

利用遗传算法 优化超表面拓扑结构

基于自然选择的优化算法可以用来确定光学天线超表面的最佳设计配置。

作者 SARAH FIELDS

在工程领域,人们常常从自然界中汲取灵感,探索解决设计问题的新方法。无论是从动物翅膀周围的流体流动中寻求启发,为系统的冷却装置提供相关信息,还是研究鼻涕虫黏液以发明更好的医用黏合剂,亦或是模仿鸟喙的形状来设计高速列车的车头,人们总能在大自然中找到解决问题的方法,甚至获取最不可思议的设计方案中的关键。

从本质上来说,优化过程就是从一组控制研究系统的参数中系统性地选择输入值,使损失函数最小化的过程。即使在电磁超表面优化这样一个充满数学理论的世界中,人类向大自然寻求答案也不足为奇。

美国空军技术学院 (Air Force Institute of Technology) 的 Bryan Adomanis 对创建一种能够作为三维惠更斯源的像素化栅格天线很感兴趣;这是一种基于三维金属纳米颗粒的光学天线,既能够让信号仅沿指定方向传播,同时又能保持所需的幅值和相位延时。在这种天线的开发过程中,超表面几何结构是电磁响

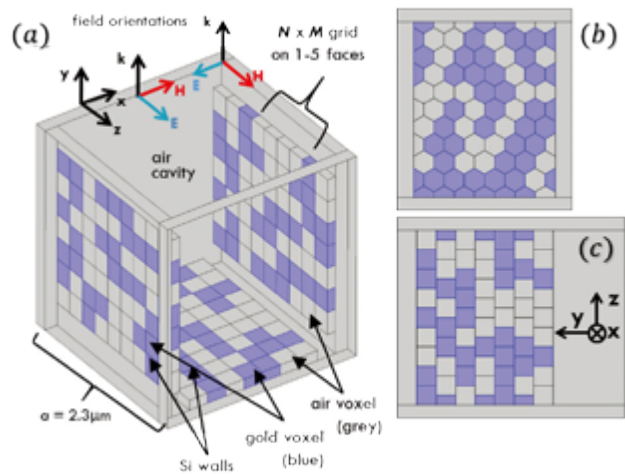


图 1. 可用于遗传算法的样本体素和腔体几何形状。图注: field orientations - 场方向; $N \times M$ grid on 1-5 faces - 1-5 面上的 $N \times M$ 栅格; Si walls - 硅壁; gold voxel (blue) - 黄金体素 (蓝色); air voxel (grey) - 空气体素 (灰色); air cavity - 气腔

“由于问题具有的非线性和大范围参数空间,我们无法使用其他方法进行优化,它们要么计算量过大,要么无法找到全局最小值。在这种背景下,遗传算法可以顺利完成任务。”

—— BRYAN ADOMANIS, 空军技术学院

应的主要驱动因素。因此,通过优化该三维像素(体素)栅格的几何形状,就可以找到具有较高前向散射和最小后向散射的最佳设计。

设计这种天线的挑战在于设计空间太大:体素可以是黄金,也可以是空气,而且天线的

几何构型存在多种可能,因此很难确定最佳设计方案。即便是分辨率最低的设计,也可以生成 240 种不同的模型(图 1)。图中的黄金和空气体素(立方体)分别用蓝色和灰色表示。COMSOL 多物理场仿真软件使用遗传算法(Genetic

Algorithm)程序,可以在大约 2000~4000 个模型中找到最佳解决方案或体素排列。另外,几何图形与性能(透射率和相位)之间没有可识别的相关性,因此无法建立最小化的函数。综合上述原因分析,建立 COMSOL 模型可以有效求解这些高度非解析模型。

本质上,这种像素化栅格天线是散射单元,其中的壁可以根据需要填充电介质和金属。在从近一万亿(10^{12})种可能的构型中为基于金属纳米颗粒的天线选择最佳几何形状时,一种借鉴了进化生物学现象、

受自然选择启发的程序就是我们要找的答案。

⇒ 遗传算法程序

“由于问题的非线性和大范围的参数空间,我们无法使用其他优化方法进行求解——它们要么计算量过大,要么无法找到全局最小值。在这种背景下,遗传算法可以顺利完成任务。”Adomanis 解释道。

在遗传算法(图 2)中,单个设计参数可视作基因存在于一组设计参数当中。每一组设计参数都表示一种专有设计,或者可以被视为个体,所有的单独设计构成一个种群。通过对种群中每个个体的

