度验证角度色散

为了严格量化所设计的非局域性，我们定义各向异性对比度 $\Delta S_{ii}(\omega, \theta)$ 为两种正交偏振态的散射参数之间的幅值差：

$$\Delta S_{ii}(\omega, \theta) = \left| |S_{ii}^{\phi=0}(\omega, \theta)| - |S_{ii}^{\phi=90}(\omega, \theta)| \right|, \quad i \in \{1, 2\}. \tag{42}$$

这里，索引 $i = 1$ 和 $i = 2$ 分别表示基模横电（E_y偏振）和横磁（E_x偏振）Floquet模态。该指标将“优化距离”直接映射到可观测光谱：值为 $\Delta \approx 0$表示有效各向同性（简并模态），而高对比度则表示强烈的偏振分裂。

图 5 展示了全波仿真结果，用于比较基准方形晶格（$\tau_2 = 1.0$）与梯度优化矩形晶格（$\tau_2 = 1.2$）在两种端口反射参数（S_{11} 和 S_{22}）下的表现。

对于各向同性基准（图 5 (a) 和 (c)），在整个角度扫描范围内（$\theta \in [0°, 30°]$），对比度图几乎没有任何特征。这证实了 C_4 旋转对称性保留了类TE和类TM空间色散曲面的光谱简并，使非局域响应呈现类标量特性。

与之形成鲜明对比的是，优化后的晶格（图 5（b）和（d））在 ΔS_{11} 和 ΔS_{22}中均呈现出清晰的高强度带。这些明亮区域

对应于谱分岔，即 x和 y偏振共振发生分裂。关键的是，这种分裂模式在顶部（S_{11}）和底部（S_{22}）端口之间保持一致，这证实诱导各向异性是晶格模的一种稳健体性质，而非表面的界面伪影。优化引擎已成功最大化目标函数$J(\tau)$，其物理表现为对称性保护简并的“解除”。

7. 讨论与局限性

第6节中呈现的结果表明，拟模形式（QMF）梯度引擎在精度和速度方面均以数量级优势超越了传统的有限差分方法。然而，作为一种根植于解析数论的“精确”方法，其性能特征不同于通用数值求解器。在本节中，我们将批判性地分析计算瓶颈、适用域，以及将这一框架推广至高阶相互作用的潜力。

7.1. 计算瓶颈：非全纯扇区

我们的梯度引擎的效率在可约扇区（如 $\tilde{\sigma}_2^{(4)}$、$\sigma_4^{(4)}$ 等项）与不可约异常项（$\sigma_4^{(2)}$）之间存在严格分化。

对于可约项，评估成本实际上为 $O(1)$。$SL(2,\mathbb{Z})$ 约化确保朗伯级数快速收敛，无论晶格复杂度如何，只需少于 10 项即可达到机器精度（10^{-15}）。

相比之下，$\sigma_4^{(2)}$ 仍然是主要的计算瓶颈。由于它包含涉及多对数函数的非全纯傅里叶分量，因此无法将其多项式约化为 $\{E_2, E_4, E_6\}$。我们的混合策略（Richardson外推）将代数收敛从 $O(K^{-2})$提升到 $O(K^{-4})$，但其渐近速度仍慢于模形式的指数收敛（$e^{-\pi\tau}$）。实际应用中，对于典型的晶格（$\tau_2 \approx 1.0$），要以 10^{-8} 精度计算 $\sigma_4^{(2)}$，需要对一个由 $K \approx 20$构成的网格求和，耗时达毫秒，而艾森斯坦级数只需微秒。虽然对于梯度计算，这种额外开销可以忽略不计（因为 $\partial_\tau \sigma_4^{(2)}$ 是解析的），但它会主导函数求值$J(\tau)$的成本。

