

基于贝叶斯优化算法的超表面结构色逆向设计方法

黄子扬^{1,2}, 张振荣^{1,2}, 孙宇^{1,2}, 黄洋³, 谢锋^{3*}

(1. 广西大学 计算机与电子信息学院, 南宁 530004;

2. 广西多媒体通信与网络技术重点实验室, 南宁 530004; 3. 南宁职业技术大学 人工智能学院, 南宁 530008)

摘要: 针对传统结构色正向设计存在的优化参数较少、计算耗时长以及静态结构色不可调等问题, 提出一种基于贝叶斯优化算法的超表面结构色逆向设计方法。通过引入可调谐的相变材料设计纳米天线, 结合贝叶斯优化算法和时域有限差分法, 对超表面结构色参数进行仿真优化。利用结构内部的 Mie 谐振在反射模式下产生结构颜色, 同时通过相变材料的不同相态转变, 实现可逆的颜色调谐。仿真结果表明: 所设计的结构色器件具备超表面的颜色动态可调谐功能, 在波长分别为 450、545、660 nm 时获得的色差分别为 63.30、69.30、54.21, 并具有角度敏感的特性。

关键词: 结构色; 相变材料; 贝叶斯优化算法; 超表面结构

中图分类号: TN256 **文献标志码:** A **文章编号:** 1002-5561(2025)03-0097-05

DOI: 10.13921/j.cnki.issn1002-5561.2025.03.016

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Inverse design method for structural colors of metasurfaces based on Bayesian optimization algorithm

HUANG Ziyang^{1,2}, ZHANG Zhenrong^{1,2}, SUN Yu^{1,2}, HUANG Yang³, XIE Feng^{3*}

(1. School of Computer, Electronic and Information, Guangxi University, Nanning 530004, China;

2. Guangxi Key Laboratory of Multimedia Communications and Network Technology, Nanning 530004, China;

3. School of Artificial Intelligence, Nanning Vocational and Technical University, Nanning 530008, China)

Abstract: To address the issues of traditional forward design for structural colors, such as limited optimization parameters, time-consuming computations, and non-tunable static structural colors, an inverse design method for structural colors of metasurfaces based on the Bayesian optimization algorithm is proposed. By introducing tunable phase-change materials to design nanoantennas and combining the Bayesian optimization algorithm with the finite-difference time-domain method, the structural color parameters of the metasurface are simulated and optimized. The designed structure utilizes Mie resonances in reflection mode to generate structural colors, while reversible color tuning is achieved through phase transitions of the phase-change material. Simulation results demonstrate that the proposed structural color device exhibits dynamic tunability of metasurface colors, with color differences of 63.30, 69.30, and 54.21 achieved at wavelengths of 450 nm, 545 nm, and 660 nm, respectively, along with angle-sensitive characteristics.

Key words: structural colors, phase-change materials, Bayesian optimization algorithm, metasurface structure

收稿日期: 2025-01-05。

基金项目: 广西重点研发计划(桂科 AB23075112)资助; 广西高校中青年教师科研基础能力提升项目(2024KY1059)资助。

作者简介: 黄子扬(2003—), 男, 本科生, 现就读于广西大学计算机与电子信息学院通信工程专业, 主要研究方向为光器件设计以及光信号处理, 曾荣获 2024 年中国国际大学生创新大赛国赛铜奖。

*** 通信作者:** 谢锋(1989—), 男, 硕士, 副教授, 主要研究方向为人工智能、光器件设计。



0 引言

结构色是通过微纳结构与光的相互作用(如反射、散射和干涉)调节光传播, 从而产生颜色的现象^[1-2]。与传统化学染料相比, 结构色不仅具有更高的耐久性和环境友好性, 还能实现更高的分辨率^[3-4]。此外, 结构色与互补金属氧化物半导体(CMOS)技术的兼容性进一步推动了其在光电器件中的广泛应用^[5]。然而, 表面等离子体共振(SPR)限制了结构色的色彩饱和度和亮度, 因此提升结构色性能成为当前研究的重点方向。