适应度进行评价,可以得到该个体成为下一代个体父体的可能性。

Adomanis 在遗传算法的实现过程中,用表示不同体素排列或天线设计的个体对种群进行初始化。他使用 MATLAB® 创建种群,为每组专有的参数生成二进制描述(或“掩码”),并引入遗传算法程序;然后将其提供给 COMSOL 模型。

“我们基于模型中每个独立单元的结果组成了一个功能正常的全尺寸模拟镜头,因此我们对自己的设计充满信心。”

—— BRYAN ADOMANIS, 空军技术学院

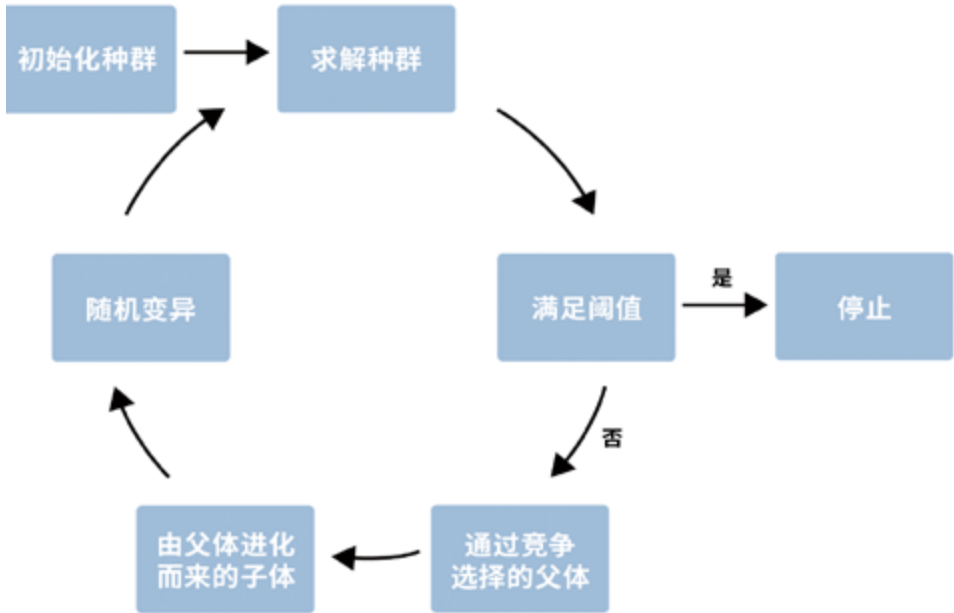


图 2. 遗传算法求解步骤。

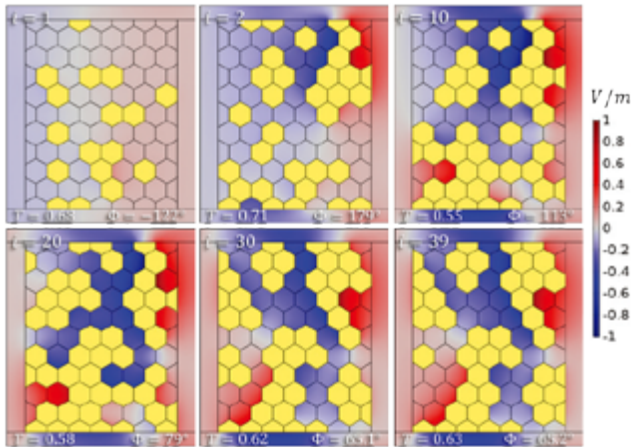


图 3. 仿真结果显示了在光学天线优化的中间步骤中产生的磁场(按 V/m 归一化)。随着拓扑结构的形成,强磁模式也随之形成。

随后,他利用多物理场仿真评价了单一个体对特定设计或是种群对一组专有设计的适应度。当结果满足表示所需分散程度的适应度阈值时,说明该个体适合进入下一次进化。在计算种群中的个体或群体对专有模型的适应度之后,系统会从程序

中删除不满足阈值的个体。下一代模型(或称“子体”)会由满足适应度阈值的专有模型填充而成,并通过“交叉”(在此过程中,由两个二进制表示组成的子字符串在子体中相互连接)和“变异”(在此过程中,二进制字符串的位被交换)实现进

化。Adomanis 通过 COMSOL 多物理场仿真软件的附加产品 LiveLink™ for MATLAB® 将 MATLAB® 与 COMSOL 多物理场仿真软件集成起来。

⇒ 收敛于最优设计

为了确定光学天线超表面的最佳拓扑结构, Adomanis 需要在保持幅值的同时, 优化总场透射率在给定方向的相位延迟。电磁建模功能可以帮助他实现这一点。借助此功能, 他可以设置遗传算法程序, 尝试多组不同的体素配置并计算产生的电磁辐射, 而无需深入研究复杂的物理现象。图 3 显示了天线的各个优化阶段产生的磁场。