未来改进：对于需要以极高精度（$>10^{-12}$）计算 $\sigma_4^{(2)}$ 的应用，可以用Ewald方法替代当前的直接求和

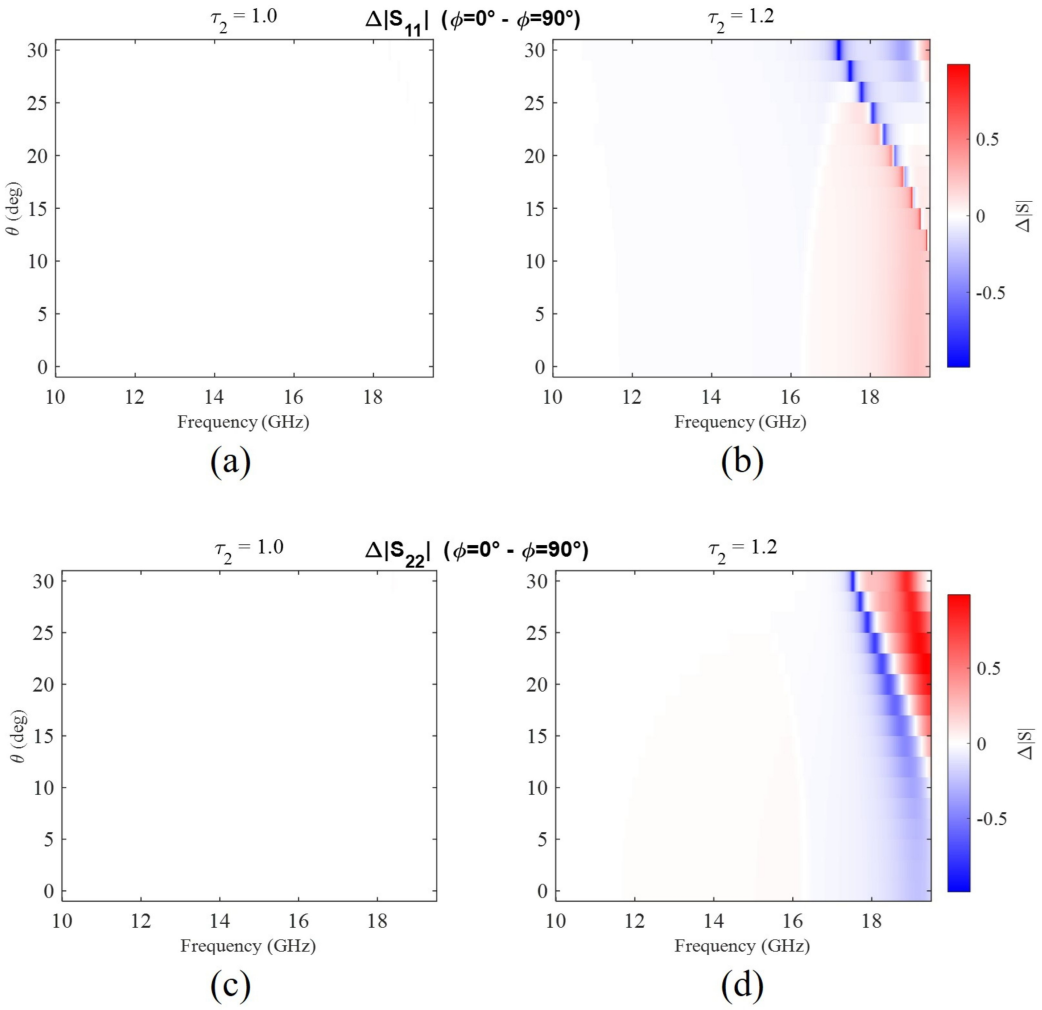


图 5：**对称性破缺的全波验证**。各向异性对比图 $\Delta S_{ii} = ||S_{ii}^{\phi=0}| - |S_{ii}^{\phi=90}||$以频率和入射角为变量绘制。**左列**（$\tau_2 = 1.0$）：(a) ΔS_{11} 和 (c) ΔS_{22} 中的暗区表示偏振差异可忽略不计，证实了方形晶格中受对称性保护的模式简并。**右列**（$\tau_2 = 1.2$）：(b) ΔS_{11} 和 (d) ΔS_{22} 中的亮带凸显了由梯度优化器设计出的巨各向异性。模式分裂幅度显著（~ 0.5 吉赫兹），且在两个端口中均保持一致，验证了 QMF 驱动的几何扰动 $\tau \to 1.2i$ 成功激发了非局域空间色散。

