

基于神经网络与差分进化协同优化的手性超表面逆向设计

罗文峰, 翟柏森, 吕淑媛[†], 魏煌, 苏子雯

西安邮电大学电子工程学院, 陕西 西安 710121

摘要

基于连续域束缚态的手性超表面为实现高性能手性光学器件提供了重要途径, 但传统设计方法通常依赖于复杂的参数扫描, 存在灵活性不足、易陷入局部最优等局限, 难以实现最优的手性光学响应。本研究提出一种结合神经网络与差分进化算法的混合逆向设计策略, 用于 1200—1500nm 波长范围内高效、精准地设计具有指定圆二色性 (CD) 响应的手性超表面。该模型是由峰值预测器与谱线预测器组成的双阶段神经网络构成的, 实现从结构参数到手性光学响应的高精度、跨维度映射, 可准确捕捉 CD 谱线的关键特征。在神经网络正向预测模型的基础上, 再利用差分进化算法的全局搜索能力, 通过设定的 CD 目标值逆向预测得到最优结构参数组合。本研究突破了传统设计方法的瓶颈, 为实现高灵敏度手性传感应用提供了新的设计路径, 也为其他纳米光子器件的逆向设计提供了参考。

关键词: 连续域束缚态, 手性超表面, 圆二色性, 逆向设计

1 引言

手性是指一个物体无法通过任何旋转或平移操作与其镜像完全重合的属性^[1-3]。这种独特的不对称性普遍存在于化学、生物学、材料科学和光学等诸多领域, 在分析化学、药物开发乃至天体学等领域具有重要研究意义^[4-7]。在光学领域, 手性表现为当使用左/右圆偏振 (Left circularly polarized, 简记为 LCP/Right circularly polarized, 简记为 RCP) 光分别照射手性对象时, 透射、反射或吸收光的强度与相位响应之间存在差异, 表现出圆二色 (Circular Dichroism, 简记为 CD) 和旋光性^[8,9]。在天然材料中通常表现出微不足道的手性, 需要与入射光波长相当的具有几何手性特性的结构实现强的手性。为此, 一些基于结构工程的人工手性材料被广泛开发, 用于实现强的手性响应^[10]。早期手性超材料多依赖于三维堆叠或螺旋结构^[11,12], 其手性响应源于空间结构的镜像对称破缺^[13,14]。尽管三维纳米结构在设计环节中有很高的自由度, 但其制备工艺复杂, 难以实现大规模集成与应用^[15]。相比之下, 以二维超表面为典型代表的人工纳米结构, 能够在亚波长尺度上对光场分布进行灵活调控, 大幅提升光与物质的相互作用效率^[16,17]。平面

[†] 通信作者. E-mail: 1159955131@qq.com

手性超表面通过打破结构的对称性，即可实现手性响应，较低的制备难度使其迅速成为当前手性光学领域的研究热点^[18,19]。随着纳米光学技术的不断发展，手性超表面凭借其在偏振调控等方面的潜力受到广泛关注，各类功能化的手性超表面相继被提出^[20-22]。但传统手性超表面的光学响应依赖于晶胞的局域共振，品质因子（Q 因子）普遍较低，制约了其性能的进一步提升^[23-25]。

强手性光学响应是手性超表面实现高分辨手性传感、非线性手性光学及低阈值手性激光等前沿应用的核心需求，而圆二色性（CD 值）则是衡量该响应强度的关键指标^[26-28]。手性场增强是提升 CD 值的关键途径，而在超表面中引入连续域束缚态（Bound States in the Continuum，简记为 BIC）能够同时实现高 Q 因子与显著的手性场增强，从而为获得高 CD 值提供了理想平台^[29,30]。BIC 是一种在空间与光谱上同辐射连续态共存、却能完全抑制辐射损耗的局域共振态^[31]，理论上具有无限大的 Q 因子。在动量空间中，理想 BIC 对应位于布里渊区 Γ 点的涡旋极化奇点（V 点）且具有无限高的 Q 因子。通过引入结构对称性破缺作为微扰，理想 BIC 会转变为准 BIC（Q-BIC），其 Q 因子与不对称参数的平方成反比。通过精准调控，可诱导 V 点分裂为一对对称分布在 Γ 点两侧具有相反圆偏振态的 C 点，将其中一个 C 点精准移动至 Γ 点，从而形成具有强本征手性响应与高 Q 因子的手性 Q-BIC^[32-34]。

近年来，基于 BIC 的手性超表面取得一系列突破性进展。2023 年，Chaobiao Zhou 等提出不对称介质超表面，通过偏心穿透气孔的正方形结构实现高品质因子 Q-BIC^[35]；2026 年，Chaobiao Zhou 等进一步设计出四聚体复合超表面，借助质心对称保护的连续体束缚态(SP-BICs)与面积守恒的导模共振(GMR)将实验 Q 因子提升至 43702^[36]；同年，Hui Hu 等通过零拓扑电荷偶然 BIC 融合，在平面结构中实现了 CD 高达 0.99 的宽角度鲁棒手性响应^[37]。对于手性 Q-BIC 的研究同样也取得了重要进展。2023 年，Hongju Li 等设计出一种两对平行和交错的硅条结构，通过打破面内镜像对称性，对称性保护 BIC 周围被椭圆偏振态包围，在斜入射条件下实现了圆二色性为 0.812 的自旋选择性强吸收^[38]。2025 年，Junru Wang 等将 3R-MoS₂ 材料与手性 Q-BIC 相结合，设计了 Z 形超表面阵列，在斜入射下实现了圆二色性为 0.96 的手性 Q-BIC，并将倍频效率提升至 1%，比未图案化的 3R-MoS₂ 薄膜提高了 6 个数量级^[39]。

手性超表面优势显著，但其传统设计方法仍面临诸多挑战：依赖大量参数扫描，计算成本高；且通常局限于规则结构优化，制约了设计自由度与性能上限。为克服这些局限，逆向设计方法近年来被广泛应用于超表面设计^[40]。该方法以目标光学响应为驱动，有机结合遗传算法、形状优化、神经网络等优化策略与电磁仿真，反向搜索最优结构方案，无需局限于特定的单元构型，显著提升了设计的灵活性^[41-43]。2024年 Jie Wang 等提出非正交偏振复用方法，结合矢量衍射神经网络实现了超高容量全息输出^[44]；2025年，Jie Wang 等进一步设计出端到端可微化设计框架，实现了单型元原子的高维复合超表面设计^[45]。在手性 Q-BIC 体系中，逆向设计也在快速发展，2024年 Lanfei Wang 等提出的串联深度神经网络实现了 400—1200nm 波长范围内 Q-BIC 结构的毫秒级逆向设计，为纳米器件的快速设计奠定了基础^[46]；2025年 Chen Luo 提出双向卷积神经网络，其计算速度较传统仿真方法提升约 45,000 倍，突破了设计效率瓶颈，并精准设计出了满足高 CD 值和高 Q 因子核心目标的手性器件^[47]；同年 Qi Wu 创新性地开发了卷积神经网络与粒子群优化算法相结合的 Transformer 模型，提升了模型预测精度与设计自由度，并进一步完善了逆向设计的技术框架，为复杂手性超表面及纳米器件的高性能开发提供了更全面的支撑^[48]。

然而，现有逆向设计方法仍存在明显不足：首先，多数神经网络仅采用单一模型，难以反映结构与 CD 谱的强非线性映射关系；其次，传统的优化算法易陷入局部最优，无法保证在多维度参数空间内获得全局最优 CD 响应；最后，现有逆向设计超表面工作多面向波前调控与全息复用，缺少专门针对 BIC 手性体系的谱线预测与全局协同优化框架。

为突破上述局限，本研究提出一种融合神经网络与差分进化（Differential Evolution，简记为 DE）算法的混合逆向设计策略，能够以指定的 CD 值为目标，逆向预测出满足该目标的最优结构参数组合。该策略以双面镰刀(DSS)结构^[49]为基础充分结合两种算法的优势，利用神经网络强大的拟合与预测能力，快速构建超表面结构参数与手性光学响应（CD 值）的高精度映射模型；再引入 DE 算法，搜索能够实现目标 CD 值的全局最优结构参数组合。本研究提出的混合逆向设计策略，有望进一步提升手性超表面的设计效率与性能上限，为制备具有超强手性响应的纳米光子器件提供新的技术途径，推动其在高灵敏度手性传感相关领域的应用进程。

