信息论光谱学：消光流形的普适稀疏性与跨散射机制的最优传感

*Proity Nayeeb Akbar**

美国康涅狄格州米德尔敦市教堂街*265*号，卫斯理大学物理系，邮编*06459-0155*

*电子邮箱：*pakbar@wesleyan.edu*

摘要

从光学消光效率（Q_{ext}）对材料属性进行逆重建，受到米氏散射光谱高维特性的制约。我们证明，Q_{ext} 流形具有一种内禀的、由物理规律支配的稀疏性，且该稀疏性在介电材料中具有普适性。通过分析多样化聚合物库的光谱拓扑，我们在米氏跃迁起始处（$r \approx 0.1\ \mu m$）识别出一个关键信息瓶颈，此处光谱熵的峰值标志着信号可压缩性的根本极限。虽然快速傅里叶变换（FFT）通常用于光谱分析，但我们表明它在该领域存在物理上的不匹配；其周期边界假设会引发频谱泄漏，从而迫使所需基组大幅扩张，才能分辨精细尺度的米氏波纹。相反，离散余弦变换（DCT）契合消光剖面的非周期几何，揭示了 Q_{ext} 的固有可压缩性：使用少于10个谐波模态即可捕获超过90%的信号能量。即便在米氏瓶颈处，在99%能量阈值下，DCT相对于FFT仍保持$12\times$压缩优势。值得注意的是，尽管在固定能量阈值下两种基都收敛到相同的误差下限，DCT却以显著更低的硬件开销实现这一保真度；在信息瓶颈处，前10个DCT 模态捕获了~37%的信号能量，而FFT仅为~19%。在10%加性高斯噪声下的压力测试证实，这一特征信息瓶颈在空间和结构上均保持不变，证明该复杂度峰值是消光流形的基本物理常数，而非数值伪影。通过将这种稀疏性映射到压缩感知架构，我们使用介于22个传感器（瑞利/几何光学区域）与170个传感器（临界米氏跃迁）之间的配置，解析了$2.5-20\ \mu m$ 光谱范围，从而使硬件复杂度降低$51\%-94\%$，并突破了高保真临床与遥感应用的传统奈奎斯特采样极限（350个传感器）。

引言

光学消光效率（Q_{ext}）从根本上编码了光与颗粒介质之间的复杂相互作用，是散射与吸收光谱学中的核心可观测量 [1, 2]。传统上，人们通过物理参数进行分析，例如共振

模态、折射率和尺寸参数 [1, 2]——然而，Q_{ext} 背后的信息论结构在很大程度上仍未得到探索。对这一信息进行量化的探索可追溯至 Spänkuch [3], ，他定性地指出了消光测量中的“敏感区域”，在这些区域中，关于粒子尺寸的信息量达到最大。然而，对于这些区域为何存在，始终缺乏严谨的定量解释。这一认知空白引出了现代光谱学中的一个关键问题：Q_{ext} 光谱中的信息密度存在怎样的基本极限？这种复杂性又如何随着不同介电介质而变化？

我们证明，这种标度问题的答案在于米氏跃迁开始时出现的一种普适信息瓶颈（$r \approx 0.1\ \mu m$）。在光谱熵达到峰值时，从瑞利幂律标度向复杂干涉图样的转变达到其结构复杂度的最大值 [4]。本研究将信息瓶颈定义为一个临界坐标，在此处，压缩感知所需的稀疏性假设受到最严峻的考验 [5, 6,7]。

这一瓶颈代表了表征材料光学响应所需的最大有效自由度数 [8, 9]。传统的自由度数量估算往往忽略材料对比度的影响，而近期分析表明，在非线性逆问题中，自由度与散射体的介电性能存在内在联系 [10]。有趣的是，我们先前的研究表明，仅凭单一 Q_{ext} 光谱，就能以近乎完美的准确度解卷积模型生物细胞和由7种组分构成的聚合物混合物 [11, 12, 13, 14]。尽管对高维混合物进行这样的高保真重建似乎超越了预期的信息论极限，但通过考虑这种依赖于对比度的维数，我们揭示了该 Q_{ext} 流形具有内在的低维性。与结构可逆性理论一致 [15], ，我们证明，系统的“有效维数”与米氏跃迁处可用的自由度相匹配，从而为这类违反直觉的逆重建的成功提供了数学依据。

在这一机制下，数学基底的选择不仅是优化问题，更是确保物理完整性的前提 [16]。不可压缩的表示会导致信息不可逆地丢失，加剧逆问题的不适定性 [13, 14, 11, 12] ，并引发妨碍建模的数值不稳定性 [17, 18, 19]。与数据驱动模型（如主成分分析（PCA）[20] 或正交分解（POD）[21], ）不同，后者需要大量训练，且缺乏封闭形式的物理解释；小波 [22] 则擅长处理局部不连续点，而 Q_{ext} 剖面需要一种能够解析全局谐波振荡且不引入伪影的基。我们表明，传统快速傅里叶变换（FFT） [23] 在物理上并不适用于此任务；其周期边界假设会引发频谱泄漏 [24] ，因而需要大幅扩充基组才能解析精细的米氏波纹。标准加窗技术 [25, 26] 或参数方法 [27] 可以减轻频率识别中的泄漏，但对于信号重建仍非最优，因为它们要么会抑制边界处具有物理意义的振荡，要么需要对底层模型作出先验假设。尽管实验研究人员已成功使用基于快速傅里叶变换的压缩感知来加速纳米傅里叶变换红外成像 [5], ，我们发现，这些欠采样

策略还可以通过采用与消光剖面的非周期几何结构相匹配的基进一步优化。

相反，我们证明离散余弦变换（DCT）[28, 29] 通过反映消光剖面的非周期几何，为这一信息瓶颈提供了物理上一致的解决方案。我们发现离散余弦变换基能更高效地刻画米氏跃迁流形，这与计算机视觉的最新进展相一致，即直接在离散余弦变换域中进行目标检测以提高速度[30]。通过消除边界诱导伪影，离散余弦变换揭示了Q_{ext} 流形的固有稀疏性。我们发现，即使在米氏跃迁瓶颈处，离散余弦变换相对于快速傅里叶变换仍保持12倍的效率优势，能以显著更少的模态捕获99%的信号能量。具体而言，前10个DCT 模态捕获~ 37%的信号能量，几乎是快速傅里叶变换所捕获的~ 19%的两倍。这为逆问题提供了一种自然正则化：通过将信号能量集中到低阶离散余弦变换系数中，我们无需处理由傅里叶泄漏引入的数百个虚假高频项。

关键在于，谱基的效用不仅由其在理想条件下的稀疏性界定，还由其在实验随机性下的稳定性界定。我们对所提出的框架进行了严格的敏感性分析，证明即使在10%加性高斯噪声下，离散余弦变换的能量压缩优势依然得以保持。重要的是，我们发现米氏跃迁处的特征性信息瓶颈在噪声条件下仍保持空间与结构不变，从而确认它是消光流形的基本拓扑特征，而非对噪声敏感的伪影。这种韧性证实，离散余弦变换系数与米氏流形的真实物理信号相一致，而快速傅里叶变换对高频泄漏模态的依赖使其从根本上对噪声极度敏感。这种稳健性确保，从理论建模向现实世界硬件的过渡——其中噪声底是持续存在的约束——不会损害重建保真度。

最后，我们将这些见解转化为一项软硬件协同设计原则。通过将离散余弦变换的稀疏性映射到由测量矩阵[6], 的条件数导出的压缩感知架构，我们解析了$2.5 - 20\ \mu m$ 光谱范围，从而仅用少至22个传感器（瑞利/几何光学区域）至170个传感器（临界米氏跃迁），即可捕获95%的谱能量。与传统奈奎斯特采样仪器（~ 350 个传感器）相比，硬件复杂度降低了$51\% - 94\%$，这确立了离散余弦变换作为绕过信息瓶颈的最优分析框架，从而赋能用于实时材料表征[31] 、遥感[32] 与临床细胞学[33]的下一代智能传感器。

方法

信息论　　理论框架：流形稀疏性与米氏瓶颈

这一方法的基本前提是，Q_{ext} 光谱并非由任意数据点构成，而是一个结构化流形，其复杂度由光与物质相互作用的底层物理规律所决定。我们假设，该流形位于一个低维

子空间中，其基数受米氏跃迁起始时普适信息瓶颈的限制。

通过识别这一瓶颈，我们将高分辨率米氏模拟的一次性计算成本，转化为实验和计算复杂度的永久降低。该框架（示意图见**图1**）通过一套集成流程，将物理散射区间映射到最优传感配置：

1. 执行一次高分辨率米氏模拟，以生成Q_{ext}光谱（$N_{high}^{(\lambda)}$ ≈620 个点）。这建立了光谱真实值，并可据此计算光谱熵，从而确定米氏跃迁处的结构复杂度峰值（$r \approx 0.1\ \mu m$）。2. 对高分辨率数据应用离散余弦变换。与周期性变换不同，离散余弦变换的偶对称边界条件与 Q_{ext} 的非周期性相吻合，使信号能量集中于数量最少的低阶模式（M）。此步骤可从频谱泄漏造成的“基底膨胀”中分离出具有物理意义的信息。3. 为满足预设的能量保留阈值（例如 99%）所需的主导模态最优数量 M （其中 $M \ll N_{high}^{(\lambda)}$）随散射区而变化，并在信息瓶颈处达到最大值。这些模态定义了消光流形的降阶子空间。4. 仅使用 M 个主导离散余弦变换系数重建 Q_{ext} 光谱。由此可从一个稀疏的 M 元素向量生成连续的 $N_{high}^{(\lambda)}$ 点光谱曲线，为逆向迭代建立计算上更简单的正向模型。5. 最后，利用离散余弦变换已确立的稀疏性来设计亚奈奎斯特实验配置。通过分析传感矩阵，我们确定 P （$P \geq 2M$）个离散物理波长，它们能够最大程度地表征 M 个离散余弦变换模态。这样，未来的实验仅通过 P 稀疏测量就能解析完整的光谱特征，从根本上避免对高分辨率光谱仪的需求。6. 本质上，高分辨率模拟充当预测性查找表，为构建计算高效的逆模型和实验上精简的测量配置提供依据。