求和或泊松重求和技术。然而，这些方法会引入特殊函数（不完全伽马函数），从而使相对于 τ的精确解析梯度推导变得复杂。本工作所选择的混合策略是一种有意的权衡，优先考虑代数简洁性与代码紧凑性，而非渐近最优性。

7.2. 定义域有效性与几何约束

该数学推导对任意 $\tau \in \mathbb{H}$均成立。然而，数值稳定性对虚部 $\tau_2 = \mathrm{Im}(\tau)$施加了实际的下界。

当 $\tau_2 \to 0$时，晶格变得无限倾斜，晶胞随之坍缩。在此情形下：

1. **物理有效性：**当晶格间距变得与粒子尺寸（$L \sim 2r$）相当时，耦合偶极近似（CDA）本身即失效，因为近场高阶多极矩（例如八极矩）不再可以忽略。2. **数值代价：**对于艾森斯坦级数，误差证书所需的项数 N 按 $1/\tau_2$ 缩放（在约化至 $\mathcal{F}$之后）。更关键的是，对于晶格和 $\sigma_4^{(2)}$，所需网格大小 K 大致按 $\tau_2^{-1/2}$ 缩放，以捕捉沿压扁轴缓慢衰减的尾部。

在我们的实现中，我们施加软约束 $\tau_2 \geq 0.2$。这覆盖了介电超表面全部具有物理相关性的设计空间（通常满足 $0.5 \leq \tau_2 \leq 2.0$）。从事极端掠入射结构或等离激元链设计的人员，可能需要将本方法与一维晶格求和加速方法（多对数函数）相结合。

7.3. 向高阶多极矩的推广

尽管本工作聚焦于二阶空间色散张量$\bar{\mathcal{G}}^{(2)}$（四极/偶极各向异性阶），“梯度引擎”方法普遍适用于任何可展开为广义艾森斯坦级数的周期相互作用核。

高阶非局域效应（例如 k^4 项或八极散射体）涉及晶格和 $S_n^{(m)}$，其衰减阶更高，为 $n = 6, 8, \ldots$。

- **可约性：** 任何含有 $m \geq n$（偶数）的项都会映射为 G_n 的导数多项式。由于拉马努金恒等式对任意权重都能封闭模形式环，因此可以利用与 $\tilde{\sigma}_{(4)\ 2}$ 相同的递归过程，自动推导出 $S_{(8)\ 6}$ 或 $S_{(8)\ 8}$ 的梯度。

- **基底扩展：** 模形式环由 E_4 和 E_6 有限生成。因此，高阶情形不需要新的特殊函数；只会增加多项式的复杂度。

这表明，QMF框架可作为复杂周期介质逆向设计的统一“操作系统”，其应用范围可从电磁学扩展到声子晶体 [36] 和流体动力学晶格，前提是控制方程的格林函数可在柱谐波上进行谱展开。

7.4. 与复步微分的比较

获取高精度导数时，有限差分（FD）的一种常见替代方法是复步导数近似（CSDA）[37, 38], ，它可以避免相减抵消误差。然而，出于模框架固有的两个根本原因，本文有意不将CSDA纳入基准比较。

首先，目标函数 $J(\tau)$原生定义在复上半平面 $\mathbb{H}$上。要实现CSDA，必须将定义域从复数扩展到超复数（或对偶数），才能严格区分几何虚部 τ_2 与微分扰动步长 ih。这会给求解器增加不必要的架构复杂度。

其次，更关键的是，复步导数近似（CSDA）的计算复杂度与有限差分（FD）相同：每个设计变量都需要对超越的 q-级数进行完整求值。与之形成鲜明对比的是，我们的 QMF解析引擎可将梯度作为前向传播的严格代数副产物直接获得（如表1所示）。通过重用预先计算的艾森斯坦数值 $\{E_2, E_4, E_6\}$，计算梯度的边际成本实际上为零。因此，第6节采用的 $O(h^4)$ Richardson外推构成了充分且严格的独立验证，证实解析引擎无需复杂步求值的额外开销，即可达到理论上的机器精度下限。