2 结构与模型建立

2.1 结构设计

本研究以二氧化硅为衬底，非晶硅 (α -Si) 的 DSS 结构作为初始超原子结构，结构如图 1 (a) 所示。图 1 (b) 显示了结构的单位晶胞，周期 $P=850\text{nm}$ ，硅层厚度 $T=350\text{nm}$ (折射率 3.22)，DSS 半径 $R=280\text{nm}$ ，入射角 α 。初始 DSS 结构 $b_1=b_2=220\text{nm}$ ， $a_1=a_2=191\text{nm}$ ，具有 C_2 对称性。本研究通过引入结构参数来打破结构的对称性，赋予结构手性，核心目标是设计高 CD 值超表面。DSS 平面结构由圆形去除两个矩形缺口构成，为了打破 DSS 结构的面内对称性，本研究通过两组结构参数对缺口几何进行调控，分别如图 1 (c) 和 (d) 所示。第一组包括缺口尺寸参数 c_1 和 c_2 以及圆心角 θ ， c_1 和 c_2 分别定义为两个矩形缺口纵向的尺寸增量，缺口 1 和 2 的纵向上的线度分别为 a_1+c_1 和 a_2+c_2 ($a_1=a_2=191\text{nm}$)。如图 1 (c) 所示，黄色虚线区域对应初始对称结构，此时 $c_1=c_2=0$ ， $\theta=360^\circ$ 。如图 1 (c) 橙色区域所示，当 $c_1=40\text{nm}$ 、 $c_2=20\text{nm}$ 且 θ 减小至 300° 时，两缺口尺寸不再相等，结构对称性被打破。第二组为缺口旋转角度 φ_1 、 φ_2 ，以矩形中心为旋转中心，表示两缺口从初始位置沿逆时针方向旋转的角度。如图 1 (d) 所示，在保持 $c_1=c_2=20\text{nm}$ ， $a_1=a_2=191\text{nm}$ ， $\theta=360^\circ$ 的基础上，引入 $\varphi_1=60^\circ$ 、 $\varphi_2=30^\circ$ ，使两缺口从黄色虚线初始位置旋转至蓝色虚线位置，进一步打破了结构的面内对称性。

在初始结构参数 $b_1=b_2=220\text{nm}$ ， $a_1=a_2=191\text{nm}$ ， $c_1=c_2=0\text{nm}$ ， $\varphi_1=\varphi_2=0^\circ$ ， $\theta=360^\circ$ 及 $\alpha=0^\circ$ 下，得到模拟能带结构和品质因数仿真结果如图 1 (e) 和 (f) 所示。图 1 (f) 展示了在 Γ 点附近 k 空间中本征模的 Q 因子，在 Γ 点处 Q 因子趋于无穷大，这是 BIC 的典型特征；随波矢偏离 Γ 点，Q 因子指数衰减，揭示了从理想 BIC 到 Q-BIC 的演化过程。

该 DSS 结构所支持的 BIC 态对微扰高度敏感，通过调控如缺口大小、旋转角度等几何参数，即可打破其结构对称性，从而实现手性响应。这里 CD 定义为右手偏振(RCP)和左手偏振(LCP)入射时的透过率差^[49]：

$$\text{CD} = \frac{(T_{rr} + T_{lr}) - (T_{rl} + T_{ll})}{(T_{rr} + T_{lr}) + (T_{rl} + T_{ll})} \quad (1)$$

公式中 $T_{ij}=|t_{ij}|^2$ ($i=r,l; j=r,l$; r 表示 RCP, l 表示 LCP) 表示输入偏振态为 j 时输出偏振态为 i 的透过率。

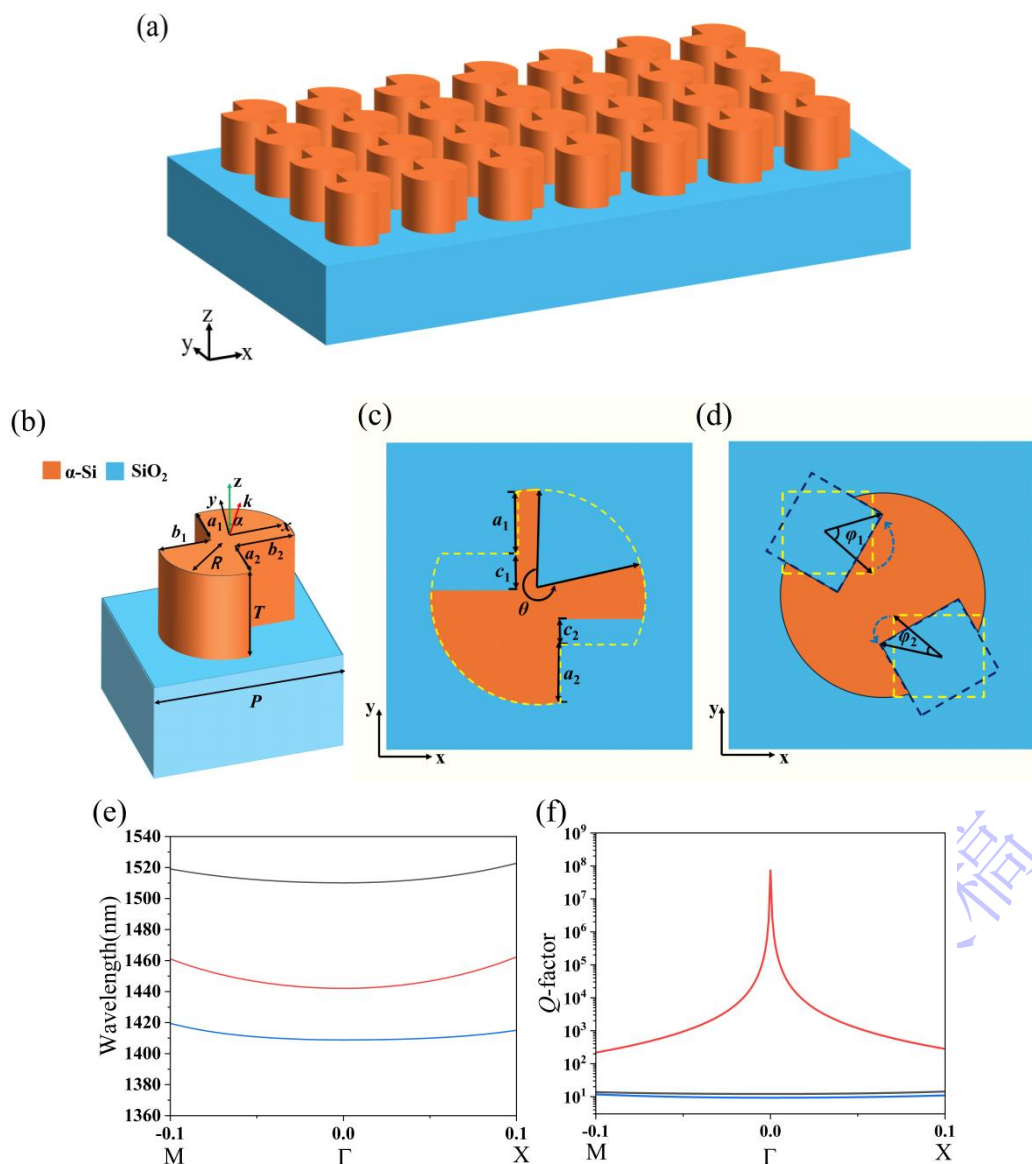


图 1.(a)由成对 DSS 结构组成的周期性超表面示意图;(b)为非晶硅(α -Si)DSS 结构在二氧化硅衬底上形成的平面手性 Q-BIC 超表面的单胞结构示意图, 参数为 $P=850\text{nm}$, $R=280\text{nm}$, $\theta=360^\circ$, $a_1=a_2=191\text{nm}$, $b_1=b_2=220\text{nm}$; (c)DSS 结构初始状态与对称破缺后的 xy 平面结构对比图; (d)DSS 结构矩形缺口旋转前后对比图, 缺口 1 和 2 的旋转角度分别为 ϕ_1 和 ϕ_2 ; (e) Γ 点附近 DSS 超表面的本征波长的能带结构; (f) Γ 点附近 k 空间中本征模的 Q 因子

Fig. 1. (a) Schematic diagram of a periodic metasurface composed of paired DSS structures; (b) Schematic diagram of the unit cell structure of a planar chiral Q-BIC metasurface formed by amorphous silicon (α -Si) DSS structures on a silica substrate, with parameters: $P = 850 \text{ nm}$, $R = 280 \text{ nm}$, $\theta = 360^\circ$, $a_1 = a_2 = 191 \text{ nm}$, and $b_1 = b_2 = 220 \text{ nm}$; (c) Comparison diagram of the xy -plane structure of the DSS structure in the initial state and after symmetry breaking; (d) Comparison diagram of the DSS structure before and after the rotation of the rectangular notches,

where the rotation angles of notch 1 and notch 2 are φ_1 and φ_2 , respectively; (e) Band structure of the eigenwavelengths of the DSS metasurface near the Γ point; (f) Q factor of the eigenmodes in the k-space near the Γ point.