黄子扬,张振荣,孙宇,等:基于贝叶斯优化算法的超表面结构色逆向设计方法

为此,研究人员开始探索动态颜色可调的超表面结构设计,尤其是通过相变材料进行调节。 VO_2 、 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST)^[6]和 Sb_2S_3 等无机相变材料因其可逆相变、低开关能量和快速响应特性,在可调颜色领域受到广泛关注^[7-8]。其中, Sb_2S_3 材料以其低传播损耗和优异光学性能,展现出比 VO_2 、GST 更大的应用潜力,尤其在集成光学器件设计中表现出色^[9-10]。

在结构色设计中,微纳米结构的几何形状对光学性能至关重要。传统设计方法通常依赖正向设计,即通过人工选择结构参数优化光谱特性。这种方法效率较低,尤其在处理复杂结构时其局限性更为显著。近年来,逆向设计方法逐渐兴起,成为解决复杂结构设计问题的有效手段。逆向设计通过从目标光谱特性反推所需的结构参数,显著提高了设计效率,并扩展了可能的设计方案^[11]。研究人员提出了多种优化算法用于光器件设计。例如,SPUHLER M M 等人^[12]采用进化算法优化平面硅酸盐光斑尺寸转换器设计,耦合效率提升超过 2 dB。CARRILLO S G C 等人^[13]使用模式搜索算法,结合 Matlab 的全局优化工具箱找出最佳几何形状,使得计算出的光谱对应的点尽可能接近各自选择的目标。HUANG X 等人^[14]利用遗传算法优化以 GST 为相变材料的动态反射颜色光器件,其基色色差分别达到了 23.39、13.77 和 35.42。此外,粒子群优化^[15]、模拟退火^[16]和非线性搜索^[17]等算法也被广泛应用于微纳光器件的逆向设计中。尽管这些算法在优化复杂光学结构方面取得了较好成果,但它们在处理多维参数空间和非凸优化问题时,通常需要大量计算资源。相比之下,贝叶斯优化算法通过构建高斯过程等代理模型^[18],以较少的计算代价预测目标函数值,显著降低了对数值模拟的依赖。同时,贝叶斯优化算法利用后验更新策略实现全局搜索,自动化寻找最优结构参数,从而更高效地实现结构色调节与优化。

基于此,本文提出一种基于贝叶斯优化算法的超表面结构色逆向设计方法。

1 基本结构设计与理论

为实现高性能动态结构色,本文设计了一种基于 Sb_2S_3 纳米天线的全介质超表面结构。该结构由多个相同的微结构单元构成,如图 1 所示。结构从下往上依次为 Ag 衬底(厚 100 nm)、 SiO_2 层(厚 200 nm)和由相变材料 Sb_2S_3 制成的介质纳米天线。纳米天线的关键几何参数包括圆环厚度 H 、外径 R 、内径 r 以及衬底周期 P ,这些参数将作为贝叶斯优化算法的搜索变量。

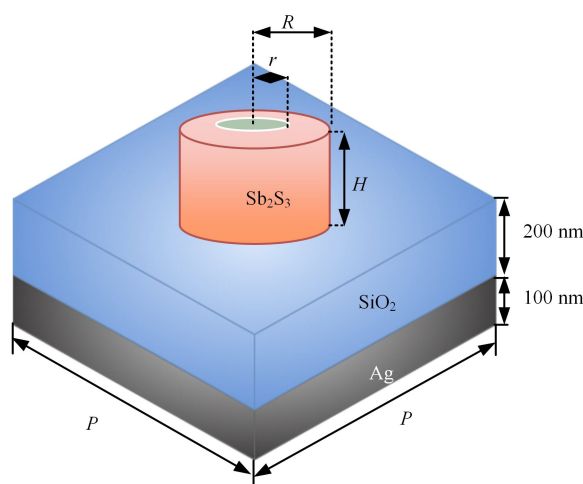


图 1 超表面结构色单元结构图

1.1 结构色的产生与调控机理

图 1 中超表面结构单元的结构色生成机制源于 Mie 共振诱导的光谱调控特性。当亚波长尺度 Sb_2S_3 圆柱体在特定几何参数下与入射光激发 Mie 共振时,其电磁散射特性呈现显著的波长选择性,即在可见光波段会产生强烈的多极子共振,导致特定波长光波的增强散射与局域吸收^[19]。散射光场的空间干涉调制形成具有角度依赖性的特征光谱分布,通过几何参数优化可实现不同色度的调控。