8. 结论

在本研究中，我们提出了一套用于空间色散超表面逆向设计的严谨解析框架，解决了传统数值优化中固有的“精度—稳定性”权衡这一根本问题。

通过将计算电磁学与拟模形式（QMF）的数论性质相结合，我们构建了一个用于周期性并矢格林函数的端到端 解析梯度引擎。

我们的方法以精确的代数运算取代近似的有限差分微积分。通过应用拉马努金微分恒等式，我们推导出了相互作用矩阵关于晶格几何 τ 的灵敏度闭式表达式。尤为重要的是，我们通过以下方式解决了实际计算挑战：

1. **精确约化：** 将物理晶格求和映射到由艾森斯坦级数组成的最小基，并通过稳健的混合策略处理不可约异常项 $\sigma_4^{(2)}$ 。2. **数值稳定性：** 实现带有自动误差认证的 $SL(2,\ \mathbb{Z})$ 定义域约化算法，即使对于高度倾斜的晶格，也能确保达到机器精度（10^{-15}）。3. **几何一致性：** 推导出固定面积链式法则，使优化器能够探索模流形，同时遵守物理尺度约束。

实验验证证实了这种方法的优越性。解析计算引擎相较于有限差分基线实现了 $6.5\times$ 的加速比，并成功探索复杂的优化景观，以最大化非局域各向异性。对所得设计进行的全波仿真验证了物理预测，并观察到优化后晶格中的空间色散模式出现明显分裂。

这一框架为复杂周期介质的设计开辟了新途径。尽管本研究聚焦于二维布拉菲晶格和四极相互作用，其底层代数结构可推广至高阶多极矩，并可通过爱泼斯坦ζ函数理论扩展到三维晶格 $[39,\ 40]$。此外，该方法能够在谱奇异点附近计算精确导数，因此特别适用于新兴的拓扑光子学领域 $[5,\ 6],$ ，在该领域中，贝里曲率和拓扑不变量对几何扰动的敏感性至关重要。

致谢

感谢 Yajun An（华盛顿大学塔科马分校）对本手稿的仔细审阅以及富有洞察力的建议。

附录 A. 标准艾森斯坦级数定义

作为参考，约化公式中使用的标准艾森斯坦级数 $E_{2k}(\tau)$ 定义如下：

$$E_{2k}(\tau) = 1 + \frac{2}{\zeta(1-2k)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^{2k-1} q^n}{1-q^n}, \quad q = e^{2\pi i \tau}. \tag{A.1}$$

它们与晶格和 $G_{2k}(\tau) = \sum_{(m,\,n)\neq(0,\,0)} (m+n\tau)^{-2k}$ 的关系由 $G_{2k} = 2\zeta(2k)$ E_{2k} 给出。

代码和数据可用性

支持本研究结论的数据由本文第 3–5 节中完整描述的解析算法和数值过程生成。本研究未使用实验数据集。用于生成结果的拟模形式梯度引擎的 Python 实现及优化脚本，可在合理请求后向通讯作者获取。

参考文献

[1] C. L. Holloway、E. F. Kuester、J. A. Gordon、J. O'Hara、J. Booth、D. R. Smith，《超表面理论与应用概述：超材料的二维等效形式》，IEEE天线与传播杂志 54 (2) (2012) 10–35。doi:10.1109/MAP.2012.6230714。[2] V. M. Agranovich、Y. N. Gartstein，《空间色散与光的负折射》，《物理学进展》49 (10) (2006) 1029–1044。doi:10.1070/PU2006v049n10ABEH006067。[3] N. Yu、P. Genevet、M. A. Kats、F. Aieta、J.-P. Tetienne、F. Capasso、Z. Gaburro，《具有相位不连续的光传播：广义反射与折射定律》，《科学》334 (6054) (2011) 333–337。doi:10.1126/science.1210713。[4] N. Yu、F. Capasso，《设计型超表面实现的平面光学》，《自然·材料》13 (2) (2014) 139–150。doi:10.1038/nmat3839。