本研究逆向设计的核心目标是寻找具有高 CD 值的超表面结构。除通过调整结构参数打破面内对称性外，改变入射角 α 可打破面外对称性。由此我们主要通过改变以下六种参数 ($c_1, c_2, \theta, \alpha, \varphi_1, \varphi_2$) 以打破结构对称性，获得高 CD 值的手性超表面结构。为构建后续逆向设计所需的数据集，所有原始数据均采用 COMSOL Multiphysics 软件进行仿真计算。各参数变化范围依次为： c_1, c_2 为 0nm 到 100nm， θ 为 260° 到 360° ， φ_1, φ_2 为 0° 到 90° ， α 为 0° 到 15° 。图 2 展示了在其余参数均保持与图 1(e)参数条件设置一致的情况下，仅改变单一参数对 CD 谱的影响。结果表明，各参数均能引起 CD 谱线的红移或蓝移，并显著影响 CD 峰值与半高宽，说明所选参数对手性响应具有有效调控作用，为后续逆向设计研究奠定了基础。

录用稿件，非最终出版稿

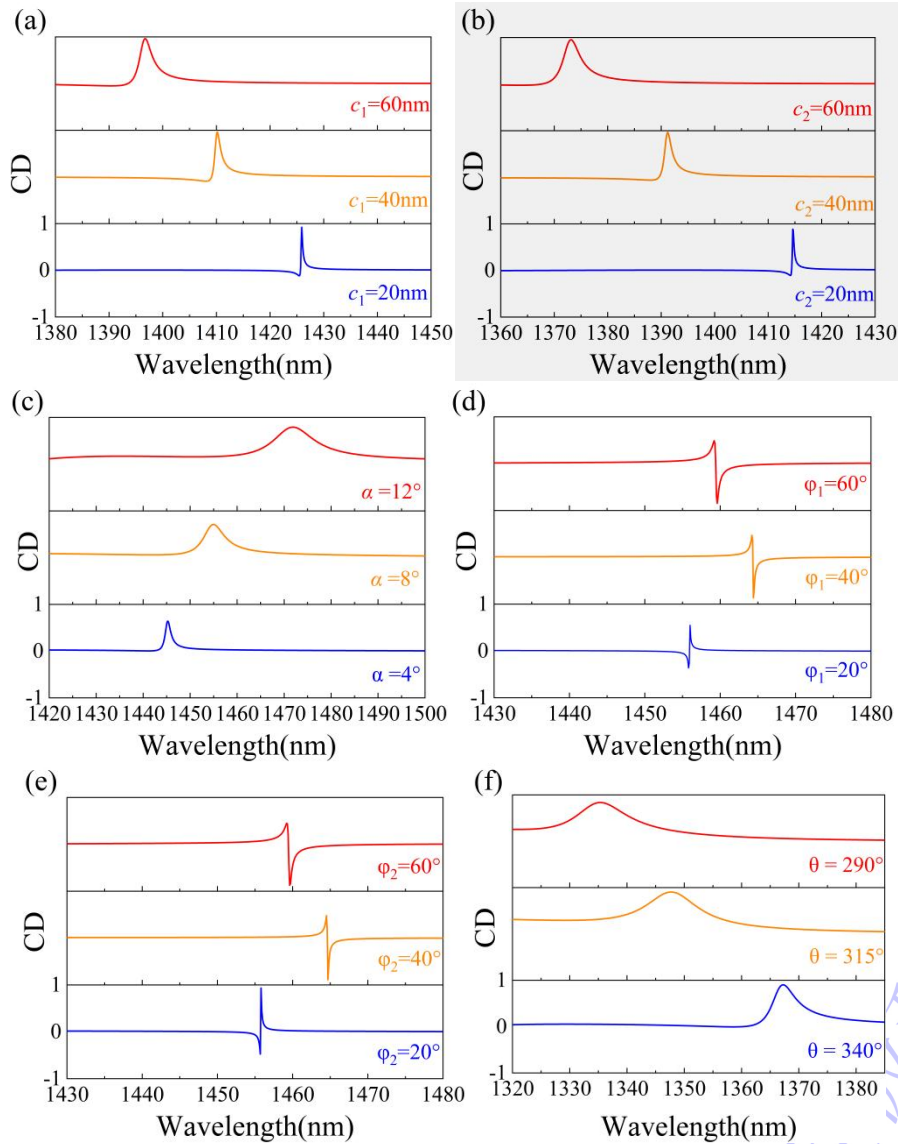


图 2.(a)改变 c_1 时的 CD 谱；(b)改变 c_2 时的 CD 谱；(c)改变 α 时的 CD 谱；(d)改变 φ_1 时的 CD 谱；(e)改变 φ_2 时的 CD 谱；(f)改变 θ 时的 CD 谱

Fig. 2. (a) CD spectra with varying c_1 ;(b) CD spectra with varying c_2 ;(c) CD spectra with varying α ;(d) CD spectra with varying φ_1 ;(e) CD spectra with varying φ_2 ;(f) CD spectra with varying θ .

2.2 模型建立

本研究主要是预测高 CD 光谱对应的结构参数，该任务是一个多参数耦合、强非线性的建模问题。主要预测在 1200—1500nm 波长范围内的 CD 谱线分布，特别是高 CD 值附近的谱线。结构参数与输出的光谱之间存在强烈的非线性耦合，其根源在于光与结构相互作用所涉及的多模态干涉与共振行为。细微的参数调整可能引起谱线形状、共振峰位置及幅值的显著变化，增加了建模与优化的复杂度。针对这些问题，本研究提出一种神经网络与 DE 算法相结合的混合架构，神经网络负责构建从结构参数到 CD 谱线的映射，可快速完成谱线预测；DE 算法则在

此基础上执行全局优化搜索，以目标 CD 值为导向，探寻全局最优的结构参数组合，有效避免采用单一优化方法易陷入局部极值的问题。

整个模型运行过程分为正向预测和逆向预测两个环节，以 6 个结构参数为输入，经双阶段网络输出 CD 峰值与完整谱线，建立结构与光学响应的正向预测模型；再以目标 CD 值为输入，将正向训练好的网络作为适应度评估函数，并通过 DE 算法进行全局搜索逆向预测出最优的结构参数组合与 CD 谱线，完成光学响应到结构参数的逆向预测。其中，双阶段神经网络完成的是从结构参数到 CD 谱线的正向映射。结构参数的逆向预测并非由神经网络直接完成，而是在该正向预测模型的基础上，由 DE 算法通过迭代优化搜索实现的。

本文中的神经网络部分将结构参数及其对应的 CD 谱线预测问题，分解为两个阶段依次求解：第一阶段建立峰值预测器，提取关键光谱特征，包括共振峰位置、峰值强度及 CD 的正负；第二阶段基于前一阶段学习到的数据特征，构建谱线预测器，预测出完整的 CD 谱线轮廓，构建成一个由峰值预测器与谱线预测器协同工作的双阶段深度网络架构。分阶段建模策略有效降低了单一网络的拟合复杂度，同时通过特征传递的方法保障了两个阶段预测结果在物理上的一致性。