此外,基于 Sb_2S_3 的相变特性,其介电各向异性与其原子排列的有序性直接相关,演化机理遵循晶体场调控机制。晶态的有序结构通过共振键合增强介电响应并引入方向依赖性,而非晶态的无序性导致介电常数各向同性且数值降低。这种演化可以通过 2 种机制影响光学响应。其一,通过调控电磁波与材料的相互作用强度改变共振频率,实现波长选择性调控;其二,通过调整共振模式的空间分布特性影响能量耗散路径,实现模式损耗的动态调制。这 2 个调控维度的协同作用最终使结构色呈现可逆的动态调谐特性。

1.2 贝叶斯优化算法逆向设计原理

贝叶斯优化算法基于贝叶斯统计理论,用于优化高计算成本且无显式表达的目标函数。图 2 描述了贝叶斯优化算法实现光器件逆向设计的原理,与传统优化方法(如梯度下降法、遗传算法等)的原理不同,该算法通过构建一个目标函数的代理模型来指导搜索过程,从而找到使目标函数取得最优值的参数配置。具体过程如下:

1) 初始化与仿真:使用 Lumerical FDTD Solutions 软件随机选择一组结构参数进行仿真计算,得到目标函数的初始值,并基于这些数据构建初始代理模型。

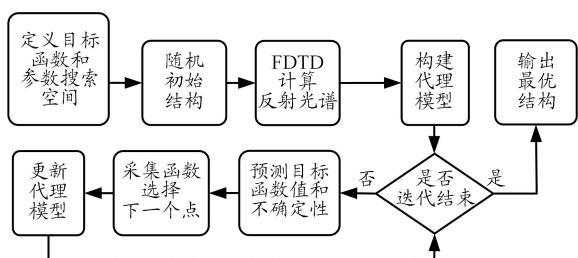


图2 贝叶斯优化算法逆向设计原理框图

2) 贝叶斯优化: 算法利用当前代理模型预测最可能带来性能改进的参数组合, 对结构设计进行调整。随后, 重新进行仿真计算以更新目标函数值。优化过程中采用期望改进(EI)作为采集函数, 平衡探索与利用, 以确保快速收敛。

3) 迭代与收敛: 随着迭代次数的增加, 代理模型逐渐逼近目标函数, 算法最终收敛, 获得一组最优结构参数。

4) 结果分析与性能评估: 在算法收敛后, 分析最优设计的性能, 评估其在不同目标波长下的光学响应, 验证贝叶斯优化算法在逆向设计中的有效性。

2 仿真结果及分析

2.1 算法优化效果

本文采用 Lumerical FDTD Solutions 软件仿真, 设置宽带平面波光源(400~700 nm, z 轴垂直入射, 线性偏振), 波长步长为 1 nm, 通过时域有限差分(FDTD)频域

功率监视器记录稳态场分布。

本文采用的贝叶斯优化算法通过代理模型探索了由圆环厚度 H 、外径 R 、内径 r 、衬底周期 P 这 4 个结构参数组成的参数空间, 得到了算法在目标波长分别为 450、545、660 nm 时的平行坐标图, 如图 3 所示。图中品质因素(FOM)值被划分为低、中、高、最佳 4 个区间, 以直观呈现其分布特征。图中的红色曲线代表最优解, 其分布特征清晰表明: 在搜索过程中, 参数内径 r 和衬底周期 P 的样本点分布显著密集。这一现象印证了贝叶斯优化算法对这两个关键参数进行了更为精细的探索, 既体现了算法在高维参数空间中的高效搜索能力, 又通过可视化路径追踪证实了算法能基于历史数据智能选择评估点, 从而快速收敛至最优参数配置。除此之外, 在这 3 种波长情况下, 随着贝叶斯优化算法逐步寻优, 目标值逐渐向最佳目标值收敛, 这表明了算法的全局寻优有效性。