[5] L. Lu、J. D. Joannopoulos、M. Soljačić, 《拓扑光子学》, 《自然·光子学》8 (2014) 821–829。doi:10.1038/nphoton.2014.248。[6] T. Ozawa、H. M. Price、A. Amo、N. Goldman、M. Hafezi、L. Lu、M. C. Rechtsman、D. Schuster、J. Simon、O. Zilberberg、I. Carusotto, 《拓扑光子学》, 《现代物理评论》91 (1) (2019) 015006。doi:10.1103/RevModPhys.91.015006。[7] S. Molesky、Z. Lin、A. Y. Piggott、W. Jin、J. Vučković、A. W. Rodriguez, 《纳米光子学中的逆向设计》, 《自然·光子学》12 (11) (2018) 659–670。doi:10.1038/s41566-018-0246-9。[8] R. E. Christiansen、O. Sigmund, 《通过拓扑优化实现光子学逆向设计：教程》, 《美国光学学会杂志 B》38 (2) (2021) 496–509。doi:10.1364/JOSAB.406048。[9] J. Nocedal、S. J. Wright, 《数值优化》, 第 2 版, 施普林格运筹学与金融工程丛书, 施普林格, 纽约, 2006。doi:10.1007/978-0-387-40065-5。[10]J. M. Borwein、M. L. Glasser、R. C. McPhedran、J. G. Wan、I. J. Zucker, 《格点和：过去与现在》, 《数学及其应用百科全书》第 150 卷, 剑桥大学出版社, 2013。doi:10.1017/CBO9781139626804。[11]P. P. Ewald, 《光学和静电晶格势的计算》, 《物理学年鉴》369 (3) (1921) 253–287。doi:10.1002/andp.19213690304。[12] C. W. Hsu、B. Zhen、A. D. Stone、J. D. Joannopoulos、M. Soljačić, 《连续谱中的束缚态》, 《自然综述：材料》1 (2016) 16048。doi:10.1038/natrevmats.2016.48。[13] K. Koshelev、S. Lepeshov、M. Liu、A. Bogdanov、Y. Kivshar, 《由连续谱中的束缚态支配的具有高 Q 共振的不对称超表面》, 《物理评论快报》121 (19) (2018) 193903。doi:10.1103/PhysRevLett.121.193903。[14]瑞利勋爵, 《光栅动力学理论》, 《伦敦皇家学会会刊 A 辑》79 (532) (1907) 399–416。doi:10.1098/rspa.1907.0051。

[15] R. W. Wood, 《衍射光栅光谱中光线分布不均匀的一个显著案例》, 《哲学杂志》4（1902）396–402。[16]A. Moroz, 《亥姆霍兹方程与拉普拉斯方程的拟周期格林函数》, 《物理学A：数学与一般物理》39（36）（2006）11247–11282，arXiv:math-ph/0602021。doi:10.1088/0305-4470/39/36/009。[17] C. M. Linton, 《亥姆霍兹方程的晶格和》, 《SIAM评论》52（4）（2010）630–674。doi:10.1137/09075130X。[18] P. Y. Chen、M. J. A. Smith、R. C. McPhedran, 《广义艾森斯坦级数的求值与正则化及其在二维柱谐波和中的应用》, arXiv预印本 arXiv:1608.02827（2016）。[19] P. Y. Chen, 《晶格和、拟模形式与圆柱阵列的电磁散射》, 博士论文，悉尼大学，博士论文（2022）。[20] D. Zagier, 《椭圆模形式及其应用》, 载于：K. Ranestad（编）, 《模形式入门》, Universitext，施普林格，柏林、海德堡，2008，第1–103页。doi:10.1007/978-3-540-74119-0_1。[21]F. Diamond、J. Shurman, 《模形式入门》, 数学研究生教材第228卷，施普林格，纽约，2005。doi:10.1007/978-0-387-27226-9。[22] B. C. Berndt, 《拉马努金风格的数论》, 学生数学丛书第34卷，美国数学学会，普罗维登斯，罗得岛州，2006。[23] T. M. Apostol, 《数论中的模函数与狄利克雷级数》, 第2版，数学研究生教材第41卷，施普林格，纽约，1990。doi:10.1007/978-1-4612-0999-7。[24] E. M. Purcell、C. R. Pennypacker, 《非球形介电颗粒对光的散射与吸收》, 《天体物理学杂志》186（1973）705–714。doi:10.1086/152538。[25] B. T. Draine、P. J. Flatau, 《散射计算的离散偶极近似》, 《美国光学学会杂志A》11（4）（1994）1491–1499。doi:10.1364/JOSAA.11.001491。

