

补充材料

《基于视觉变换器的高精度光子晶体能带预测》

陈冠桦¹⁾ 姚俊驰¹⁾ 朱惠芳²⁾ 智婷²⁾ 汪金²⁾ 薛俊俊²⁾ 陈琳²⁾

陶涛³⁾ 陶志阔^{2)†}

1) (南京邮电大学通信与信息工程学院, 南京 210003)

2) (南京邮电大学电子与光学工程学院、柔性电子(未来技术)学院, 南京 210003)

3) (南京大学电子科学与工程学院, 南京 210023)

为给模型提供更丰富的物理特征, 我们尝试改变介质柱的介电常数, 通过灰度值来表示介质柱的折射率。生成了 450 组数据用于训练, 30 组数据用于测试, 以确保模型的性能和泛化能力。

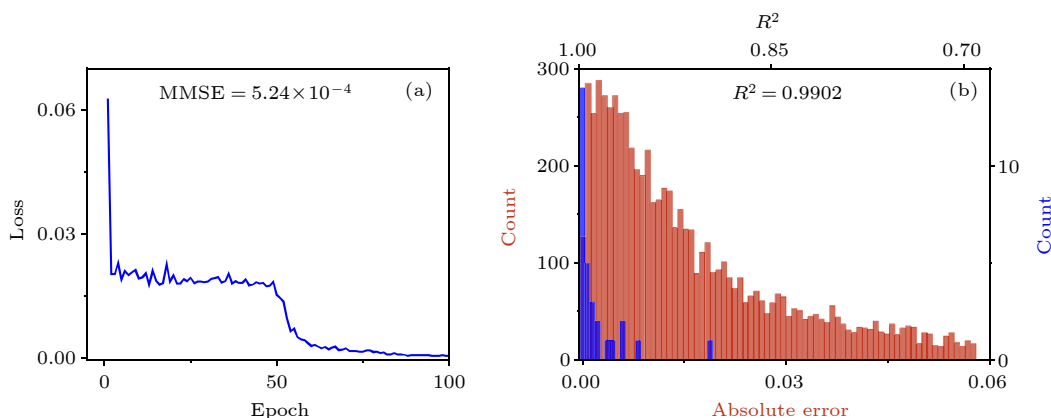


图 S1 (a) ViT 模型随训练迭代的损失收敛; (b)使用 ViT 预测频率与模拟频率的绝对误差分布以及 R^2 值的分布

Fig. S1. (a) ViT model's loss convergence over training epochs; (b) distribution of absolute errors between predicted and simulated frequencies using ViT, along with the distribution of R^2 values.

图 S1 展示了 ViT 模型在预测光子晶体能带结构上的性能。图 S1(a)显示了模型损失随训练迭代次数的下降趋势, 最终损失值 $\text{MMSE} = 5.24 \times 10^{-4}$ 表明模型拟合良好。图 S1(b)中, 预测频率与模拟频率的绝对误差大多较小, 且 R^2 值平均为 0.9902, 显示了模型的高预测精度和良好的泛化能力。这些结果表明, 在

考虑介质柱介电常数等更多参数时, ViT 模型在光子晶体能带结构预测任务上效率和准确性都很高。

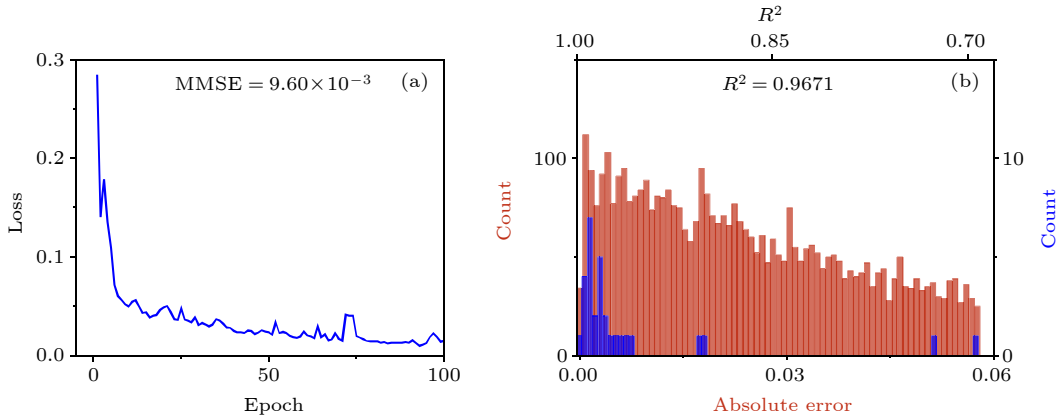


图 S2 (a) ViT 模型随训练迭代的损失收敛; (b)使用 ViT 预测群速度与模拟群速度的绝对误差分布以及 R^2 值的分布

Fig. S2. (a) ViT model's loss convergence over training epochs; (b) distribution of absolute errors between predicted and simulated group velocity using ViT, along with the distribution of R^2 values.

群速度预测方面, 我们生成了 450 组数据用于训练, 30 组数据用于预测。图 S2 展示了 ViT 模型在训练过程中的损失收敛情况以及预测结果的分析, 其中图 S2(a)显示了模型损失随训练轮次的减少而快速下降并趋于稳定, 表明模型训练效果良好且具有良好的收敛性, MMSE 为 9.60×10^{-3} , 而图 S2(b)则展示了预测值与模拟值之间的绝对误差分布以及 R^2 值的分布, 大部分绝对误差集中在较小范围内, 且 R^2 值为 0.9671, 展示较好预测精度。