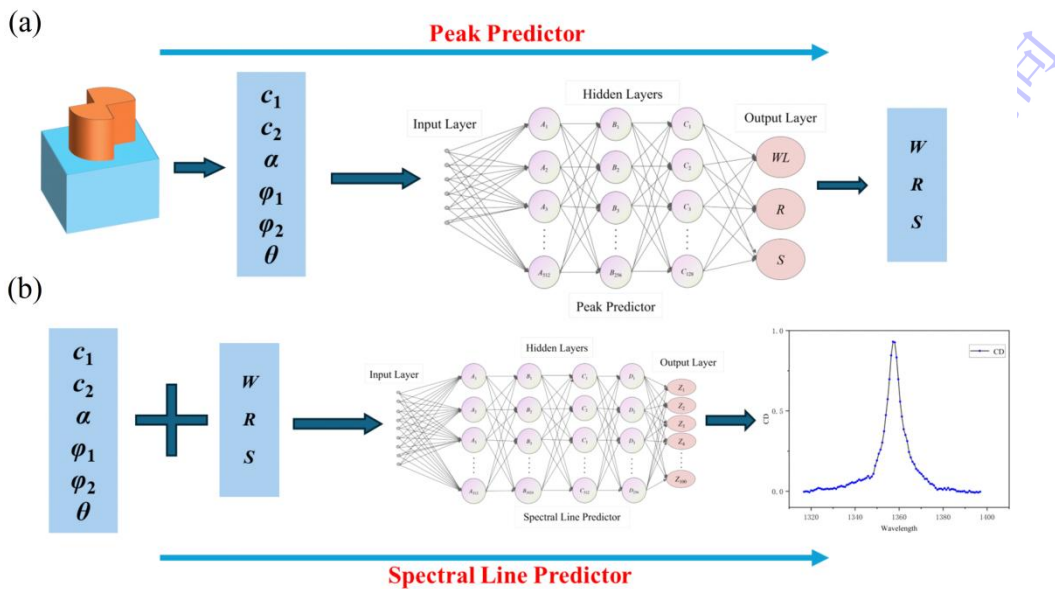


图 3. (a)峰值预测器神经网络训练结构图，将利用 COMSOL 仿真出来的不同结构参数组合对应的 CD 谱线数据导入峰值预测器的输入端，输出 W、R、S；(b)谱线预测器神经网络训练结构图，前述峰值预测器的输入和输出数据作为谱线预测器的输入，最终输出预测谱线结果图

Fig. 3. (a) Schematic diagram of the training structure of the peak predictor neural network, The CD spectrum data corresponding to different structural parameter combinations of the structure

simulated by COMSOL are imported into the input end of the peak predictor, which outputs three important features; (b) Schematic diagram of the training structure of the spectrum predictor neural network, The input and output data of the aforementioned peak predictor are used as the input of the spectrum predictor, and the predicted spectrum result diagram is finally output.

如图 3 (a) 所示, 峰值预测器以 COMSOL 仿真获取的 350 组不同结构参数对应的 CD 谱线作为输入数据, 采用深度前馈神经网络结构, 包含三个隐藏层, 神经元数量分别为 512、256 和 128。第一隐藏层 (512 个神经元) 负责初级特征提取, 通过对输入的 6 个结构参数进行线性组合与非线性变换, 学习参数间的基础交互关系; 第二隐藏层 (256 个神经元) 实现特征抽象与降维, 去除冗余信息并保留峰值预测中最重要的特征。第三隐藏层 (128 个神经元) 进一步整合高级特征, 形成紧凑的特征表示, 为输出层做好准备。最后输出层输出三个关键物理量: 归一化的峰值波长 (W)、归一化的 CD 幅度 (R) 以及 CD 符号 (S , CD 数值的正负)。本模块的损失函数设计采用了差异化权重策略^[50], 按照物理约束分配权重优先级: 波长权重最高 (3.0), 因其对光学器件的性能最重要; 幅度权重适中 (2.0), 允许其在测量误差范围内合理波动; 符号权重最低 (1.0), 因符号信息相对容易学习且误差会被其他分量间接约束。

如图 3 (b) 所示, 谱线预测器以 9 维向量作为输入, 包括原始的 350 组不同结构参数数据以及峰值预测器输出的三项关键特征, 输出预测的结构参数组合及对应的 CD 谱线。原始参数包含关于谱线的基本信息, 峰值预测结果则提供了经过提炼的关键特征, 两者联合的信息量大于任何单一来源, 降低了谱线预测的学习难度。谱线预测器采用更深层的网络结构, 采用编码器与解码器式架构, 包含四个隐藏层, 神经元数量分别为 512、1024、512 和 256。输入层首先通过两层网络扩展到 1024 维空间, 捕捉从结构参数到复杂谱线形状的细微非线性映射关系; 随后通过两层网络逐步降维至 256 维, 实现特征提炼与去噪的目的, 去除冗余信息并防止过拟合; 最终通过线性激活层输出 100 个 CD 谱线预测点。本模块损失函数采用均方误差损失函数, 通过在数据驱动下隐式学习谱线内在的物理约束, 如光谱连续性、平滑性及典型线型模式, 从而确保预测结果不仅在数值上接近真实数据, 谱线也符合实际光谱的物理行为特性。

图 4(a)展示了峰值预测器的训练与验证损失变化, 在 300 个训练周期内训练损失从初始的 13.378 下降至 2.682, 降幅达 79.95%, 整体呈现快速下降后趋于平

稳的趋势，表明模型较好地学习了训练数据中的规律。验证损失从初始的 6.184 降至 2.915，降幅为 52.86%，且全程未出现显著反弹，说明模型具有良好的泛化能力与稳定的收敛性。图 4(b)为谱线预测器的损失变化曲线，训练损失从初始值为 2.362262 降至 0.672819，前 30 周期降幅明显，随后趋于平缓，表明模型在训练集上已达到较好的拟合。验证损失从初始的 0.829 降至 0.638，之后小幅波动并最终稳定在 0.664 左右。但未能随训练损失持续下降，表现出一定的欠拟合现象。该现象与谱线预测器任务的高维度有关，谱线预测器输出包含 100 个连续波长点，建模难度较高，更容易出现欠拟合特征。这是在模型结构复杂度、训练数据规模与高维输出需求之间相互平衡的结果，反映了模型在保证泛化能力与捕捉细节特征之间的合理权衡。尽管如此，该模型仍能较好地预测谱线整体趋势，在预测效率与精确度之间取得合理平衡，可满足后续优化任务的基本需求。

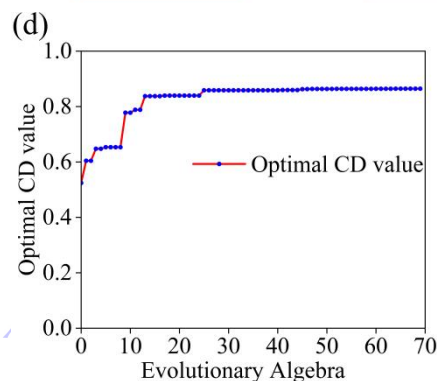
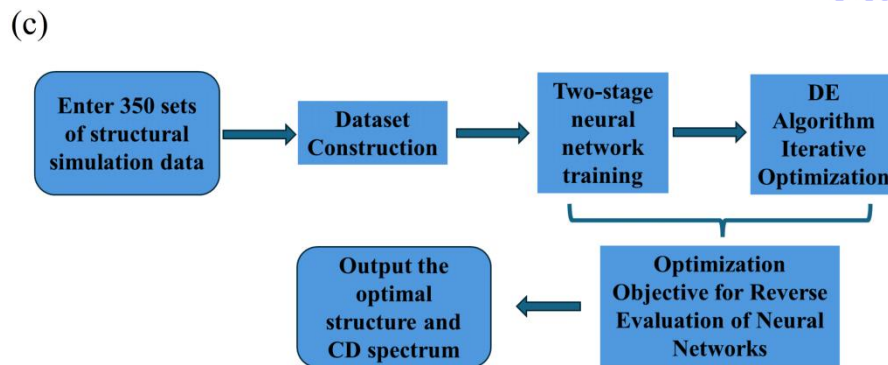
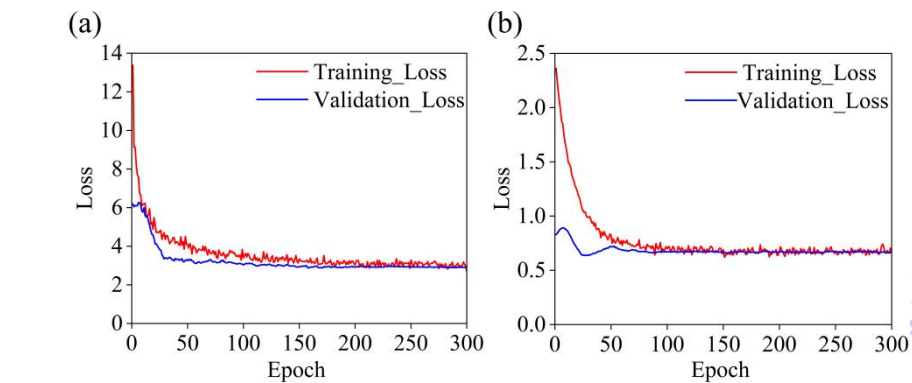


图 4.(a)峰值预测器训练损失图；(b)谱线预测器训练损失图；(c)逆向设计流程图；(d)差分进化算法对目标 CD 值的迭代优化图

Fig. 4. (a) Training loss diagram of the peak predictor;(b) Training loss diagram of the spectrum predictor;(c) Inverse design flowchart.:(d) Iterative optimization diagram of the differential evolution algorithm for the target CD value.