随着遗传算法程序不断评价每一代个体, 选择父体, 填充子代, 然后评价子代的个体, 如此循环反复, 最终使种群趋向最佳设计(图 4)。一个参数空间有大约一万亿种可能的的设计, 相比之下, COMSOL® 软件使用遗传算法程序, 能够基于几千个模型生成最优设计。

借助该程序, Adomanis 可以在各种相位值下使透射率达到最大。经过不超过 30 代的进化选择, 种群的特定设计便开始符合他所设定的性能标准(图 5)。

通过在多目标解空间中将性能可视化, Adomanis 可以根据对特定应用最重要的准则

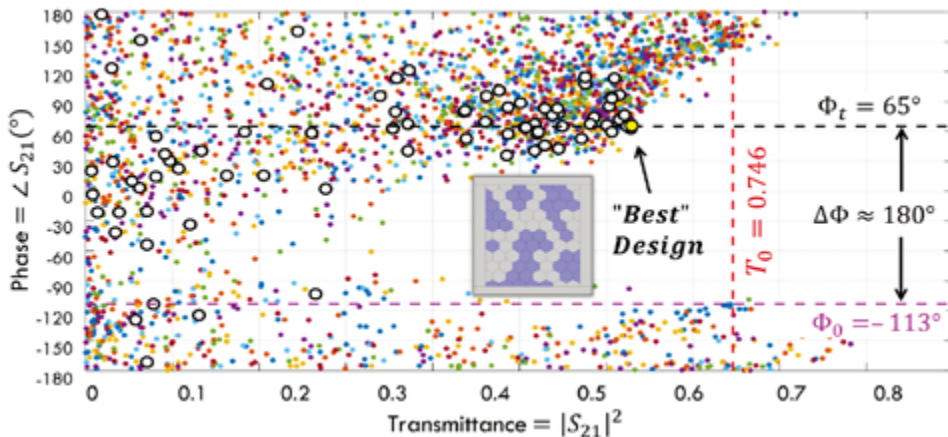


图 4. 透射率或散射参数 $|S_{21}|^2$ 与相位的关系图。每一代采用不同的颜色。图注: Best Design - 最佳设计; Phase - 相位; Transmittance - 透射率

来选择设计。在一种设计中, 他可能会优先考虑最大透射率, 而在另一种设计中, 他可能希望优先考虑相位延时精度。

Adomanis 能够成功地基于像素化栅格生成共存的电偶极子和磁偶极子, 该栅格仅在正向产生总场, 几乎没有反向散射。通过将遗传算法程序与电磁仿真相结合, 他可以生成一个在整个 2π 相空间中起作用的光学天线。图 5 显示了这样一个例子。“在这项工作中, 我们第一次使用三维遗传算法来优化像素化栅格天线的拓扑结构”Adomanis 评论道。

⇒ 先进设计变成现实

在 Adomanis 使用遗传算法程序确定最佳设计之后, 他又迎来下一个挑战: 基于优化设计创建真实原型。然而, 由于光学天线的最小特征尺寸约为 100 纳米, 为此需要专门开发一种新的加工工艺才能实

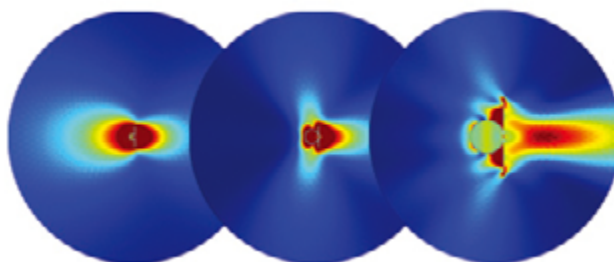


图 5. 对光学散射体 (称为 Ω 粒子) 几何结构进行遗传算法优化, 目的是设计一个散射体, 使其从左到右分别达到最大前向散射和最小后向散射。

现这一概念。

为实现这一目标, Adomanis 正与美国桑迪亚国家实验室 (Sandia National Laboratory) 一个能印刷天线的研究小组展开合作。他只需要为该研究小组提供优化后的像素化栅格(该栅格在他的仿真中产生了最佳正散射)。“我们基于模型中每个独立单元的结果组成了一个功能正常的全尺寸模拟镜头, 因此我们对自己的设计充满信心。”Adomanis 总结道, “能够使用 COMSOL 计算天线的性能给我们带来了极大的便利。如此一来, 我们就可以专注于实施遗传算法程序来优化设计, 而无需把精力耗费在对任意阵列的体素进行电磁计算上。”



Bryan Adomanis, 空军技术学院