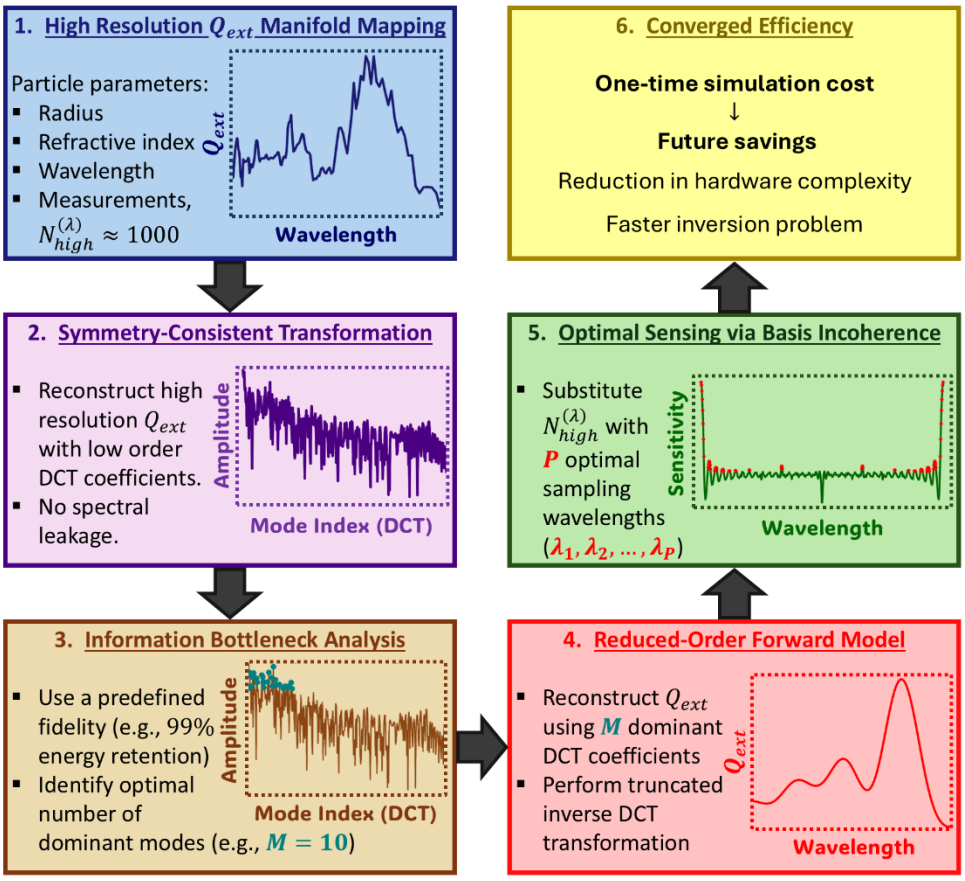

图1：信息论光谱学的概念框架。该六阶段集成工作流程利用消光流形的固有稀疏性，将高分辨率物理洞见转化为实验硬件优化。**（1）高分辨率Q_{ext}流形映射：**对光谱真实值（$N_{high}^{(\lambda)} \approx 620$）进行初始表征，以确定基线信号复杂度。**（2）对称性一致变换：**应用离散余弦变换，将非周期的Q_{ext}光谱曲线映射到频域，从而最大限度地减少基底膨胀和频谱泄漏。**（3）信息瓶颈分析：**量化达到目标保真度阈值（例如，99%能量保留）所需的光谱熵和主导模态数量（M），以确定信号可压缩性随工作区间变化的极限。**（4）降阶正向模型：**对M主导系数进行逆变换，生成连续光谱曲线，为逆建模提供计算轻量的引擎。**（5）基于基非相干性的最优传感：**确定能够最大化信息增益的P离散采样波长（λ_1，λ_2，……，λ_P），从而实现亚奈奎斯特光谱重建。**（6）收敛效率：**最终框架可持续降低硬件复杂度和采集时间，使材料表征能够以信息密度的理论极限实时进行。

前向模型仿真和该Q_{ext}流形库

为探究光谱稀疏性的普适性，我们为六种均质有机聚合物构建了全面的消光效率（Q_{ext}）曲线库：聚甲基

甲基丙烯酸酯（PMMA）、聚碳酸酯（PC）、聚二甲基硅氧烷（PDMS）、聚醚酰亚胺（PEI）、聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）和聚苯乙烯（PS）。这些材料经过策略性筛选，能够代表多种复杂的介电函数，涵盖不同的折射率色散和化学骨架 [34, 35, 36, 37, 38, 39]。这种多样性确保所识别的信息论约束源自基础散射物理，而非材料特异性吸收特征。

使用 *PyMieScatt* 软件包 [40]，通过米氏理论模拟微球在中红外波段（$\lambda \approx 2.5 - 25\ \mu m$）的光谱。为系统地描绘信息瓶颈的演变，我们对广泛的形态参数空间进行采样，粒子半径范围从 $r = 0.01\ \mu m$ 到 $25\ \mu m$。我们将光谱流形作为无量纲尺寸参数 $x = 2\pi r/\lambda$ 的函数进行分析。尽管内部共振结构在物理上由相移参数 $\rho = x\tilde{n}$ 决定（其中 $\tilde{n}$ 为复折射率），但使用与材料无关的 x，使我们能够展示信息瓶颈在整个聚合物库中的普适性。

这一宽广的半径范围刻画了穿越三个不同物理区的过渡：**1)**瑞利区（$x \ll 1$），其中光谱由平滑的低熵幂律标度主导；**2)**米氏过渡区（$x \approx 1$），它是关键信息瓶颈的所在，其特征为复杂的干涉图样和峰值光谱熵；以及**3)**几何光学区（$x \gg 1$），其中信号收敛于稳定的高频极限。通过利用高分辨率复折射率数据，所得的 Q_{ext} 流形包含真实特征，包括尖锐的分子振动和宽广的散射包络，为离散余弦变换基的稳定性与稀疏性提供了严格的试验平台。

光谱信号调理与正交变换

为确保对消光流形进行标准化分析，模拟的 Q_{ext} 光谱被插值到包含 $N = 620$ 个点的均匀波长网格上。在变换之前，去除了信号均值，以便将米氏共振的振荡特征与直流偏置分离，从而使分析聚焦于散射轮廓的结构复杂度。

我们使用两种不同的正交基评估了消光流形的可压缩性：离散余弦变换（DCT）和快速傅里叶变换（FFT）。这一比较是我们假设的核心：傅里叶分析中的周期性假设与非周期性光谱在物理上并不相符。为检验能否通过标准信号处理技术缓解这种不一致，我们分别评估了原始形式的 FFT，以及结合汉宁窗 [41] 的 FFT。

关键的是，我们提出假设：尽管加窗在频率识别中能有效抑制频谱泄漏，但从本质上说，它会破坏 Q_{ext} 重建。消光光谱的边界值包含有关散射极限的重要物理信息，因此汉宁窗的渐缩效应会削弱有意义的振荡，可能损害逆建模的完整性。相比之下，离散余弦变换（DCT）的偶对称边界条件提供了天然一致的基，无需人工加窗即可保留边界信息。

这些变换使用*SciPy*软件包[41], 执行，并采用标准正交归一化，以确保空间域与变换域之间的能量守恒：

$$\boldsymbol{F}^{(DCT)} = \boldsymbol{G}^{(DCT)}\{Q_{ext} - \bar{Q}_{ext}\}, \quad (1)$$

$$\boldsymbol{F}^{(FFT)} = \boldsymbol{G}^{(FFT)}\{Q_{ext} - \bar{Q}_{ext}\}, \quad (2)$$

其中，$\boldsymbol{G}^{(DCT)}$和$\boldsymbol{G}^{(FFT)}$分别表示相应的变换算子，$\bar{Q}_{ext}$ 表示信号均值。通过将消光流形投影到这些谐波子空间中，我们可以从基依赖能量压缩的角度定量定义信息瓶颈。

量化信息瓶颈：光谱熵

为识别消光流形中的关键信息瓶颈，我们利用光谱熵（$\boldsymbol{H}$）作为衡量信号结构复杂度的定量指标。在此背景下，$\boldsymbol{H}$ 表示信号能量在变换模态中的统计分布；较低的熵值表示信号的信息高度集中（稀疏），而较高的熵值则意味着能量由于内在物理复杂性或基组引入的伪影（频谱泄漏）而分散在整个基组中。

光谱熵的计算方法是将香农熵定义 [42] 应用于变换系数（$\boldsymbol{F}_m$）的归一化功率分布（$\boldsymbol{P}_m^{(norm)}$）：

$$\boldsymbol{P}_m^{(norm)}(\lambda) = \frac{|\boldsymbol{F}_m(\lambda)|^2}{\sum_{n=1}^{N}|\boldsymbol{F}_n(\lambda)|^2}, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{H} = -\sum_{m=1}^{N} \boldsymbol{P}_m^{(norm)} \log_2\left(\boldsymbol{P}_m^{(norm)}\right), \quad (4)$$

其中，$\boldsymbol{P}_m^{(norm)}$、$\boldsymbol{F}_m$和 $\boldsymbol{H}$ 分别表示归一化功率分数、m阶模态的变换系数和光谱熵，m的取值范围从1到N，即模态总数（$N = 620$）。此处，$\boldsymbol{F}_m$ 表示 DCT 或 FFT 系数，即 $\boldsymbol{F}_m^{(DCT)}$ 或 $\boldsymbol{F}_m^{(FFT)}$，具体取决于所使用的变换。

通过映射 $\boldsymbol{H}$ 整个粒子半径范围（$0.01 - 25\ \mu m$），我们可以确定结构复杂度达到全局最大值的米氏跃迁瓶颈。该指标使我们能够比较散射流形固有的“物理熵”与快速傅里叶变换的周期边界失配引入的“伪熵”。

流形压缩与保真度缩放

为评估消光流形的可压缩性以及谐波基的效率，我们采用了两种互补的截断策略。这些方法旨在刻画实现物理表征所需的最小自由度，以及硬件约束下信息衰减的速率。

累积能量阈值化（稀疏度指标）

该方法通过确定表征物理过程所需的基函数绝对最小数量，识别 Q_{ext} 信号的内在基数。对于离散余弦变换和快速傅里叶变换，我们计算了每个系数的归一化功率，按幅值降序排列，并对其进行累积求和。

我们确定了达到总谱能量的 90%、95% 和 99% 严格保真度阈值所需的最少模态数量（$m_{required}$）（$m_{90\%}$、$m_{95\%}$ 和 $m_{99\%}$）。将 $m_{required}$ 视为依赖于区间的变量后，我们便能定量描绘米氏跃迁处的信息瓶颈如何迫使所需基组扩展。该指标确立了实现科学准确的逆模型所需自由度的理论界限。

顺序模态截断（固定模态预算）

虽然阈值处理确立了理论极限，但顺序截断评估了在固定计算或硬件预算下，某一基的实际效用。我们评估了能量压缩（$\boldsymbol{E}_M$）——即所捕获的总能量百分比——在限制为预先确定数量的主导模态 M（具体为 $M = 5 - 100$）时的表现。

该方法回答了一个关键的工程问题：在硬件预算有限的情况下，哪一种基能够最大限度地保留信息？此外，这种固定预算方法为计算各种误差指标提供了基础，使我们能够建立可用感知模态数量与重建误差衰减之间的关系模型。

流形重建

为验证压缩表示的完整性，我们通过对截断后的系数组应用逆变换（$\boldsymbol{G}^{-1}$）进行了重建测试：

$\hat{Q}_{ext} = \boldsymbol{G}^{-1}\{\boldsymbol{F}_{truncated}\} + \bar{Q}_{ext}$，所得信号 $\hat{Q}_{ext}$ 表示压缩后的消光效率。通过将 $\hat{Q}_{ext}$ (5) 与不同散射机制下的真实米氏模拟进行比较，我们可以分离出快速傅里叶变换中的频谱泄漏所引入的局部误差，以及离散余弦变换所提供的物理一致性重建。

定量性能指标

为了严格评估压缩后 Q_{ext} 流形的保真度和结构稳定性，我们定义了能量压缩和重建误差的指标。这些指标量化了每个基解析构成信息瓶颈的高频米氏共振的效果。

能量压缩（$\boldsymbol{E}_M$）

总谱能量（$\boldsymbol{E}$）定义为所有变换后系数的功率之和。根据帕塞瓦尔–普朗歇尔定理 [23]，该能量在物理域（Q_{ext}）与变换域（$\boldsymbol{P}_m$）之间守恒。我们将能量压缩（$\boldsymbol{E}_M$）定义为前 M 个连续模态中保留的总谱能量百分比：

$$\boldsymbol{E} = \sum_{m=1}^{N} \boldsymbol{P}_m, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{E}_M = \frac{\sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{P}_m}{\boldsymbol{E}} \times 100\%, \tag{7}$$

这衡量了一个基将物理信息集中到低维子空间中的能力。在 M 固定时，较高的 $\boldsymbol{E}_M$ 表明实际效率更高，且表示在物理上更加一致。

全局与局部保真度指标

虽然能量保留是稀疏性的一个指标，但逆模型的质量取决于重建误差的分布。我们采用三种不同的指标来评估压缩信号（$\hat{Q}_{ext}^{(DCT)}$和 $\hat{Q}_{ext}^{(FFT)}$）的保真度：**1)** 均方根误差（RMSE）、**2)** 最大绝对误差（E_{max}）以及 **3)** 局部均方根误差（LRMSE）。

均方根误差（*RMSE*）

均方根误差（RMSE）提供了一个全局指标，用于衡量整个 $2.5-20\ \mu m$ 范围内的平均重建保真度。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(Q_{ext,i} - \hat{Q}_{ext,i}\right)^2}, \tag{8}$$