[26] F. J. García de Abajo, 《讨论会：粒子与孔阵列的光散射》，《现代物理评论》79（4）（2007）1267–1290。doi:10.1103/RevModPhys.79.1267。[27] S. Tretyakov, 《应用电磁学中的解析建模》，Artech House，2003。[28] M. Albooyeh、S. Tretyakov、C. Simovski, 《折射基底上双各向异性超表面的电磁表征：一般理论框架》，《物理学年鉴》378（2017）14–28。doi:10.1016/j.aop.2017.01.004。[29] E. F. Kuester、M. A. Mohamed、M. Piket-May、C. L. Holloway, 《超薄膜处电磁场的平均过渡条件》，IEEE天线与传播汇刊51（10）（2003）2641–2651。doi:10.1109/TAP.2003.817560。[30] P. Y. Chen、M. J. A. Smith、R. C. McPhedran, 《相位调制艾森斯坦级数的求值与正则化及其在双施勒米希型和中的应用》，《数学物理杂志》59（7）（2018）072902。doi:10.1063/1.5026567。[31] C. M. Lalau-Keraly、S. Bhargava、O. D. Miller、E. Yablonovitch, 《伴随形状优化在电磁设计中的应用》，《光学快报》21（18）（2013）21693–21701。doi:10.1364/OE.21.021693。[32] T. W. Hughes、M. Minkov、Y. Shi、S. Fan, 《通过原位反向传播和伴随方法训练光子神经网络》，Optica 5（7）（2018）864–871。doi:10.1364/OPTICA.5.000864。[33] A. Griewank、A. Walther, 《导数求值：算法微分的原理与技术》，第2版，SIAM，费城，2008。doi:10.1137/1.9780898717761。[34] L. F. Richardson, 《利用有限差分近似求解涉及微分方程的物理问题，并应用于砌石坝应力》，《伦敦皇家学会哲学汇刊A辑》210（459–470）（1911）307–357。doi:10.1098/rsta.1911.0009。

[35]达索系统, CST Studio Suite, https://www.3ds.com/products/simulia/cst-studio-suite, 访问日期：2026-01-15 (2024)。
[36] O. Sigmund, J. S. Jensen, 基于拓扑优化的声子带隙材料与结构的系统设计, 《伦敦皇家学会哲学汇刊》A辑 361 (1806) (2003) 1001–1019. doi:10.1098/rsta.2003.1177.[37]W. Squire, G. Trapp, 利用复变量估计实函数的导数, 《SIAM评论》40 (1) (1998) 110–112. doi:10.1137/S003614459631241X.[38] J. R. R. A. Martins, P. Sturdza, J. J. Alonso, 复步长导数近似, 《ACM数学软件汇刊》29 (3) (2003) 245–262. doi:10.1145/838250.838251.[39] P. Epstein, 关于一般ζ函数的理论, 《数学年刊》56 (1903) 614–644. doi:10.1007/BF01444309.[40] A. A. Buchheit, T. S. Gutleb, A. Zinchenko, Epstein ζ函数的计算与性质及其在EpsteinLib中的高性能实现, ArXiv:2412.16317 (2024)。