目标波长分别为 450、545、660 nm 时, 外径 R 、内径 r 与目标值的 3D 散点分布图如图 4 所示。可以看出, 在这 3 种波长情况下, 算法在蓝色区域进行了更密集搜索, 以确认和优化这些潜在的最优解。图中蓝色区域对应微纳结构的尺寸参数空间, 该区域参数组合实现优异颜色反射性能的概率更高, 这一分布特征有效验证了算法具备优异的全局寻优能力。

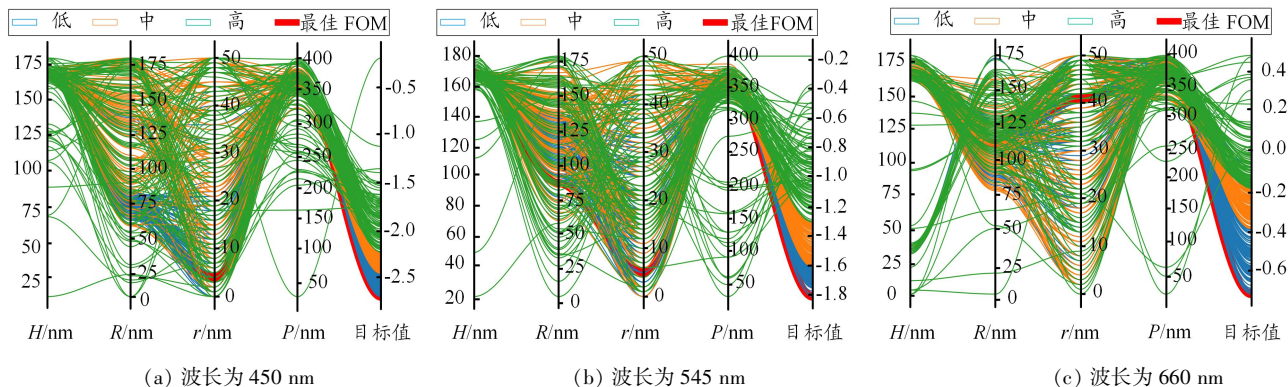
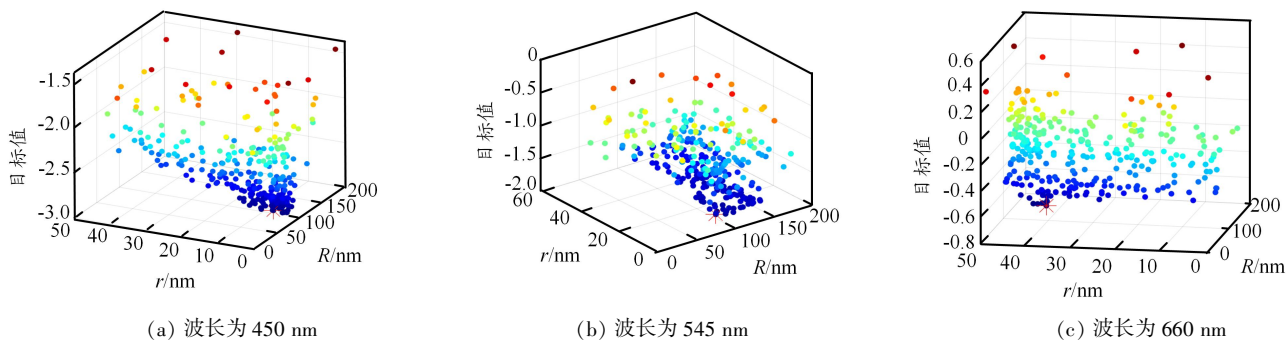