最大绝对误差（E_{max}）

最大绝对误差（E_{max}）用于识别最坏情况偏差。较高的 E_{max} 值通常意味着存在非物理伪影，例如不连续点附近出现吉布斯现象振铃[43]，；当周期基（快速傅里叶变换）试图解析消光光谱的非周期边界时，便会产生这种现象。

$$MAE = \max_i \left|Q_{ext,i} - \hat{Q}_{ext,i}\right|, \tag{9}$$

局部均方根误差（*LRMSE*）

局部均方根误差（LRMSE）是一种专用指标，用于量化高曲率米氏共振峰内的重建精度。由于这些尖锐特征编码了粒子的尺寸参数，保留它们对于稳健的逆建模至关重要。我们采用峰值检测算法 [41] ，并使用相对突出度阈值，捕获最大信号高度的2%，以分离显著的物理共振。针对每个检测到的峰值，定义一个局部光谱窗口。LRMSE 是仅在这些高复杂度区域内计算的均方根误差的平均值，可揭示在过渡区中哪种基能更好地保留米氏流形的精细结构。

应用：通过基非相干性实现最优硬件协同设计

Q_{ext} 流形在离散余弦变换域中的固有稀疏性，为从降阶建模转向实验压缩感知（CS）奠定了数学基础。通过确定解析主导M 模态所需的最小物理波长集合（P），我们可以从根本上降低硬件复杂度和采集时间。

传感矩阵与非相干原理

在压缩感知（CS）框架中，目标是根据稀疏测量向量 Y 重建高分辨率光谱 Q_{ext}；其中，Y 是通过稀疏测量矩阵 Φ 对完整信号 Q_{ext} 进行采样得到的：

$$Y = \Phi Q_{ext}, \tag{10}$$

鉴于 Q_{ext} 在离散余弦变换域中具有稀疏性（$Q_{ext} = \Psi C$，其中 Ψ 为逆离散余弦变换算子，C 为稀疏系数向量），重建问题可表述为：

$$Y = (\Phi\Psi)C = \Theta C, \tag{11}$$

矩阵 $\Theta = \Phi\Psi$ 为传感矩阵。要稳定且鲁棒地重建系数向量 C，测量基（Φ）必须与稀疏基（Ψ）不相干。这确保主导离散余弦变换模态中包含的信息能够分散到采样的物理波长上，从而满足限制等距性质（RIP）[6]。

基于灵敏度的传感器布置启发式方法

为了优化传感器布置，同时避免为每种可能的配置验证 RIP 条件所需的高昂计算成本，我们开发了一种基于灵敏度的启发式方法，用于识别信息量最大的采样点：

1. 降维子空间投影：我们确定能够捕获 99% 谱能量的主导离散余弦变换模态的 M 个索引。通过提取逆离散余弦变换矩阵中相应的列，构造降维基矩阵 Ψ_M。

2. 信息灵敏度评分：我们为每个候选物理波长 λ_i 定义一个灵敏度得分（S）。该得分量化主导模态对该特定坐标处测量结果的累积影响。较高的 S 表示该波长在解析信号中信息密集的成分方面具有最大作用：

$$S(\lambda_i) = \sum_{m=1}^{M} |\Psi_M(i, m)|, \tag{12}$$

3. 最优传感器选择：与最高灵敏度得分对应的 P 物理波长将被选为最优的非均匀采样点，用于实验采集。

通过针对这些高灵敏度区域，我们确保将有限的硬件预算（即 P个传感器）分配到信息瓶颈最明显的特定光谱坐标，从而仅需传统奈奎斯特要求的数据量的一小部分，即可实现高保真重建。

结果与讨论

光谱表征与信息密度

我们首先验证框架的数值完整性。**图2**（以及**图S1–S6**）证实，在保留完整基组时，离散余弦变换和快速傅里叶变换均能对六种聚合物库的Q_{ext} 光谱实现完美重建。这一基准结果确认了两种变换在数学上的完备性，并表明后续稀疏恢复中的任何变化都直接源于能量压缩效率，而非变换引入的误差。

随着粒子半径（r）增大并超出瑞利极限（$r \geq 0.1\ \mu m$），光谱会从平滑、吸收主导的包络转变为共振主导的轮廓。$r \approx 0.1\ \mu m$ 附近精细尺度波纹结构的出现，从根本上改变了信号的物理维度。

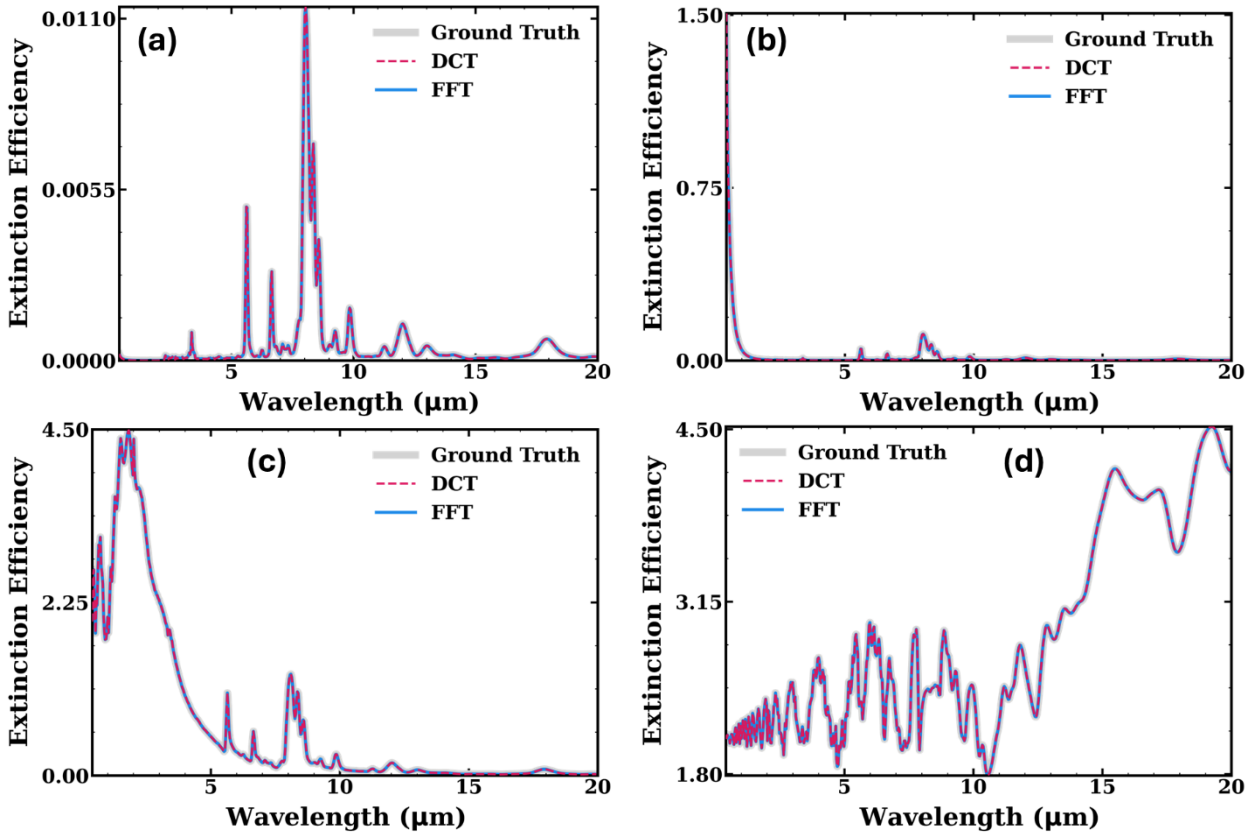

图2：离散余弦变换与快速傅里叶变换基之间的重建保真度比较。针对不同尺寸参数下的PC微球，将重建光谱与真实插值 Q_{ext} 进行验证：**（a）** $r = 0。01\,\mu m$，**（b）** $r = 0。1\,\mu m$，**（c）** $r = 1。0\,\mu m$，以及**（d）** $r = 10。0\,\mu m$。在不进行系数截断的情况下，离散余弦变换与快速傅里叶变换这两种变换均与真实信号保持完美的数值吻合。该基线证实了两种基的数学完备性，从而表明稀疏恢复性能的任何后续差异（如**图4**所示）都是能量压缩效率的直接结果，而非变换引入的误差。

图 3 和**S7-S12**中的光谱能量分布展示了光谱在不同散射机制下的演变：低阶模式（$M \leq 50$）以线性尺度显示，以突出主要特征；全谱则以半对数尺度显示，以呈现高频分量的衰减。在瑞利区，能量集中于一组极少的前导系数中，光谱响应的整体振幅较低（10^{-5} 至 10^{-2}）。然而，进入米氏过渡区后，光谱振幅显著增大（10^{-3} 至10^{1}），内场和外场之间的干涉会产生复杂的共振结构，使能量重新分布到更宽的光谱范围内。达到压缩阈值（例如，99%能量）所需的确切模式数虽与材料相关，但光谱包络的复杂度始终随尺寸参数增大，直至进入几何散射区域；在此区域，振幅最终趋于平稳或逐渐减小（10^{-3} 至 10^{1}），精细尺度的共振特征也随之转变为更加稳定、缓慢变化的消光效率。

为量化这种能量重新分布，我们采用幂律参考$1/m^{\beta}$。在调和分析中，衰减率β 与信号平滑性相关：衰减率为$\beta = 2$ 意味着信号连续，但存在斜率突变（例如，高Q 共振）；而更快的衰减（$\beta > 2$）则表明可微性和谱平滑性更高。我们观察到，对于所有聚合物，小球体均表现出快速衰减（$\beta > 2$），反映出瑞利包络高度可压缩且平滑的特性。相反，在$r \geq 0.1\ \mu m$ 处，尖锐的、由干涉驱动的米氏共振开始出现，在光谱数据中形成拐角和陡峭梯度，使衰减趋近于m^{-2} 极限。随着r 增加，光谱中的能量分布趋于平坦——衰减斜率变缓便是其体现——这是因为能量扩散到了与这些细尺度振荡相对应的高频分量中。

与快速傅里叶变换（FFT）的系数相比，离散余弦变换（DCT）的系数衰减更快，这直观地证实了其更优的能量压缩能力，且这一优势在所有散射机制中均成立（见**图 S7–S12**）。FFT 光谱呈现持续的高频底噪，这是由非周期边界条件导致频谱泄漏的直接表现；而 DCT 则能有效地将物理信息集中到一个稀疏的低维模态子集中。这种更快的衰减率凸显了 DCT 能够以显著更少的自由度表示消光流形，同时不损失形态细节。

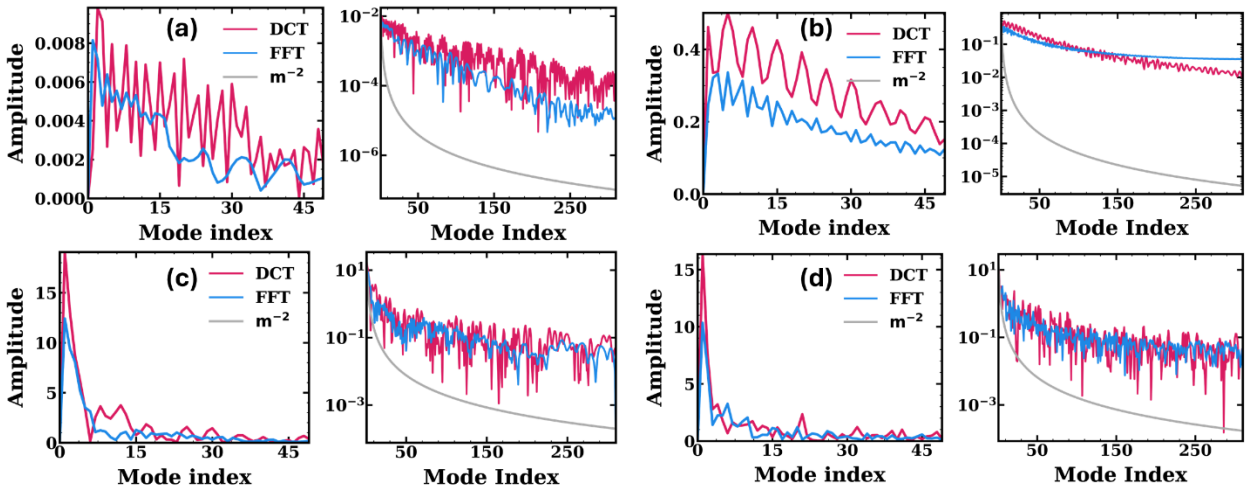

图3：谱能量分布与能量压缩。比较不同代表性 PC 微球半径下离散余弦变换和快速傅里叶变换基的振幅谱：**(a)** $r = 0。01\ \mu m$，**(b)**$r = 0。1\ \mu m$，**(c)** $r = 1。0\ \mu m$，以及**(d)** $r = 10。0\ \mu m$。**(左侧面板)：**在线性尺度上显示前50个谐波模态，表明离散余弦变换将绝大部分信号能量集中在最低阶系数中。**(右侧面板)：**以半对数表示展示完整光谱范围，说明离散余弦变换和快速傅里叶变换的系数相较于 m^{-2} 极限的衰减情况，该极限对应于具有尖锐不连续性的连续信号。