本研究提出的混合逆向设计框架流程如图 4(c)所示,模型首先通过 COMSOL 电磁仿真构建数据集并训练双阶段神经网络,建立结构参数到 CD 谱线的正向映射。在此基础上,以目标 CD 值为驱动,将训练好的神经网络作为快速适应度评估器,代入 DE 算法的迭代框架中,在六维参数空间中全局搜索满足目标 CD 的最优结构参数组合。

DE 算法是一种基于群体并行搜索的随机优化方法,适用于高维连续参数空间中的复杂非线性优化问题,核心变异操作公式为^[51]:

$$v_i = x_{r1} + F \cdot (x_{r2} - x_{r3}) \quad (2)$$

x_{r1} , x_{r2} , x_{r3} 为随机选择的三个不同个体对应的结构参数, F 为变异因子, v_i 为最终变异体。DE 算法在六维结构参数空间内初始化种群,每一代通过变异、交叉、选择操作生成新的结构参数候选集;将候选参数输入已训练好的正向神经网络,快速预测其 CD 响应,并用预测 CD 值与目标 CD 值的偏差定义个体适应度,偏差越小则适应度越高;算法通过迭代不断淘汰低适应度个体,引导种群向满足目标 CD 的最优参数区域收敛;当迭代收敛或连续多代适应度无显著提升时,输出全局最优结构参数组合与其对应的 CD 谱线,完成从目标 CD 值到最优结构参数组合的逆向设计。

图 4(d)展示了 DE 算法优化 CD 值的过程,目标 CD 值设置为 0.9,纵轴表示每代最佳 CD 值,横轴为进化代数。优化过程呈现快速上升、稳步优化与稳定收敛三个阶段,并在第 66 代达到最佳值 0.8645。该曲线反映了算法在参数空间中高效探索与稳定收敛的能力,最终值虽然略低于 0.9 目标值,但 DE 算法能够快速接近目标并稳定收敛,验证了算法在实现指定 CD 目标响应上的有效性。

神经网络作为代理模型,以快速前向预测替代耗时物理仿真,为 DE 算法提供实时适应度评估,并在六维参数空间中实现全局优化。另外,本方法的有效搜索范围严格限定于神经网络的训练数据空间,避免了外推引入的不确定性。本模型协同架构具备处理高维、非凸优化问题的能力,为光学超表面的逆向设计提供了可靠的技术路径。

3 结果与讨论

为评估各结构参数对波长及 CD 值的影响程度，本研究采用皮尔逊相关系数（Pearson Correlation Coefficient）进行量化相关性分析。该系数用于衡量每个结构参数与目标光学响应之间线性相关的强度与方向，对于每个结构参数 x_i 与目标光学特性 y_i （波长或 CD 值），其皮尔逊相关系数 r 的计算公式为^[52]：

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3)$$

\bar{x} , \bar{y} 分别为结构参数与目标光学特性的平均值； n 为样本量； r 的范围是-1 到 1。当仅关注关联强度而不考虑关联方向时，我们采用绝对相关系数 $|r|$ 来表征各参数的影响大小， $|r|$ 越接近 1，表明该参数与目标光学特性的关联越强。

从图 5(a)可以看出，波长的调控呈现出少数核心参数主导的单一调控特征，参数 c_2 （相关系数 0.636）和 φ_2 （0.584）表现出最强的线性关联，是主导波长变化的核心参数； φ_1 （0.449）表现出中等程度影响而 c_1 （0.270）对波长影响较弱；而 α （0.153）和 θ （0.013）的影响则可忽略不计。对于 CD 值的调控则呈现出多参数梯度协同的复杂调控特征， φ_1 （0.532）和 c_2 （0.511）表现出最强的线性关联，是调控手性光学响应的核心参数； φ_2 （0.346）和 α （0.244）对 CD 值均表现出中等程度调控作用；而 c_1 （0.010）和 θ （0.034）的影响极其微弱。这些分析量化了不同结构参数对这两个关键光学特性的影响强度，为后续的结构优化提供了明确的指导依据。

为验证参数重要性分析的可靠性，我们构建了回归模型，并通过预测值与真实值的散点图对模型性能进行评估，结果分别如图 5(b)和(c)所示。图 5(b)展示了波长预测值与真实值的相关性，其决定系数 $R^2=0.8721$ ，表明模型能够解释 87.21%的波长变化，预测值与真实值呈现高度线性相关，数据点紧密贴合 $y=x$ 的理想线，仅在高值区（CD 值接近 1 时）存在轻微离散。该结果与参数重要性分析的结论相互印证，波长主要由少数核心参数（如 c_2 和 φ_2 ）线性调控，这种相对简单的映射关系使得神经网络模型能够高精度学习并预测波长的变化规律。图 5(c)展示了 CD 的预测值与真实值的相关性，其决定系数 $R^2=0.7631$ ，表明模型能够解释 76.31%的 CD 值变化，预测能力仍属中等偏上，但相比波长，CD 值的离

散程度更大。这一现象反映出 CD 值的调控机制更为复杂,受更多参数协同影响,与之前参数重要性分析中 CD 值受 φ_1 、 c_2 等多个参数共同作用的结论相吻合。

综合来看,两张图的 R^2 均大于 0.75,表明所构建的模型对波长和 CD 值均具备较好的预测能力,验证了参数重要性分析的可靠性。同时,波长的预测精度显著高于 CD 值的结果,也为后续优化模型提供了明确方向。

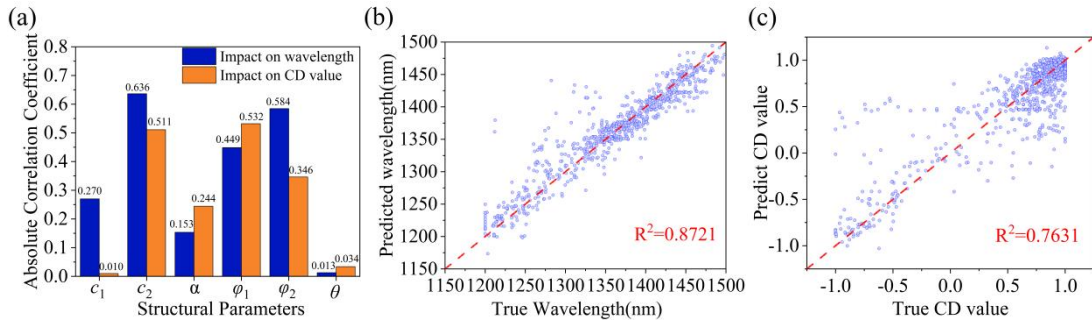


图 5.(a)不同结构参数的绝对相关系数柱状图; (b)评估模型对波长的预测精度; (c)评估模型对 CD 值的预测精度

Fig. 5. (a) Bar chart of absolute correlation coefficients for different structural parameters; (b) Evaluation of the model's prediction accuracy for wavelength; (c) Evaluation of the model's prediction accuracy for CD value.