图3 平行坐标图

图4 R 、 r 与目标值的3D散点分布图

算法的收敛曲线如图 5 所示。可以看出,在 3 种不同波长情况下,目标值曲线在前 100 次迭代的变化均较为迅速,往后逐渐收敛,表明了算法对于提升超表面结构性能的高效性。

优化超表面结构色器件的几何参数时,与遗传算法^[19]、深度学习算法^[20]相比,在优化参数相同且均为 4 个的情况下,遗传算法、深度学习算法、贝叶斯优化算法需要调用的目标函数次数(迭代次数)分别为 4 000、4 660、300 次,这表明贝叶斯优化算法在超表面结构色器件设计中具有速度优势。

为了凸显贝叶斯优化算法优化前后的效果,在表 1 的最优结构参数下,本文对比了贝叶斯优化算法初始结构与最优结构的反射光谱。仿真结果表明,与初始结构相比,最优结构的目标波长的反射光谱值在 400~700 nm 波长范围内是最高的,同时有效抑制了其它干扰纯色的共振波长。

表 1 贝叶斯优化算法得到的最优结构参数

波长/nm	H/nm	R/nm	r/nm	P/nm
450	141	75	4	372
545	169	87	5	366
660	167	112	41	374

2.2 色差性能分析

本文对贝叶斯优化算法设计的超表面结构色器件在不同目标波长下的性能进行了仿真分析。当 Sb_2S_3 受到外部的短光脉冲或电脉冲刺激时,超表面结构色器件的反射特性会因材料相变(非晶态与晶态)而发生改变,从而实现动态颜色调控。仿真结果表明,该结构色器件在 450 nm(蓝光)、545 nm(绿光)和 660 nm(红光)处均呈现明显的反射峰,且非目标波长的杂散反射得到有效抑制。当光入射至 Sb_2S_3 纳米天线构成的超表面时,在表 1 最优参数下通过 Mie 谐振产生鲜

明的反射结构色,其晶态与非晶态间的色差分别达到 63.30、69.30 和 54.21,如图 6 所示,展现出优异的可逆调谐特性和视觉对比度。

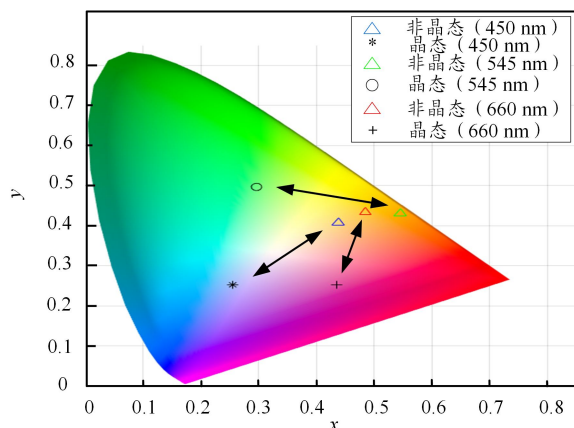
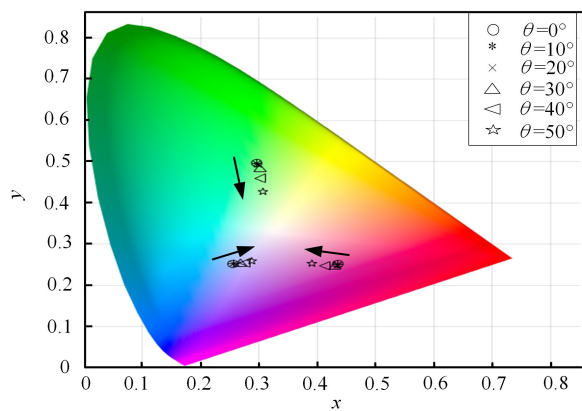