我们信息论分析的核心内容如**图4**所示，其中描绘了PC微球在瑞利、米氏和几何散射区中的归一化谱熵（$\boldsymbol{H}$）和稀疏性要求。尽管该库包含六种不同的有机聚合物，但由于PC具有脂肪族-芳香族结构复杂度，我们将其作为具有代表性的电介质。其余五种聚合物的完整结果证实了我们框架的材料无关性，详见补充信息中的

图 S13 和**表 S1-S6**。

对于所有材料，$\boldsymbol{H}$ 峰值均出现在米氏过渡区（$r \approx 0。1\ \mu m$），表明此处的结构复杂度达到全局最大值（**图 4a**）。这就是信息瓶颈——消光流形在此处需要最多自由度才能表示。值得注意的是，两种变换的熵表现出现了分歧。**1)**离散余弦变换的熵始终较低，能量压缩效果也更优。某些聚合物在瑞利区出现的熵上升，实际上是一种数值伪影：此时物理信号（10^{-5} 至 10^{-2}）接近噪声底，因而必须纳入随机噪声模态。随着物理信号在米氏区增强，离散余弦变换的压缩优势便逐渐显现。**2)** 快速傅里叶变换的熵较高，这是由"频谱泄漏贡献"造成的（**图 4a**），源于周期延拓无法协调物理消光数据的非周期边界。

值得注意的是，我们发现，标准的汉宁窗处理——通常用于解决泄漏问题——反而不利于 Q_{ext} 重建（**图 S14**）。尽管加窗能抑制变换域中的泄漏伪影，但逆过程恢复出的只是物理信号的"加窗"版本。若要通过除以窗函数来恢复原始 Q_{ext} ，则会在窗函数趋近于零的边界处引发严重的数值不稳定性。因此，离散余弦变换并非仅仅是数学上的偏好，而是保留边界编码的散射信息的物理必需。

我们的基准测试证实了三项主要结论：**1)**Q_{ext} 信号的频谱复杂度呈非单调变化，在米氏区起始处（$r \approx 0.1\ \mu m$）达到峰值，并在此后不久趋于稳定；**2)**无论具体聚合物如何，Q_{ext} 在离散余弦变换基中始终极为稀疏（因而可压缩）；以及**3)**离散余弦变换效率遵循U形曲线，对极小（$r < 0.1\ \mu m$）和极大（$r \geq 10\ \mu m$）粒子表现最佳，此时信号要么高度稀疏，要么具有系统性结构，而信息挑战则集中在关键过渡区（$r \approx 0.1\ \mu m$），即主要干涉极大值出现之处。

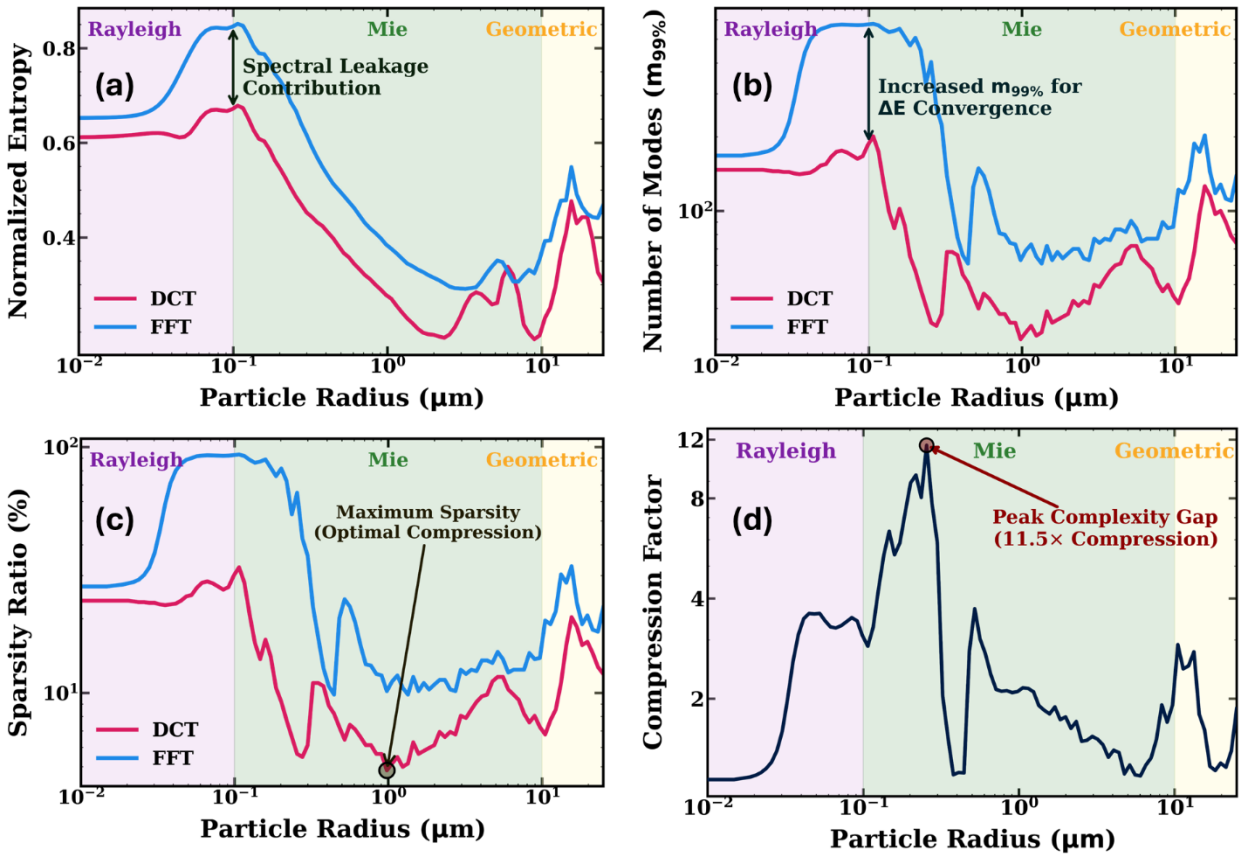

图4： 信息复杂度与光谱稀疏性：Q_{ext} 流形。对聚碳酸酯（PC）在瑞利、米氏和几何散射区（$r = 0.01$ 至 $25\ \mu m$）编码效率的综合分析。**(a) 光谱熵的演化。**归一化谱熵随粒子半径的变化，展示了从低熵瑞利区到米氏跃迁峰值复杂度（$r \approx 0.1\ \mu m$）的转变。离散余弦变换持续更低的熵曲线表明其具有更优的信息压缩能力。**(b) 稀疏性分析与模态需求。**保留累积谱能量99%所需的系数（$m_{99\%}$）数量。离散余弦变换始终优于快速傅里叶变换，尤其是在米氏跃迁（$r \approx 0.1\ \mu m$）处。注：$r \leq 0.03\ \mu m$ 所需模态的表观增加是一种数值伪影，由瑞利极限下极小的振幅（$\sim 10^{-5}$ 至 10^{-2}）引起，此时随机数值噪声主导累积和。**(c) 谱稀疏比。**达到99%能量阈值所需系数占总数的百分比。各变换的相对效率严格受底层散射区支配；信号可压缩性在信息瓶颈（$r \approx 0.1\ \mu m$）处达到全局最小值。离散余弦变换在整个流形上始终优于快速傅里叶变换，并在系统接近几何区（$r \approx 10\ \mu m$）时达到最大稀疏性与最优压缩，而快速傅里叶变换的周期性假设会导致模态冗余不断增加。**(d) 比较基压缩分析。**不同散射机制下，为实现99%能量捕获，快速傅里叶变换与离散余弦变换模式需求之比。该图表明，使用离散余弦变换可使表示维数显著降低（$\sim 12\times$），尤其是对于处于米氏共振尺寸范围起始处的粒子。

累积能量阈值截断下的性能

为量化消光流形的内在维数，我们确定了保留累积谱能量的90%、95%和99%所需的最少模态数（$m_{required}$）（**图4b**、**图S15-S20**以及**表S7-S12**）。理论上，$m_{required}$ 应随信号复杂度增加，并在米氏过渡区起始处达到全局最大值（$r \approx 0.1\ \mu m$）。PC、PDMS和PS等材料遵循这一趋势，而其他材料（如PMMA、PEI和PET）在瑞利极限下（$r < 0.1\ \mu m$）则表现出明显的稀疏性失效，此时$m_{required}$ 会被人为抬高。正如先前所述，这是数值噪声底造成的结果：当物理信号消失时，基于能量的阈值会迫使离散余弦变换聚合数百个随机噪声模态。

在米氏过渡区（$r \approx 0.1\ \mu m$），物理信号占主导而噪声较弱，离散余弦变换优越的能量压缩能力显而易见。例如，对于PC微球，在所有能量阈值下，离散余弦变换都能以显著少于快速傅里叶变换的模态（$m_{90\%} = 66, m_{95\%} = 94, m_{99\%} = 189$）捕捉复杂的共振（$m_{90\%} = 281, m_{95\%} = 418, m_{99\%} = 576$）。**图4c** 中的谱比（$\frac{m_{99\%}}{N} * 100\%$）（其余聚合物见**图S21**）进一步量化了这种效率，证实在规定的能量水平下，离散余弦变换每个系数所保持的信息密度更高。这些结果进一步确定了稀疏性最大的散射区域，它们代表材料Q_{ext} 信号的最佳压缩区间。重要的是，这些区域界定了系统的"信息论极限"：只需最少的一组光谱测量，即可重建完整的消光曲线。

这一瓶颈最有力的证据是模态压缩比（m_{FFT}/m_{DCT}），见**图4d**（其余五种聚合物见**图S22**）。对于处于99%能量阈值下的PC微球，该比值在瑞利区和几何光学区达到最低值；在这两个区间，信号要么本质上稀疏，要么表现出高频稳定性，快速傅里叶变换所需模态数分别仅比离散余弦变换多$\sim 2.2 \pm 1.1$倍和 $\sim 1.9 \pm 0.6$倍。相比之下，在米氏过渡区（$r \approx 0.1\ \mu m$），复杂度差距达到惊人的~ 11.5倍。在我们的六种聚合物库中，这种复杂度差距始终很大，平均增幅高达$\sim 12\times$。PC在瑞利区表现出的高压缩因子，部分是随机噪声底限造成的伪象——它迫使离散余弦变换聚合非物理噪声模态；而在米氏跃迁起始处，快速傅里叶变换所需模态数成倍增加，则直接源于该区间特有的非周期性、相互重叠的共振。在该区域，傅里叶基固有的频谱泄漏和边界伪影达到最大；相比之下，离散余弦变换的边界匹配对称性维持了较高效率。压缩差距的这种分化明确表明，瑞利–米氏过渡（$r \approx 0.1\ \mu m$）是信息论复杂度最高的点，此处的物理散射过程在数学上最难解析。