为进一步验证模型的整体可靠性,本研究还对结构参数进行了预测误差分析。具体过程为首先通过电磁仿真获取结构参数及其对应的光学响应,并将其中部分数据用于训练神经网络;接着以未参与训练的仿真光学响应作为模型输入,驱动模型预测对应的结构参数,最后将参数预测值与仿真真实值进行对比,结果如图 6 所示。模型对所有结构参数的预测均表现出极高的精度,各参数预测结果的决定系数 R^2 均处于 0.9899~0.9904 区间,高精度复现了结构参数的真实变化特征。对参数 c_1 的预测最精确 ($R^2=0.9904$),数据点紧密贴合 $y=x$ 理想线;角度参数 φ_1 与 φ_2 的预测表现同样出色 (R^2 均为 0.9902),数据分布均匀。即使对于预测精度最低的 α 参数 ($R^2=0.9899$),也仅在个别区域存在轻微离散,整体拟合效果优异。

另外,模型对结构参数的预测精度与参数对光学特性的影响强度,属于两个相互独立的评价指标。此前参数重要性分析中, θ 对波长、CD 值的调控贡献度均为最弱,但模型对 θ 本身的预测 R^2 仍达 0.9901,与其他核心参数的预测精度无显著差异,这表明参数对输出光学特性的影响程度,并不会影响模型对参数自身变化规律的捕捉能力。

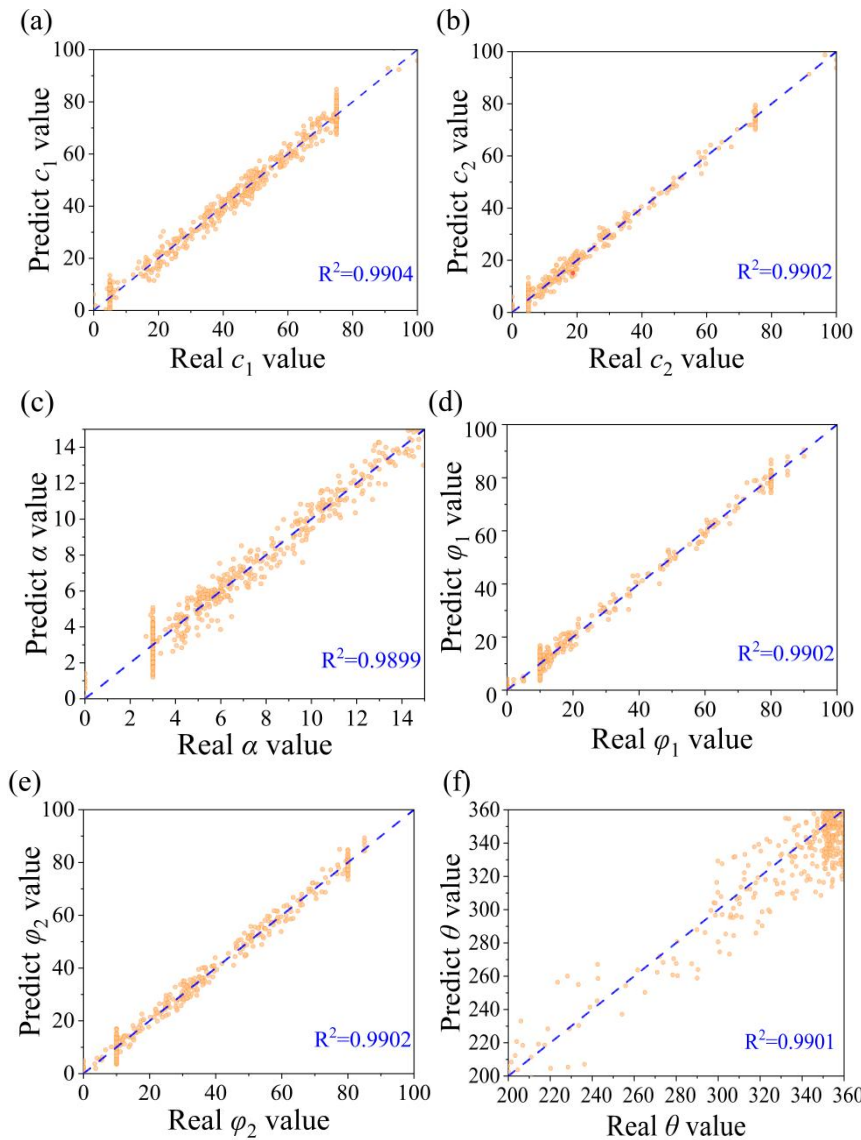


图 6.(a)结构参数 c_1 的预测值与真实值散点图；(b)结构参数 c_2 的预测值与真实值散点图；(c)结构参数 α 的预测值与真实值散点图；(d)结构参数 φ_1 的预测值与真实值散点图；(e)结构参数 φ_2 的预测值与真实值散点图；(f)结构参数 θ 的预测值与真实值散点图

Fig. 6. (a) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter c_1 ; (b) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter c_2 ; (c) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter α ; (d) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter φ_1 ; (e) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter φ_2 ; (f) Scatter plot of predicted values versus true values for structural parameter θ .

为验证模型的逆向设计能力，设置目标 CD 值 ≥ 0.8 ，模型逆向输出三组最优结构参数组合及对应的 CD 谱线。将三组参数组合使用 COMSOL 进行仿真，仿真计算出真实 CD 谱线并与预测 CD 谱线进行对比如图 7 所示。重点验证模型在 1200—1500nm 目标波长范围内的谱线形状还原能力、峰值匹配精度及整体预测可靠性。图 7(a)中预测谱线与真实谱线的峰值位置基本重合，峰值 CD 值均接

近 0.9，上升段与下降段的变化斜率基本一致，无明显偏差；图 7(b)中预测谱线与真实谱线呈现了同步变化趋势，在 1350nm 等关键节点的 CD 值高度吻合，谱线平滑无噪声，体现了模型对谱线噪声的抑制能力；图 7(c)则精准复现了谱线的完整变化过程，无相位偏移和缩放失真。

由图 7 可见，目标设为 $CD \cong 0.8$ ，模型预测的峰值 CD 值均位于 0.9 附近，满足目标要求。但因为理论上 CD 取值范围为-1 到 1，本文结构基于对称破缺 Q-BIC，存在一定辐射损耗，很难实现一种偏振完全透射、另一种完全抑制的理想状态，因此 CD 值很难达到 1。模型预测结果在 0.9 附近，均超过 0.8 的目标阈值，验证了模型逆向设计的有效性。整体而言，预测波形均能有效捕捉真实谱线的峰值位置、幅度大小、变化趋势与整体轮廓等核心特征。

对比模型对结构参数、光学特性及连续谱线的预测精度可见，模型对结构参数的预测精度显著高于对波长、CD 值的预测精度。这一差异源于二者调控机制不同：结构参数为模型直接输入，无耦合效应，预测更精准；而波长、CD 值受多参数协同调控与耦合影响，预测难度更高。其中，CD 值的调控机制比波长更为复杂，因此预测离散程度相对更高，但经数据筛选、预处理与建模策略优化后，模型仍可有效捕捉核心特征。此外，波长、CD 值验证了模型对关键光学特征的预测能力，连续谱线则验证了模型对全波段光学响应的综合预测能力，从不同层面验证了模型的可靠性。

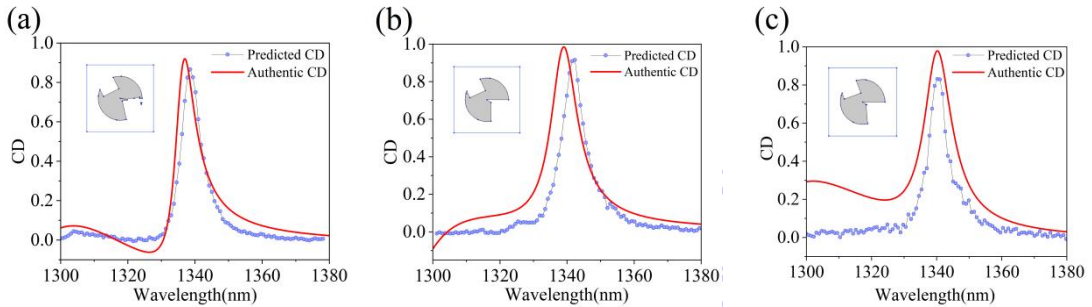


图 7.(a)结构参数为 $c_1=78.03\text{nm}$, $c_2=22.47\text{nm}$, $\alpha=0.67^\circ$, $\varphi_1=12.61^\circ$, $\varphi_2=26.76^\circ$, $\theta=348.17^\circ$ 的预测波形与真实仿真波形对比图，插图为预测结构形状；(b)结构参数为 $c_1=50.45\text{nm}$, $c_2=21.77\text{nm}$, $\alpha=1.18^\circ$, $\varphi_1=0.38^\circ$, $\varphi_2=24.71^\circ$, $\theta=327.27^\circ$ 的预测波形与真实仿真波形对比图，插图为预测结构形状；(c)结构参数为 $c_1=59.62\text{nm}$, $c_2=17.36\text{nm}$, $\alpha=0.22^\circ$, $\varphi_1=4.80^\circ$, $\varphi_2=19.98^\circ$, $\theta=326.25^\circ$ 的预测波形与真实仿真波形对比图，插图为预测结构形状