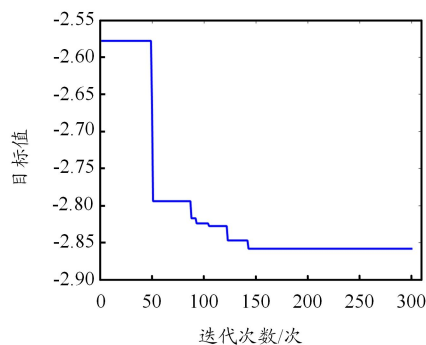
图 6 晶态和非晶态的色差性能比较

2.3 入射角度敏感性分析

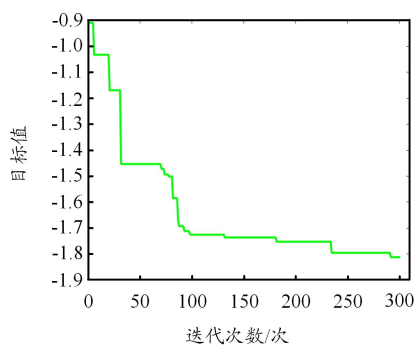
为系统研究超表面结构色器件的角度依赖性及其动态调谐特性,本文通过改变光源入射角度 θ ($\theta=0^\circ\sim 50^\circ$,步长为 10°)表征其光学响应特性,得到入射角对超表面结构的影响结果如图 7 所示。可以看出,在结



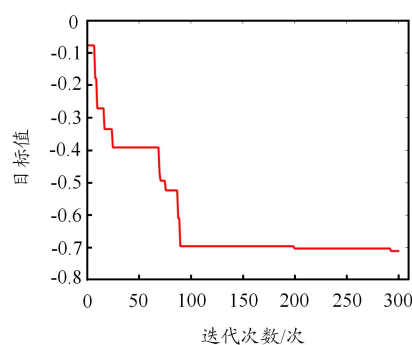
(b) 非结晶态



(a) 波长为 450 nm

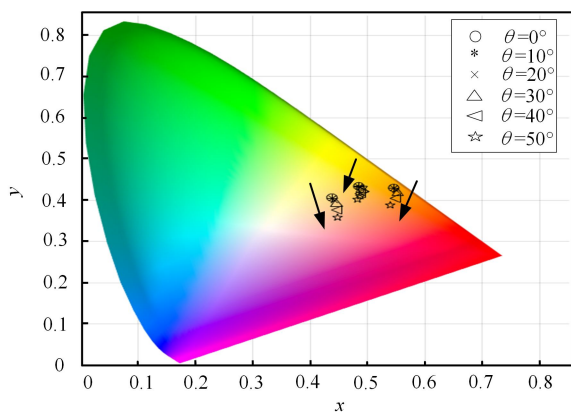


(b) 波长为 545 nm



(c) 波长为 660 nm

图 5 算法搜索的收敛曲线



(b) 非结晶态

图7 入射角对超表面结构的影响

晶态下,红、绿、蓝三色随入射角增大会向色品图中心呈现近似线性迁移,而非晶态则向红紫色区域渐进偏移,且结晶态的颜色坐标变化幅度显著大于非晶态。这种角度敏感性具有双重效应:其一,大角度入射会导致颜色饱和度降低与色域压缩,可能制约宽视角场景下的应用;其二,通过耦合相变调控与角度响应特性,可构建具有入射角依赖的动态调谐系统,这对开发光学加密器件具有独特价值。基于此特性,可在广视角显示领域采用微纳结构优化设计补偿角度偏移,而在防伪加密领域构筑多维调控光学界面。

3 结束语

本文提出了一种基于贝叶斯优化算法的超表面结构色逆向设计方法,并将其成功应用于以 Sb_2S_3 纳米天线为基本单元的全介质超表面结构设计。通过该方法,经过300次迭代即可获得不同目标波长下的最优结构参数,实现可调控的结构色器件设计。该器件在波长为450、545、660 nm时获得的色差分别为63.30、69.30、54.21,并具有角度敏感的特性。本文方法具有收敛速度快、全局搜索效率高等特点,为微纳光学器件的逆向设计提供了新思路。