正如**表 S19**所总结的，这种效率优势并非固定不变，而是会随着保真度要求的提高而按比例扩大。过渡区的峰值比从 $\sim 4.6\times$（在90%能量时）扩大到 $\sim 12\times$（在99%能量时）。这一趋势揭示了基于傅里叶变换的光谱学中固有的精度—复杂度悖论：试图解析的物理细节越多，快速傅里叶变换（FFT）就越会以数学伪影将其掩盖。为了捕获最后1%的谱能量，FFT

必须汇集数量远超比例的高频模态，以补偿持续存在的边界泄漏。这一现象表明，FFT 在数学上正与自身的周期性约束相抗衡，累积能量曲线的渐近收敛也印证了这一点（**图 S23-S28**）。相比之下，DCT 的内在对称性只需极少的模态展开，就能解析这些精细的共振尾部，这表明随着光谱精度要求不断提高，DCT 正变得愈发不可或缺。

虽然信息瓶颈是所有已分析聚合物中普遍存在的特征，但其确切的形态坐标（r）在不同物种间略有差异，通常介于$0.15\ \mu m$ 至$0.35\ \mu m$ 之间（**表 S19**）。我们将这种差异归因于材料特定的复折射率（$\tilde{n} = \tilde{n}' + i\tilde{n}''$），它支配内部相移和共振阻尼。具体而言，实部（$\tilde{n}'$）决定光程和共振频率，而虚部（$\tilde{n}''$）调节干涉波纹的振幅。这种相互作用决定了峰值光谱复杂度确切的起始点，表明尽管信息瓶颈的存在是米氏散射普遍具有的几何性质，其确切位置仍受材料介电函数的调节。

此外，我们发现，观测到的信息瓶颈坐标与基的选择和能量保留阈值均相关。随着保真度要求从90%提高到99%，信息瓶颈会发生偏移并变得更加显著（**表 S19**）。这是因为较低的保真度阈值主要捕捉宽广的低频散射包络，而高保真度约束则迫使基解析过渡区特有的高频、由干涉驱动的共振。

因此，米氏流形的内在维数并非静态值，而是一种动态的、阈值相关的性质。有趣的是，随着保真度要求从90%提高到99%，瓶颈坐标呈现非线性变化——起初在较小半径处（$r \approx 0.15\ \mu m$）变得更尖锐，随后在99%阈值处转向较大半径（$r \approx 0.26\ \mu m$）。在最高能量保留水平下出现的这种回升，揭示了复杂度的层级性：尽管主要散射包络在跃迁早期就达到最大无序程度，但只有在99%阈值下才能分辨出的精细米氏波纹，仍会随着粒子尺寸增大而不断累积结构复杂度。这表明，最坏情况复杂度不仅会在高保真度约束下显现，而且在物理上局限于米氏跃迁的特定子区域，在该区域中干涉效应发展得最为充分。

尽管存在这些微小的数值偏移，但复杂度峰值在离散余弦变换和快速傅里叶变换两种框架中的空间位置一致，且在噪声影响下保持不变，这证实了该瓶颈是米氏流形的一种基本物理性质，而非数学伪影。我们采用离散余弦变换导出的峰值作为参考坐标，因为其更优的能量压缩能够最清晰地展现流形的内在维数。系统研究这一瓶颈坐标与中红外波段积分折射率之间的相关性，或可进一步完善面向未来仪器设计的光谱稀疏性预测映射。

图5展示了采用99%能量阈值对 PC 的 Q_{ext} 进行稀疏重建的结果。若要全面查看在全部三种能量阈值（90%、

95%和99%）下的这些重建结果，以及完整的六种聚合物库，请参阅**图 S29–S46**。总体而言，这些结果量化了模态压缩与形态保真度之间的基本权衡，并表明即使在高压缩比下，离散余弦变换基仍能保持出色的结构精度。正如预期，随着能量阈值从90%提高到99%，Q_{ext} 重建质量稳步提升。在90%和95%的情况下，显著的数据压缩是以牺牲高频细节为代价实现的。值得注意的是，尽管较低的阈值会导致精细尺度条纹和次级振荡丢失，但 Q_{ext} 曲线的整体形状和幅值仍得以保留。这表明，主共振峰包含在变换能量谱最初的几个百分点中，而振荡波纹结构则构成了低能量谱尾。

重建保真度对粒子半径表现出强烈的依赖性。在瑞利区（$r < 0.1\ \mu m$），平滑的Q_{ext} 曲线使重建几乎可以达到完美。即使能量阈值为90%（**图 S41–S46**），主要峰和大多数小尺度振荡也都能得到准确捕捉。然而，随着尺寸增大，重建质量逐渐下降。较大的半径会使 Q_{ext} 信号呈现高度振荡的行为。由于这些振荡分布在更宽的频率范围内，固定的能量阈值必然会舍弃更多条纹细节，导致复杂的米氏效率因子被平滑近似。这种重建行为的变化表明，误差并非均匀分布于参数空间。我们发现，尽管重建保真度随能量保留阈值（90% $-$ 99%）呈现可预测的变化，但误差形态 ——无论表现为平滑近似还是高频伪影——根本上取决于物理散射区间，而非基的选择。

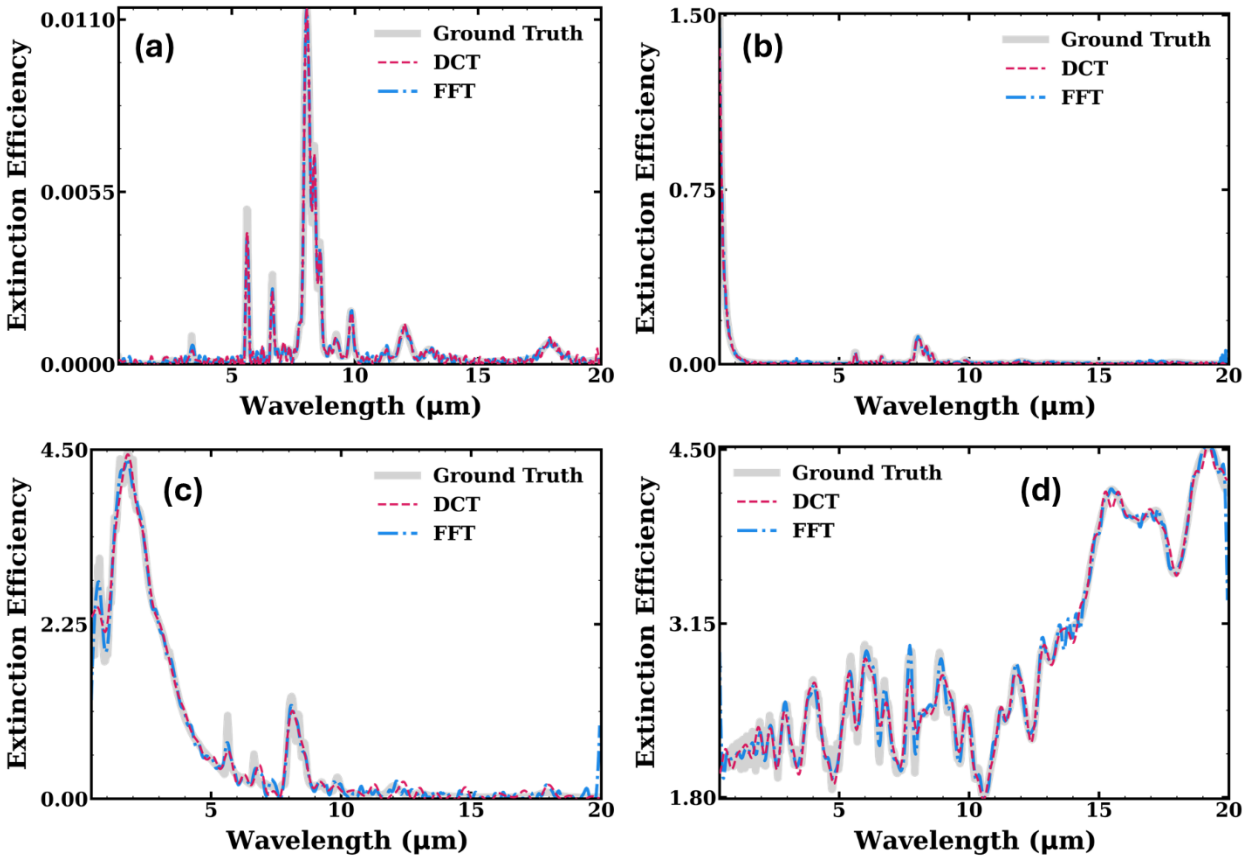

图5：在 99%能量阈值下的稀疏重建保真度。 使用与99%累积能量阈值相对应的离散余弦变换和快速傅里叶变换系数截断子集，对 Q_{ext} PC微球的轮廓进行比较重建。所示轮廓涵盖从瑞利散射到几何散射区的粒子半径：**(a)** $r = 0。01\ \mu m$、**(b)** $r = 0\ 1\ \mu m$ $r = 1\ 0\ \mu m$ $r = 10\ \mu m$ 。、**(c)** 。和**(d)** 。在固定能量阈值下，尽管两种基的重建保真度相近，离散余弦变换对消光流形的映射在计算上更高效。快速傅里叶变换需要更广泛的模态分布来补偿边界引起的频谱泄漏，而离散余弦变换则将信号的核心物理信息集中在更紧凑的系数子集中。这一可视化验证证实，离散余弦变换能够在高度压缩的模态子集中有效捕获消光流形的核心物理信息，为硬件受限的光谱应用提供了更精简的基。

我们的全面误差分析（**图6**和**图 S47–S64**）证实，米氏跃迁的起始点（$r \approx 0.1\ \mu m$）构成了复杂度瓶颈，其证据是所有指标（RMSE、E_{max}和LRMSE）上均出现显著的误差平台，此时高频共振波纹给截断基组带来了挑战。值得注意的是，虽然快速傅里叶变换有时在跃迁刚开始时会呈现较低的LRMSE，但这只有通过极端的过度参数化才能实现，即使用显著更大的基组来达到固定的能量阈值。例如，要在$r \approx 0.1\ \mu m$时达到$\sim 10^{-1}$ 的目标LRMSE，离散余弦变换所需的模态比快速傅里叶变换少$\sim 92\%$ 。此外，离散余弦变换的误差轨迹更为单调、稳定，因此能提供更可靠的“最坏情况”界限（E_{max}）。这表明，离散余弦变换对于高精度

应用场景，例如大气传感，必须尽量减小特定共振峰处的逐点偏差。

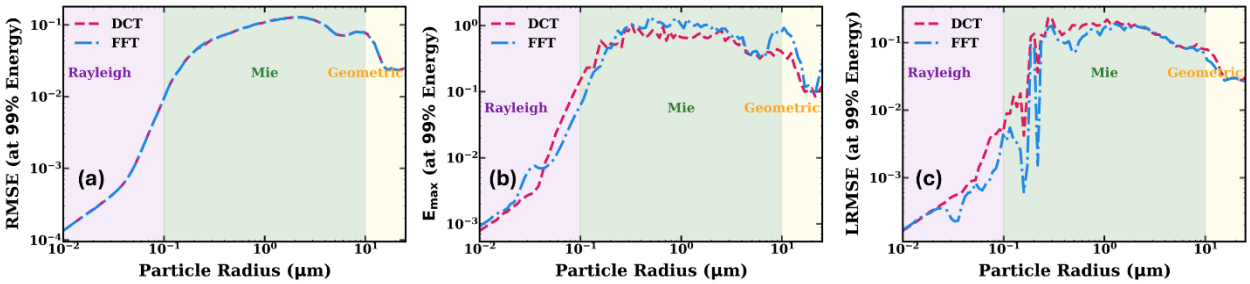

图6：PC微球在 99% 能量阈值下的重建误差分析。 (a) 全局均方根误差随粒子半径的变化，展示了离散余弦变换和快速傅里叶变换两种基的整体收敛稳定性。**(b) 最大绝对误差（E_{max}）**，凸显了通常出现在尖锐共振峰处的"最坏情况"逐点偏差。**(c) 局部均方根误差（LRMSE）**，刻画特定散射区内的局部误差变化。请注意，所有指标在米氏过渡区（$r \approx 0.1\,\mu m$）均出现显著的误差峰值，表明该区域的信息论复杂度最高，非周期共振振荡也最难以解析。