Fig. 7. (a) Comparison diagram of the predicted waveform and the true simulated waveform with structural parameters $c_1 = 78.03 \text{ nm}$, $c_2 = 22.47 \text{ nm}$, $\alpha = 0.67^\circ$, $\varphi_1 = 12.61^\circ$, $\varphi_2 = 26.76^\circ$, and $\theta = 348.17^\circ$, with the inset showing the predicted structure shape; (b) Comparison diagram of the predicted waveform and the true simulated waveform with structural parameters $c_1 = 50.45 \text{ nm}$, $c_2 = 21.77 \text{ nm}$, $\alpha = 1.18^\circ$, $\varphi_1 = 0.38^\circ$, $\varphi_2 = 24.71^\circ$, and $\theta = 327.27^\circ$, with the inset showing the

predicted structure shape; (c) Comparison diagram of the predicted waveform and the true simulated waveform with structural parameters $c_1 = 59.62$ nm, $c_2 = 17.36$ nm, $\alpha = 0.22^\circ$, $\varphi_1 = 4.80^\circ$, $\varphi_2 = 19.98^\circ$, and $\theta = 326.25^\circ$, with the inset showing the predicted structure shape.

与传统方法及现有代表性工作相比，本研究相比传统正向参数扫描，大幅减少仿真迭代^[35-39]；相比单一神经网络^[46]，我们设计的双阶段（峰值预测器+谱线预测器）网络可更精准捕捉 CD 谱线非线性特征，结构参数预测精度 $R^2 > 0.9899$ ；相比易陷入局部最优的传统优化算法，如粒子群算法^[48]，DE 全局搜索可在多维参数空间中稳定获得全局最优解，有效避免局部最优；相比面向全息、波前调控的通用超表面方法^[44,45]，本模型专门针对 BIC 手性体系的 CD 谱线进行优化，更贴合高灵敏度手性传感的实际需求。

为进一步突出本工作与现有逆向设计方法的不同，我们做了系统对比，如表 1 所示。在优化目标均为 CD 的前提下，本工作实现了 ≈ 0.9 的高 CD 值，显著高于双向卷积网络（0.84）、伴随拓扑优化（-0.76）和条件变分自编码器（ >0.6 ），证明了本方法在 BIC 手性体系下对高 CD 响应的优化能力。本方法仅需 350 组仿真数据即可完成模型训练，数据需求远低于条件变分自编码器（8696 组）和双向卷积网络（5000 组），大幅降低了计算成本与仿真负担。现有深度学习与拓扑优化方法均属于局部优化策略，易陷入局部最优解；本研究采用差分进化算法实现了全局优化，可在六维参数空间中稳定找到全局最优解，有效避免了局部最优问题，提升了设计的可靠性。

表 1 与其他逆向设计方法的对比

Table 1. Comparison with Other Inverse Design Methods

| 参考文献 | 方法 | 优化目标 | 仿真 CD 值 | 数据集大小 | 优化能力 |
|------|------------|------|---------------|-------|------|
| [47] | 双向卷积网络 | CD | 0.84 | 5000 | 局部优化 |
| [53] | 伴随拓扑优化 | CD | -0.76 | 无 | 局部优化 |
| [54] | 条件变分自编码器 | CD | >0.6 | 8696 | 局部优化 |
| 本工作 | 双阶段网络+差分进化 | CD | ≈ 0.9 | 350 | 全局优化 |

4 结 论

针对传统手性超表面设计效率低、易陷入局部最优的核心问题，本研究提出融合双阶段神经网络与 DE 算法的混合逆向设计策略，针对 DSS 结构实现了 1200—1500nm 波长范围内高 CD 谱线的精准预测。研究明确了结构参数的调控规律：波长由 c_2 （相关系数 0.636）与 φ_2 （0.584）主导，呈现少数核心参数主导特征；CD 值则由强核心参数 φ_1 、 c_2 与中等协同参数 φ_2 、 α 共同调控，形成多参数梯度协同机制，而参数 θ 对两类光学特性的影响均极为微弱（相关系数 ≤ 0.034 ），可作为固定参数简化设计空间。构建的双阶段神经网络表现出优异的全维度预测性能，

对结构参数的预测决定系数 R^2 达 0.9899 以上, 对波长与 CD 值的预测 R^2 分别为 0.8721 和 0.7631, 且能精准还原连续 CD 谱线的峰值位置、数值、幅度等核心特征, 有效解决了结构参数与光学响应的强非线性映射难题。所提出的混合逆设计策略优势显著, 通过神经网络快速预测替代传统耗时的电磁仿真, 结合 DE 算法的全局寻优能力, 成功获得高 CD 值的最优结构, 设计效率与性能均远超传统正向设计方法。该研究揭示的参数调控规律与构建的设计框架, 不仅突破了传统手性超表面设计的构型限制与效率瓶颈, 为高灵敏度手性传感、高性能圆偏振光器件等前沿领域提供了全新技术路径, 同时也为其他纳米光子器件的逆向设计提供了可借鉴的技术模式。未来研究可进一步拓展数据集规模、优化网络架构以提升预测精度, 结合微纳加工工艺引入结构可加工性约束, 推动设计—仿真—制备一体化流程的建立, 并将该策略拓展至更宽光谱范围, 为多波段高性能手性光学器件的研发提供支撑。

参考文献

- [1] Yang C, Jie G, Xiaodong Y 2018 *Nano letters*. **18** 520
- [2] Plum E, Fedotov V A, Zheludev N I 2009 *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **11** 074009
- [3] Valev V K, Baumberg J J, Sibilia C, Verbiest T 2013 *Adv. Mater.* **25** 2509
- [4] Yang Y, Kim Y, Gwak J, So S, Mun J, Kim M, Jeong H, Kim I, Badloe T, Rho J 2021 *Chirality, Magn. Magn. Electr.* **138** 241
- [5] Inaki M, Liu J Y, Matsuno K 2016 *Phil. Trans. R. Soc. B* **371** 1
- [6] Gansel J K, Thiel M, Rill M S, Decker M, Bade K, Saile V, Freymann G v, Linden S, Wegener M 2009 *Science* **325** 1513
- [7] Brown G, Rho M 2002 *Phys. Rep.* **363** 85
- [8] Ma Z J, Li Y, Li Y, Gong Y D, Maier S A, Hong M H 2018 *Opt. Express* **26** 6067
- [9] Sell D, Yang J, Doshay S, Yang R, Fan J A 2017 *Nano Lett.* **17** 3752
- [10] Gerbier P, Domingo N, Gomez-Segura J, Ruiz-Molina D, Amabilino D B, Tejada J, Williamson B E, Veciana J 2004 *J. Mater. Chem.* **14** 2455
- [11] Peng K Z, Huang Y J, Jiang H, Cui Y, Zhang H, Jiang Y Y, Zhao W R 2022 *Opt. Express* **30** 29022
- [12] Hu H B, Sekar S, Wu W B, Battie Y, Lemaire V, Arteaga O, Poulikakos L V, Norris D J, Giessen H, Decher G, Pauly M 2021 *ACS Nano* **15** 13653
- [13] Phon R, Jeong H, Lim S 2022 *Adv. Mater. Technol.* **7** 2101706
- [14] Asefa S A, Shim S, Seong M, Lee D 2023 *Appl. Sci.* **13** 10590