参考文献:

- [1] HU Q, LIN K T, LIN H, et al. Graphene metapixels for dynamically switchable structural color[J]. ACS Nano, 2021, 15(5): 8930–8939.
- [2] WEN K, ZHANG Z, JIANG X, et al. Image representation of structure color based on edge detection algorithm[J]. Results in Physics, 2020, 19: 103441-1–103441-7.
- [3] ZENG L, YANG Y, XIAO G. An all-dielectric color filter, with a wider

color Gamut[J]. Photonics, 2022, 9(10): 680-1–680-11.

- [4] LI H, ZHANG X, ZHOU F, et al. Tunable color gamut based a symmetric microcavity governed by Sb_2S_3 [J]. Optics Communications, 2022, 508: 127683-1–127683-8.
- [5] PARK C S, KOIRALA I, GAO S, et al. Structural color filters based on an all-dielectric metasurface exploiting silicon-rich silicon nitride nanodisks[J]. Optics Express, 2019, 27(2): 667–679.
- [6] 赵钰, 翟凤潇, 张晓冬, 等. 基于 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 相变材料的可调谐近红外光学超构表面吸收器[J]. 光通信技术, 2023, 47(4): 21–25.
- [7] WANG Q, ROGERS E T F, GHOLIPOUR B, et al. Optically reconfigurable metasurfaces and photonic devices based on phase change materials[J]. Nature photonics, 2016, 10(1): 60–65.
- [8] ZHAO K, HAN W, HAN Z, et al. Ultrafast laser-induced integrated property-structure modulation of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ for multifunction and multilevel rewritable optical recording[J]. Nanophotonics, 2022, 11(13): 3101–3113.
- [9] FANG Z, ZHENG J, SAXENA A, et al. Non-volatile reconfigurable integrated photonics enabled by broadband low-loss phase change material[J]. Advanced Optical Materials, 2021, 9(9): 2002049-1–2002049-26.
- [10] HONG J Y, LIN L Y, LI X. Electrodeposition of Sb_2S_3 light absorbers on TiO_2 nanorod array as photocatalyst for water oxidation[J]. Thin Solid Films, 2018, 651: 124–130.
- [11] 常乐瑶, 王慧琴, 李家祥, 等. 多通道片上微纳波分解复用器的智能逆向设计[J]. 光通信技术, 2024, 48(6): 40–45.
- [12] SPUHLER M M, OFFREIN B J, BONA G L, et al. A very short planar silica spot-size converter using a nonperiodic segmented waveguide[J]. Journal of Lightwave Technology, 1998, 16(9): 1680–1685.
- [13] CARRILLO S G C, TRIMBY L, AU Y Y, et al. A nonvolatile phase-change metamaterial color display[J]. Advanced Optical Materials, 2019, 7(18): 1801782-1–1801782-10.
- [14] HUANG X, HUANG J, QIAN Y, et al. Nonvolatile phase-change materials color display designed by evolutionary search[J]. Results in Physics, 2021, 29: 104701-1–104701-9.
- [15] ROBINSON J, RAHMAT-SAMII Y. Particle swarm optimization in electromagnetics[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2004, 52(2): 397–407.
- [16] KIRKPATRICK S, GELATT JR C D, VECCHI M P. Optimization by simulated annealing[J]. Science, 1983, 220(5): 671–680.
- [17] STUCKMAN B E. A global search method for optimizing nonlinear systems[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 1988, 18(6): 965–977.
- [18] RASMUSSEN C E. Gaussian processes in machine learning[M]. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [19] WEI X, NONG J, ZHANG Y, et al. Sb_2S_3 -based dynamically tuned color filter array via genetic algorithm[J]. Nanomaterials, 2023, 13(9): 1452-1–1452-17.
- [20] GAO L, LI X, LIU D, et al. A bidirectional deep neural network for accurate silicon color design[J]. Advanced Materials, 2019, 31(51): 1905467-1–1905467-8.