顺序模态截断下的性能（固定预算）

为独立于噪声底评估紧致效率，我们在固定模态预算 M 下进行了顺序截断。**图7**展示了前 $M = 5$、10和20个模态中捕获的能量占比（E_5、 E_{10}和E_{20}）。其余五种聚合物的补充数据及完整原始数据分别见**图S65–S69**和**表S13–S18**。两种变换的能量紧致性均呈现典型的"先降后升"趋势，在米氏跃迁开始处（$r \approx 0.1\,\mu m$）效率达到全局最低点。

这一工作区间体现了物理信息瓶颈：在此处，受限于 M 个模态的传感器所能捕获的总信号功率比例最低。然而，即使处于这一瓶颈，离散余弦变换仍具有显著优势。快速傅里叶变换将其信息预算分散到边界伪影中——本质上是将系数浪费在周期延拓产生的吉布斯类效应上；相比之下，离散余弦变换凭借更优的边界处理，将信号能量保留在一个最小的主导模态子集中。

一旦系统绕过信息瓶颈（$r \approx 0。1\,\mu m$），两种变换都显示出加速的能量收敛，趋近100%的上限。这对有效信噪比（SNR）具有深远影响，尤其是在可压缩性和噪声抑制方面。在跃迁后的几何区间中，两种基都能将$>$ 95%的谱能量集中在前 $M = 20$ 个模态内。因此，只需采用高度受限的积分带宽即可实现重建。通过舍弃高频系数——FFT 通常会因泄漏而显现噪声底——该框架最大限度地提高了单位传感器的信息量。

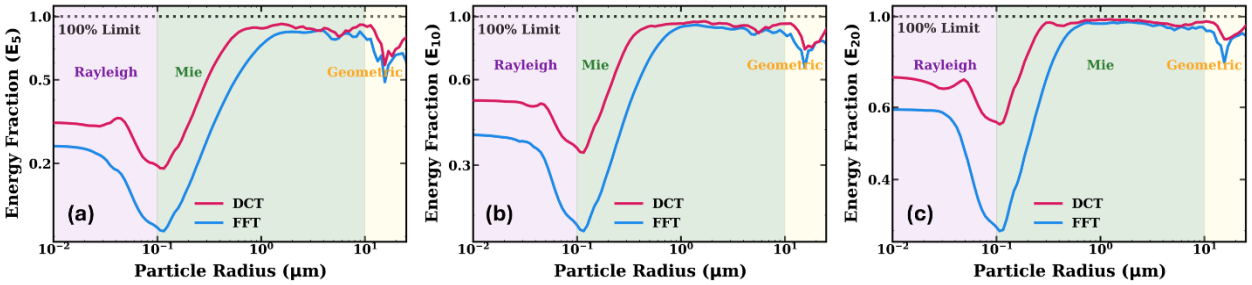

图7：谱能量集中的对比分析。 PC微球中前M 个模态所捕获的能量分数：**(a)** $M = 5$、**(b)** $M = 10$和**(c)** $M = 20$，针对全部粒子半径范围（$r = 0.01$至$25\ \mu m$）内经离散余弦变换和快速傅里叶变换近似的Q_{ext} 信号。这些图量化了消光流形的低秩稀疏性；离散余弦变换始终比快速傅里叶变换将更高比例的谱能量集中于更少的系数中，尤其是在米氏过渡区起始处（$r \approx 0.1\ \mu m$）。这种加速的能量收敛为使用极度稀疏的传感器阵列实现高保真重建提供了物理基础。

图 8中的四指标验证表明，DCT 的优势不仅体现在统计层面（均方根误差），更从根本上体现在结构层面（LRMSE 和E_{max}）。全局均方根误差随保留模态数量变化的趋势（M）提供了能量压缩的明确衡量标准（**图 8a** 和 **图 S70**），结果显示，DCT 始终比 FFT 具有更陡的收敛梯度和更低的误差下限。

除简单压缩之外，离散余弦变换还展现出更优的逐点重建精度，且该精度随模态数量呈非线性提升。在临界米氏跃迁处，这一性能差距达到顶峰：在仅截断 $M = 20$ 个模态的固定条件下，离散余弦变换的重建误差比快速傅里叶变换低近一个数量级。这一$6.9\times$ 倍的精度提升证实，离散余弦变换不仅是介电消光光谱的紧凑表示，更是用于解析精细结构振荡的物理共振基底。

值得注意的是，性能差距最大时出现在模态数较低（$M = 20$）的情况下，而非分辨率最高（$M = 100$）时。这揭示了一种高保真捷径：快速傅里叶变换最终虽能借助庞大的基组强行完成重建，但离散余弦变换能更迅速地捕捉米氏跃迁的关键物理特性。对于高通量临床细胞学或卫星遥感等实时应用，这种快速收敛可直接降低内存开销和延迟。

虽然均方根误差反映了全局能量损失，但最大绝对误差（E_{max}）和局部均方根误差（LRMSE）能够识别最严重的局部失效（**图8b**、 **8c**和**S71-S72**）。在固定模态预算下，离散余弦变换具有更低且更稳定的E_{max} 上限，尤其是在振荡区间，这相当于对陡峭共振梯度处的基函数进行压力测试。虽然快速傅里叶变换在某些孤立区域局部略占优势—可能是因为其复基底处理能够应对非结构化振荡，但随着粒子尺寸增大，离散余弦变换很快重新占据优势。这种局部稳定性对于保留米氏共振的形态精度至关重要；由于这些峰值是高置信度材料表征所需的光谱指纹，离散余弦变换能够确保诊断特征不会被平滑掉或因傅里叶伪影而丢失。

从**图8d**（以及**图S73**）可以看出一个关键发现：该图展示了均方根误差随保留能量分数的变化。在不同粒子尺寸（以颜色区分）下，对于较低的模态预算（M），离散余弦变换始终从更高的能量分数起步，表明其以更低的实验成本实现了更高的信息保留。这一趋势在米氏过渡区之外最为显著。几何区间的粒子具有最高的可压缩性，以最少的模态实现了最高的能量保留。此外，无论粒子尺寸如何，离散余弦变换都比快速傅里叶变换快得多地接近理论极限（100%能量保留）。

至关重要的是，**图8d**表明，仅凭能量保留不足以衡量重建质量。例如，在$r = 0。1\ \mu m$时，前10个 DCT 模态捕获了$\sim 37\%$的信号能量，而快速傅里叶变换仅捕获$\sim 19\%$。即使将两个基调整至保留相同的 能量分数，DCT 使用 更少的模态也能实现更高的保真度。这证明，DCT 累积的能量与信号的物理几何结构有着内在的紧密关联。快速傅里叶变换的能量会因频谱泄漏而被“稀释”；它必须累积高频项，仅仅为了抵消自身的周期性伪影，而这对特征重建毫无帮助。相比之下，DCT 的能量直接映射到底层物理形态，因此是低损耗表示米氏散射光谱不可或缺的基。

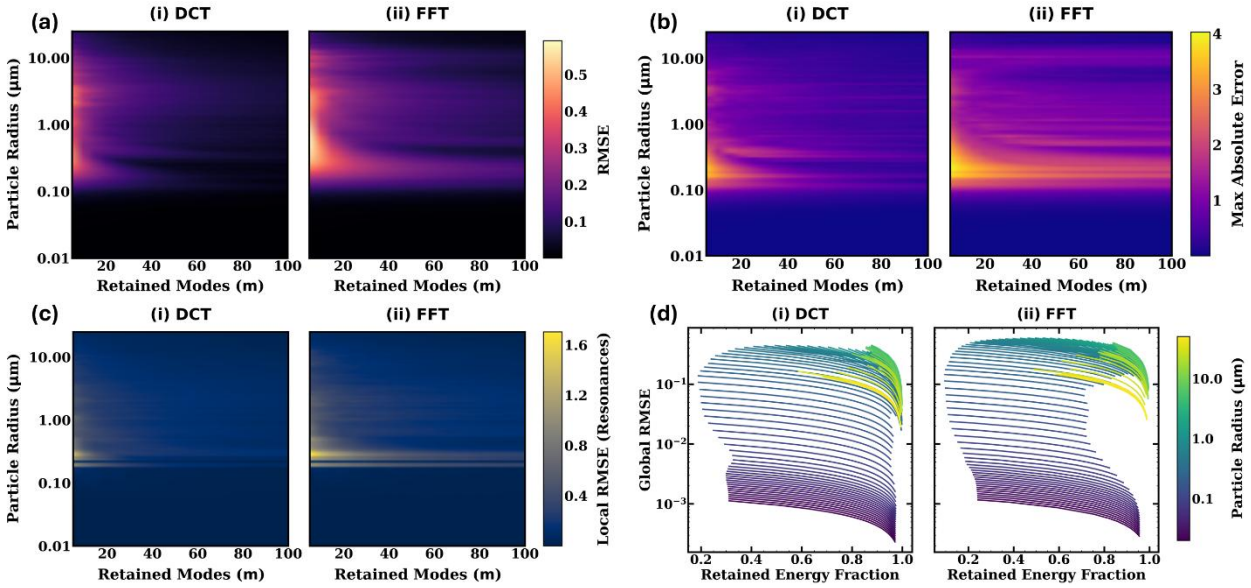

图 8：PC微球的多尺度误差分析与收敛基准测试。瑞利、米氏和几何散射区中离散余弦变换与快速傅里叶变换基的性能比较（$r = 0.01$ 至 $25\ \mu m$）。**(a) 重建误差的全局收敛。**均方根误差（RMSE）随保留模态数量（M）的变化。离散余弦变换展现出更高的收敛速率，在大多数截断级别下误差下限都低于快速傅里叶变换。在信息瓶颈处（$r \approx 0。1\ \mu m$），这一优势尤为明显：离散余弦变换对非周期特征的处理显著降低了所需的模态基数。**(b) 峰值误差与伪影抑制。**最大绝对误差（E_{max}）相对于 M 的变化。离散余弦变换能够持续抑制局部伪影（例如吉布斯现象），保持尖锐共振特征的结构完整性，并防止非物理光谱失真。**(c) 局部保真度（位于**

共振极大值。在主共振峰的谱邻域内计算的局部均方根误差（LRMSE）。通过分离这些高梯度特征，该图证实，DCT 能够解析尖锐的物理跃迁，而不会产生傅里叶截断近似所特有的谱模糊。**（d）误差-能量效率。**重构均方根误差随保留谱能量分数的变化。DCT 在相同能量水平下实现了更低的误差，表明其信息效率更高；而快速傅里叶变换的能量常因频谱泄漏而被"稀释"，DCT 的能量则直接映射到底层物理形态Q_{ext} 信号。

噪声敏感性与信息瓶颈的韧性

为评估逆变换框架的稳健性，我们对消光流形施加了 $1-10\%$ 加性高斯噪声。这项压力测试（**图 9** 和 **S74–S78**）是现实实验随机性的代表性模型，证明所识别的信息论约束并非脆弱的数值伪影，而是散射物理中持续存在的特征。

图 9a展示了球形粒子在半径为 $r = 1.0\ \mu m$ 时，其受噪声影响的 Q_{ext} 光谱的满秩重构（未进行系数截断）。保留全部系数后，这一基准比较能够隔离出变换基在随机扰动下的内在稳定性，确保观测到的误差归因于噪声传播，而非稀疏化造成的信息损失。

归一化熵热图（**图 9b**）直观呈现了各散射区的信息量。关键的是，即使噪声底升高，米氏跃迁处（$r \approx 0.1\ \mu m$）的信息瓶颈在空间和结构上仍保持不变。瑞利区由于信噪比极低而出现人为的熵峰值，几何区则呈现噪声诱发的无序，但瓶颈始终代表结构复杂度的全局最大值。这种不变性证实，瓶颈是米氏流形的一个基本拓扑特征；噪声不会改变最大复杂度的位置，只会加剧解析它的难度。此外，在所有半径和噪声水平下，离散余弦变换的熵始终低于快速傅里叶变换。随着噪声增大，这一差距会缩小，因为具有最大熵特性的高斯白噪声最终会压过散射信号中具有结构的谱系数。