- [15] Manoccio M, Esposito M, Passaseo A, Cuscunà M, Tasco V 2020 *Micromachines* **12** 6
- [16] Li T Y, Huang L L, Liu J, Wang Y T, Zentgraf T 2017 *Opt. Express* **25** 4216
- [17] Su Z X, Song K, Yin J B, Zhao X P 2017 *Opt. Lett.* **42** 2366
- [18] Khaliq H S, Nauman A, Lee J W, Kim H R 2023 *Adv. Opt. Mater.* **11** 2300644
- [19] Kuznetsov A I, Brongersma M L, Yao J, Chen M K, Levy U, Tsai D P, Zheludev N I, Faraon A, Arbabi A, Yu N, Chanda D, Crozier K B, Kildishev A V, Wang H, Yang J K W, Valentine J G, Genevet P, Fan J A, Miller O D, Majumdar A, Fröch J E, Brady D, Heide F, Veeraraghavan A, Engheta N, Alù A, Polman A, Atwater H A, Thureja P, Paniagua-Dominguez R, Ha S T, Barreda A I, Schuller J A, Staude I, Grinblat G, Kivshar Y, Peana S, Yelin S F, Senichev A, Shalaev V M, Saha S, Boltasseva A, Rho J, Oh D K, Kim J, Park J, Devlin R, Pala R A 2024 *ACS Photonics* **11** 816
- [20] Lv S Y, An L, Luo W F, Zhang L L, Liu J 2025 *Opt. Commun.* **596** 132453
- [21] Zhao X F, Wu X R, Lin Y H, Lin F, Fang Z Y 2025 *Opt. Lett.* **50** 6509
- [22] Sun Y W, Shi K Z, Hu Z P, Jin Y, He S 2024 *Opt. Lett.* **49** 6329
- [23] Hou Y D, Qiu M, Cao Z L, Zhou J, Ong H C, Jin W, Du J L, Lei D Y 2022 *Adv. Funct. Mater.* **32** 2204095
- [24] Xun W Y, Sun K L, Maqbool E, Han Z H 2025 *Adv. Opt. Mater.* **13** 2500713
- [25] Wang F, Wang Z, Shi J 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 153506
- [26] Lv S Y, Zhang L L, Luo W F, An L, Liu J 2025 *Phys. Lett. A* **558** 130877
- [27] Luo X Q, Du X, Huang R X, Li G Y 2023 *Laser Photon. Rev.* **17** 2300186
- [28] KwangHyon K, JuRyong K 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2101162
- [29] Yang H Y, Sun H R, Yang Y H, He Q L, Li J Q, Xiao G L 2025 *Opt. Commun.* **575** 131268
- [30] Huang Z S, Wang J, Jia W, Zhang S W, Zhou C H 2024 *Opt. Express* **32** 33029
- [31] Qin M B 2022 *Ph.D. Dissertation* (Nanchang: Nanchang University) (in Chinese)
[秦梅宝 2022 博士学位论文 (南昌:南昌大学)]
- [32] Koshelev K, Lepeshov S, Liu M K, Bogdanov A, Kivshar Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 193903.
- [33] Kang M, Liu T, Chan C T, Xiao M 2023 *Nat. Rev. Phys.* **5** 659
- [34] Lv S Y, Hu F, Luo W F, Xu H F, An L 2024 *Opt. Express* **32** 30053

- [35] Zhou C B, Huang L J, Jin R, Xu L, Li G H, Rahmani M, Chen X S, Lu W, Miroshnichenko A E 2023 *Laser Photon. Rev.* **17** 1
- [36] Zhou C B, Jin R, He H X, Huang J, Li G H, Huang L J 2026 *Light Sci. Appl.* **15** 84
- [37] Hu H, Zhou C B, Zhang Y K, Hu M X, Peng J T, Tang H W, Huang L J, Liu J L, Guan C Y, Zhu Z, Chen X S, Lu W, Li X P, Deng Z L, Qiu C W, Li G H, Shi J H 2026 *eLight* **6** 12
- [38] Li H J, Zhou H M, Wei G A, Xu H S, Qin M, Liu J Q, Wu F 2023 *Nanoscale* **15** 6636
- [39] Wang J R, Xu H S, Si J M, Wu H S, Wang H, Qiu H L, Jiang H Y, Qin M, Liu J Q, Wu F, Li H J 2025 *Appl. Phys. Lett.* **127** 061701
- [40] Singh S, Kumar R, Singh P, Hegde R 2025 *Opt. Express* **33** 20308
- [41] Yu Z J, Li M X, Xing Z Y, Gao H, Liu Z Y, Pu S L, Mao H, Cai H, Ma Q, Ren W Q, Zhu J, Zhang C, Zhang C 2024 *Opto-Electron. Sci.* **3** 17
- [42] Dainese P, Marra L, Cassara D, Portes A, Oh J, Yang J, Palmieri A, Rodrigues J R, Dorrah A H, Capasso F 2024 *Light Sci. Appl.* **13** 300
- [43] Gao L, Li X Z, Liu D J, Wang L H, Yu Z F 2019 *Adv. Mater.* **31** 1905467
- [44] Wang J, Chen J, Yu F L, Chen R S, Wang J X, Zhao Z Y, Li X N, Xing H Z, Li G H, Chen X S, Lu W 2024 *Nat. Commun.* **15** 6284
- [45] Wang J, Yu F L, Chen J, Wang J X, Chen R S, Chen S Y, Geng T X, Xiao Y H, Li Z Y, Zuo Y, Xing H Z, Guo C, Li G H, Chen X S, Lu W 2026 *Laser Photon. Rev.* **20** e02573
- [46] Wang L F, Wang W Q, Dong Q, Wang L H, Gao L 2024 *J. Opt. Soc. Am. B* **41** A146
- [47] Chen L, Sang T 2025 *Opt. Laser Technol.* **184** 112500
- [48] Wu Q, Fan W H, Qin C, Jiang X Q 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 475103
- [49] Shi T, Deng Z L, Geng G Z, Zeng X Z, Zeng Y X, Hu G W, Overvig A, Li J J, Qiu C W, Alù A, Kivshar Y S, Li X P 2022 *Nat. Commun.* **13** 4111
- [50] Lahby M, Cherkaoui L, Adib A 2012 *Int. J. Bus. Data Commun. Netw.* **8** 32
- [51] Storn R, Price K 1997 *J. Glob. Optim.* **11** 341
- [52] Yin C J, Zhang Y F 2025 *Mater. Sci.* **8** 1679
- [53] He C, Li N, Zhao Y X, Ou H Y, Wang Y T, Jing X L, Zhang N, Su Z X, Huang L L 2025 *Photonics Res.* **13** 2054

[54] Zhang N, Gao F, Wang R, Shen ZL, Han DH, Cui YQ, Zhang LY, Chang C, Qiu CW, Chen XF 2024 *Advanced Materials* **37** 2411490

录用稿件，非最终出版稿

Inverse Design of Chiral Metasurfaces Based on Collaborative Optimization of Neural Networks and Differential Evolution

LUO Wenfeng, ZHAI Bosen, LV Shuyuan[†], WEI Huang, SU Ziwen

School of Electronic Engineering, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an 710121,
Shannxi, China

Abstract

Chiral metasurfaces based on bound states in the continuum provide an important way to develop high-performance chiral optical devices. However, traditional design methods usually rely on complicated parameter scanning, which are limited by insufficient flexibility and easy trapping into local optima, and thus hardly achieve the optimal chiral optical response. This study adopts the double scythe-shaped (DSS) structure and proposes a hybrid inverse design strategy combining neural network and differential evolution algorithm (DE). It can efficiently and accurately design chiral metasurfaces with designated circular dichroism (CD) responses in the wavelength range of 1200—1500 nm. This model consists of a peak predictor and a spectrum predictor, which realizes high-precision and cross-dimensional mapping from structural parameters to chiral optical responses. It can accurately capture the key characteristics of CD spectra and exhibits excellent spectral prediction capability. On this basis, leveraging the global search ability of the DE algorithm, the optimal combination of structural parameters is inversely

predicted driven by the target CD value. Experimental results show that the coefficient of determination (R^2) of the two-stage neural network for structural parameter prediction exceeds 0.9899, and the R^2 values for wavelength and CD prediction are 0.8721 and 0.7631, respectively. The model can accurately restore the core characteristics of circular dichroism spectra and effectively address the strong nonlinear mapping problem between structural parameters and optical responses. The proposed model only requires 350 groups of simulation data for training, which is far less than the thousands of datasets required by existing deep learning methods. Compared with the existing inverse design methods, the proposed strategy achieves a higher CD value (≈ 0.9) and exhibits obvious advantages in both efficiency and performance. This study gives full play to the fast surrogate prediction advantage of neural networks and the global optimization capability of differential evolution algorithm. It breaks through the technical bottlenecks of traditional chiral metasurface design, opens up a new technical route for high-sensitivity chiral sensing applications, and provides a reference for the inverse design of other nanophotonic devices.

Keywords: Bound States in the Continuum; Chiral Metasurface; Circular Dichroism; Inverse Design