在0%和10%噪声水平下，对全局均方根误差、最大绝对误差和局部均方根误差进行分析，展现了两种变换的稳健性（**图 9c**）。有趣的是，在某些条件下，10%噪声下的重建误差低于无噪声基线；这可能是因为低能量模态低于噪声底，有效滤除了高频抖动，并降低了重建信号的复杂度。虽然两种变换在整个半径扫描范围内的绝对误差幅度相近，但它们实现这一精度的内在效率存在根本差异。

尽管误差剖面相似（**图9c**），但满足99%能量阈值所需的模态预算，仍体现出离散余弦变换的持续优势（**图9d**）。快速傅里叶变换需要多得多的

模态才能捕获与离散余弦变换相同的信息，尤其是在米氏跃迁处。**图9e**中的压缩因子（m_{FFT}/m_{DCT}）对此进行了量化。

如**图9e**所示，离散余弦变换与米氏流形的高频振荡在结构上具有更好的匹配度；在99%能量阈值下，与快速傅里叶变换相比，其模式需求的效率优势达到 $12\times$ 。然而，随着噪声增加，压缩因子会降低，性能分布也变得更加均匀。这一趋势由两种相互竞争的机制驱动。首先，高斯噪声在频谱上是平坦的，会将能量分散到所有频率，迫使两种变换都为随机波动分配模态。其次，在高噪声水平下，全局噪声底会升至通常会严重影响快速傅里叶变换的边界误差之上。这会掩盖离散余弦变换在边界处理方面的优势，使信号看起来像一团无法压缩的高熵云。

比较10%噪声下的性能包络（**图9f**）可见，离散余弦变换仍保持着更高的效率上限。在模态预算固定时，加入噪声会降低保留的总能量，但在整个半径扫描范围内，离散余弦变换都比快速傅里叶变换更有效地将由此产生的误差降至最低。

这证实了离散余弦变换的能量压缩并非仅在“理想情况下”才有优势。相反，这表明离散余弦变换系数与米氏流形的真实物理信号相吻合，而快速傅里叶变换依赖高频泄漏模态，使其在本质上对噪声极其敏感。这种韧性确保了从理论建模过渡到现实世界硬件时——噪声底始终是一个限制因素——重建的结构完整性不会受到损害。

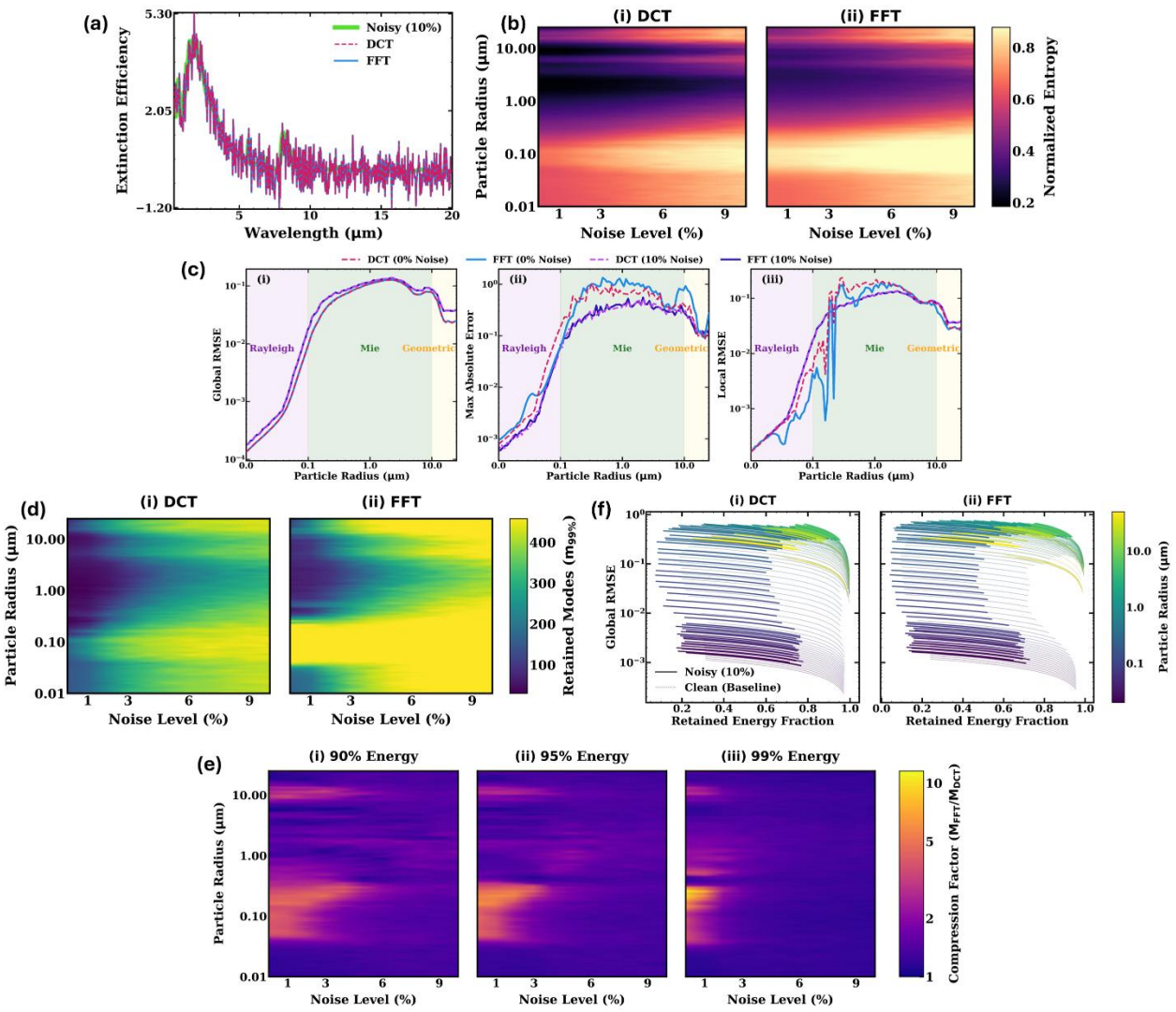

图 9：随机扰动下信息瓶颈的韧性与不变性。针对 PC 微球的全面噪声敏感性分析表明，无论实验噪声如何，结构复杂度峰值始终是 Q_{ext} 流形的基本拓扑特征。(a) **10**% 噪声下的满秩重构：对含噪声的 Q_{ext} 光谱（$r = 1.0\ \mu m$）进行重构，且不作截断。该基准验证了两种基的数值稳定性，并将噪声传播与稀疏化引起的误差区分开来。(b) 熵与信息不变性：归一化熵图显示了 (i) 离散余弦变换和 (ii) 快速傅里叶变换随噪声水平和半径的变化。关键在于，峰值复杂度——即信息瓶颈——始终固定在米氏跃迁处（$r \approx 0.1\ \mu m$），证明了其对噪声的不变性。尽管白噪声掩盖结构化信号，使熵间隙缩小，但瓶颈的位置仍是散射物理中的固定坐标。(c) 多指标误差分析：半径扫描展示了干净数据集（0%）和含噪数据集（10%）的 (i) 全局均方根误差、(ii) 最大绝对误差和 (iii) 局部均方根误差。噪声虽抬高了误差下限，但相对性能差距以及米氏跃迁处的典型误差平台在结构上仍保持一致。(d) 模态保留动态（$\boldsymbol{m_{99\%}}$）：热图显示 (i) 离散余弦变换和 (ii) 快速傅里叶变换达到 99% 能量保留所需的模态数量。快速傅里叶变换所需的模态基数显著更高

米氏过渡区（$r \approx 0。1\,\mu m$）中的（较亮区域）与离散余弦变换相比存在差异，而增加噪声不仅无法消除这种差异，反而会将其进一步放大。**（e）压缩效率（m_{FFT}/m_{DCT}）：**展示在**（i）** 90%、**（ii）** 95%和**（iii）**99%能量阈值下压缩优势的热图。离散余弦变换的效率优势在米氏跃迁（$r \approx 0。1\,\mu m$）中最具韧性；高噪声下该因素的收窄体现了结构化散射信号受到随机掩蔽。**（f）%噪声下的性能包络：**展示**（i）**离散余弦变换和**（ii）**快速傅里叶变换的全局均方根误差与保留能量分数之间的关系。实色线表示半径扫描过程中的含噪性能，而浅灰色虚线则建立了0%噪声基线底。即使在最大噪声下，离散余弦变换仍保持更优的性能包络。请注意米氏区（黄色/绿色）中的垂直位移和收敛截断：噪声底阻止了瑞利区（紫色）中所见的均方根误差大幅下降，从而进一步表明过渡区是信号可压缩性的最终极限。

硬件协同设计：最优传感器布置与重建稳定性

已识别的信息瓶颈的最终价值，在于能够从高分辨率计算模型过渡到"精简"的实验硬件。通过利用 Q_{ext} 流形在离散余弦变换域中的稀疏性，我们展示了一种最优传感器布置框架，既能显著降低硬件复杂度，又能保持高保真重建。

为将理论稀疏性转化为物理硬件，我们采用基于灵敏度的启发式方法，识别能够最大化信息增益的光谱坐标。该方法从离散余弦变换基矩阵中筛选出能量最集中的行，以表征介电信号类。如**图10a**所示，基于离散余弦变换得出的灵敏度得分，充当底层米氏散射物理的结构代理指标。该得分的峰值（深海军蓝实线）自然与以下区域对齐：

这些区域具有较高的信息密度，其定义依据是消光曲线（青绿色实线）的物理曲率（$|\frac{\partial^2 Q_{ext}}{\partial \lambda^2}|$）（橙色虚线）。由此形成梯度加权采样掩模，用于针对信号快速变化的区域。

不同于快速傅里叶变换（**图10a**中的灰色点线）所生成的非物理"条形码"式敏感度——它无法区分高曲率共振与冗余的平坦区域，离散余弦变换将传感器集中布置在光谱边界（~ 2。5 μm 和 20 μm）以及内部共振拐点处。这种双尺度采样在解析局部高梯度尖峰的同时锚定全局包络，使数据密度相比基于标准快速傅里叶变换的方法降低12倍。

所提出的框架建立了硬件复杂度的一个基本下限，我们将其定义为相对于典型高分辨率奈奎斯特基线（$N_{high}^{(\lambda)} = 350$）的下限。该基线对应于中红外波段内10 cm^{-1} 的标准光谱分辨率（2.5 –20 μm）——这是分辨有机介电聚合物中次级米氏共振所需的最低采样密度。尽管我们的内部模拟采用了更高密度的过采样网格（$N =$

620）以确保数值收敛，但硬件缩减效率是以这一$N_{high}^{(\lambda)} = 350$ 标准为基准进行评估的，从而反映实际的光谱测量要求。

为评估我们的压缩感知架构在最坏情况复杂度下的性能，我们将硬件配置锚定在 $r \approx 0.1\,\mu m$，即米氏跃迁瓶颈的代表性位置。尽管峰值复杂度坐标会随材料种类和保真度阈值略有变化，但该坐标为评估离散余弦变换以最少的传感器开销分辨关键干涉特征的能力提供了严格的基准。在这一区域，光谱熵达到峰值、信息密度最为分散，系统仅使用 $P = 170$ 个传感器，便可重建超过95%的谱能量，同时将硬件复杂度降低51.4%。对于处于瑞利区或几何区间的粒子，由于其信号流形本身较为稀疏，所需传感器数量还可进一步降至仅 $P = 22$个，硬件因此减少93.7%。通过在理论基数界（$P \approx 2M$）附近运行，该系统有效消除了传统光谱学固有的大量冗余，从而实现“精简型”传感架构，同时不牺牲形态精度。

为确保反问题的数值稳定性，我们分析了传感矩阵 ($\Theta = \Phi\Psi$) 相对于 l_2 范数 [9] 的条件数 (κ)。从物理意义上讲，κ 表示误差放大因子；较大的 κ 意味着轻微的探测器噪声就可能引发非物理振荡。

虽然初始配置（$P = 20$ 个传感器、 $M = 10$ 个模态）在物理上最适合锚定边界（**图10b**），但会导致系统病态（$\kappa \approx 10^3$）。通过进行全局稳定性扫描（**图10c**），我们发现稳定性平台位于 $M = 100$ 和$P = 204$。该配置保持了接近 2:1 的传感器-模式比，得到了相当稳定的$\kappa \approx 20.6$。这使抗噪性提高了两个数量级，确保即使在实验随机性显著的情况下，也能恢复米氏流形的高频波纹。如**图10d**所示，这种优化配置的传感矩阵呈现弥散能量分布，确保每个传感器都能提供最多的独立信息。

通过采用优化后的传感器（例如数据驱动基（SVD）），可以进一步提升其性能，实现更准确的重建。不过，使用固定的离散余弦变换基可确保传感器阵列与材料无关——无论样品是聚甲基丙烯酸甲酯、聚苯乙烯还是未知的有机聚合物，物理传感器位置都保持不变。这种不依赖具体物理机制的方法可避免机器学习模型中常见的过拟合，并为新一代稀疏、高性能红外光谱仪提供稳健、通用的模板。

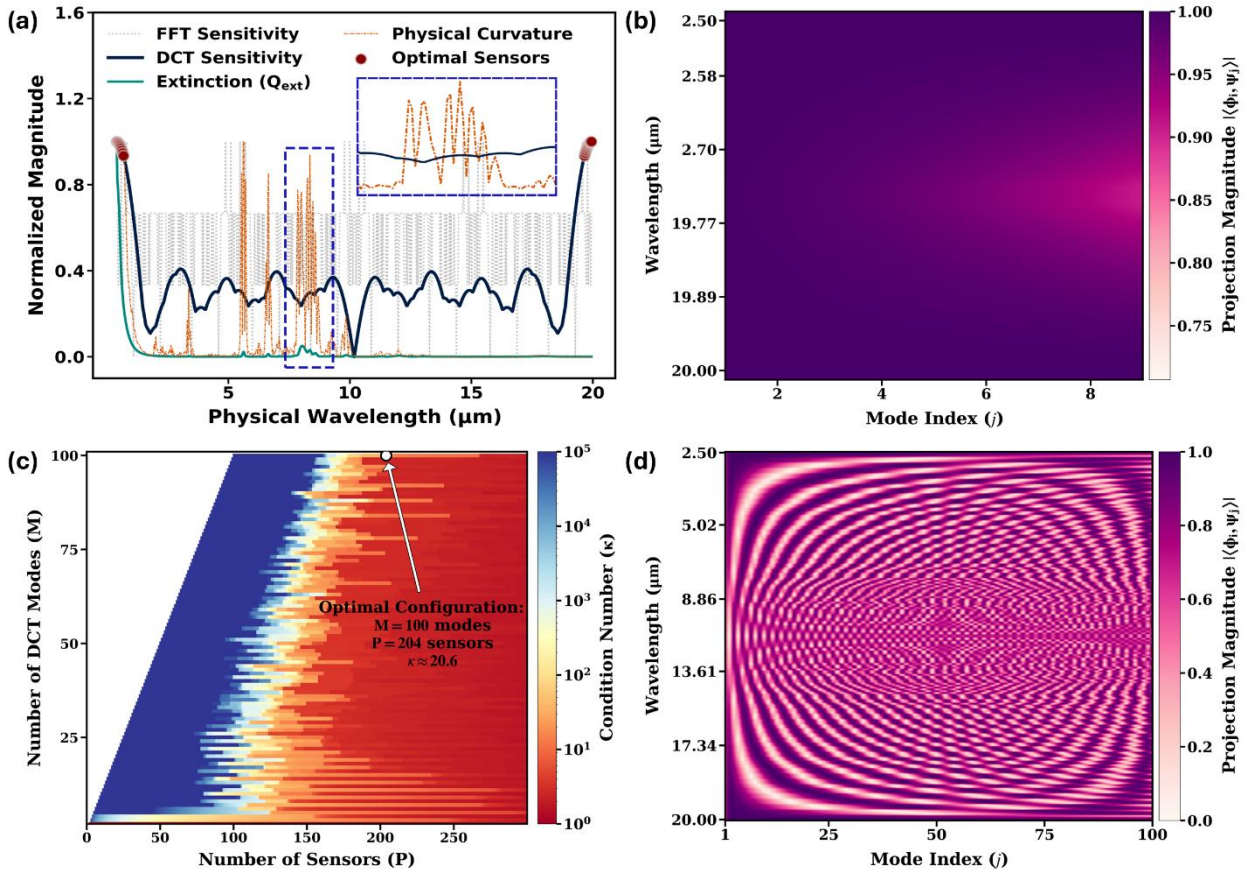

图10：用于光谱重建的最优稀疏传感配置与稳定性分析。(a) 多模态灵敏度与物理曲率：使用 $M = 10$ 个模态和 $P = 20$ 个传感器，对比离散余弦变换（深蓝色实线）与快速傅里叶变换（灰色虚线）的灵敏度得分。图中同时绘出了粒子半径为 $0.1\ \mu m$ 时的消光效率（Q_{ext}，青绿色实线）及其二阶导数（橙色虚线），后者表示物理曲率。传感器（红色标记）被最优地布置在离散余弦变换灵敏度曲线的拐点处，这些位置与物理曲率较高的区域相吻合，表明离散余弦变换可作为信息密度的结构代理指标。**插图：**高频曲率区域的放大图，展示了最优传感器位置与共振特征的吻合情况。由于传感器布置完全由离散余弦变换基的数学属性决定，因此该策略提供了一种普遍最优的采样模板，无需预先了解材料属性或粒子尺寸，即可捕获结构共振信息。**(b) 低阶传感矩阵投影：**用于 $P = 20$ 个传感器和 $M = 10$ 个模态配置的传感矩阵 Θ 的幅值（投影 $|\langle\phi_i, \psi_j\rangle|$）。热图展示了波长到模态的映射，并突出显示了光谱边界处较高的投影密度；这些边界用于锚定全局信号包络。**(c) 稳定性相变：**评估重建稳定性随离散余弦变换模态数（M）和传感器预算（P）的变化情况。颜色尺度表示条件数（κ），最优工作点位于 $M = 100$ 和 $P = 204$，对应的 $\kappa \approx 20.6$ 较为稳定。明显的颜色梯度表示数值不稳定（高 κ）与稳定（低 κ）重建状态之间的相变。**(d) 优化后的传感矩阵：**稳定配置（$M = 100, P = 204$）的完整投影幅值。跨越模态的弥散干涉图样——

波长空间展示了在整个$2.5 - 20\ \mu m$中红外范围内捕获的全面且不冗余的信息，有助于实现高保真度的光谱重建。

结论

本研究建立了一个严谨的信息论框架，用于量化介电聚合物中光学消光流形（Q_{ext}）的结构复杂度和内在维数。通过分析多种有机材料构成的资料库，我们证明，Q_{ext} 信号本质上是稀疏的，并受一种普适且依赖尺寸的复杂度曲线支配，该曲线不受特定分子化学性质的影响。由此，我们为胶体光学中一个已有50年历史的问题提供了数学答案： [3] 消光中信息丰富区域的性质；我们量化了这些区域的离散信息密度，并绘制出它们在消光流形上的普适坐标。

我们的研究结果表明，对于整个介电聚合物类别，光谱信息密度呈非单调变化。我们发现，在米氏过渡区的起始处存在一个普适的信息瓶颈（$r \approx 0.1\ \mu m$）。在这一区域，光谱熵和结构无序达到全局最大值，代表了光谱维数的基本物理极限。这个瓶颈界定了任何光谱系统的“最坏情况”要求：要分辨由干涉驱动的共振波纹，必须具备最多的自由度。尽管近期关于非线性逆散射的理论分析指出，自由度数量应随材料对比度增加，[10], 我们的结果表明，对于介电聚合物类别，信息瓶颈构成了复杂度的普适上限。值得注意的是，我们的敏感性分析证实，这一瓶颈在拓扑上是不变的：即使存在10%加性高斯噪声，这一复杂度峰值的位置和结构特征仍保持不变。这表明，该瓶颈是散射流形的基本物理常数，而非暂时的数值伪影。

至关重要的是，这种固有的低维性为长期以来难以解释的现象提供了答案：在复杂的聚合物混合物和模型生物细胞中，内部性质和几何结构能够近乎完美地重建 [13, 14, 11, 12]。从单一混合物轮廓中分辨出7个独立组分光谱，并非数值异常，而是流形结构可逆性的直接结果。由于信息被高效地编码在一组稀疏的主导模态中，即使化学复杂性很高，系统仍然是可观测的。

比较基准测试证明，DCT 是解析米氏流形的最优谐波基，这与近期压缩域目标检测领域的突破相呼应 [30]。尽管近期实验基准测试已经证实，压缩感知可以加速纳米傅里叶变换红外成像 [5], ，但我们的结果证明，标准傅里叶（FFT）方法由于固有的频谱泄漏，在数学上并非最优。通过与消光数据的非周期边界条件相协调，相较于文献中报告的基于 FFT 的基准结果，DCT 将所需维数减少了 12 倍，尤其是在解析过渡区的细粒度共振特征时更是如此。这有效规避了精度—复杂性悖论，使高保真重建成为可能，而

标准傅里叶技术却陷入收益递减和数学伪影并存的状态。

通过弥合波散射与信息论之间的鸿沟，我们将光谱学从冗余的基于启发式的采样方法转变为最优实验设计。我们证明，传统高分辨率光谱仪采集的数据中，有51%（在米氏跃迁处）至94%（在瑞利/几何光学区域内）是冗余的。通过针对框架所识别的信息丰富的坐标进行测量，我们确保重建误差受限于探测器的随机噪声底限，而非基底失配。

最终，离散余弦变换框架为新一代“轻薄型”光谱仪奠定了基础：这类仪器计算开销低、速度快，只需传统硬件开销的一小部分，便能解析最复杂的散射物理。这一范式转变对实时红外临床细胞学、远程大气传感以及低成本、高精度材料表征系统的开发具有深远意义。

作者贡献

P.A.构思了该项目，实现了计算方法，开展了所有模拟，完成了全部数据分析，并撰写了论文。

致谢

我谨向我的研究导师Reinhold Blümel教授致谢，感谢他允许我独立开展这一项目。我还要感谢Arunn Suntharalingam先生，他在研究讨论中提供了宝贵意见，对本项目的推进作出了重要贡献。

经费

本研究未获得任何外部经费资助。

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。

数据可用性

本研究使用的所有数据均取自免费公开的来源（如适用，请参阅相应参考文献）。计算框架依赖开源 Python 软件包 *PyMieScatt* 和 *SciPy*（请参阅论文中的相应参考文献），所有分析均可使用这些软件复现。论文的方法部分提供了逐步复现结果的详细说明。

参考文献

[1] C. F. Bohren 和 D. R. Huffman, 《小颗粒对光的吸收与散射》 s, 纽约：John Wiley & Sons，1998。[2] H. C. van de Hulst, 《小粒子对光的散射》，纽约州米尼奥拉：Dover Publications Inc，1981。[3] D. Spänkuch, 《用于确定散射粒子粒径分布的消光与散射光测量的信息量

s

》，*Applied Optics*

,

第11卷，第12期，1972年。[4] E. T. Jaynes, 《信息论与统计力学》，*Physical Review,* 第106卷，第620页，1957年。[5] B. Kästner、F. Schmähling、A. Hornemann、G. Ulrich、A. Hoehl、M. Kruskopf、K. Pierz、M. B. Raschke、G. Wübbeler和C. Elster, 《压缩感知 FTIR 光谱学与纳米成像》，*Optics Express,* 第26卷，第14期，第18115-18124页，2018年。[6] E. J. Candes和J. Romberg, 《压缩成像中的稀疏性与结构》，*IEEESignal Processing Magazine,* 第24卷，第2期，第105-113页，2007年。[7] S. L. Brunton和J. N. Kutz, 《稀疏性与压缩感知》，载于数据驱动科学与工程：机器学习、动力系统与控制，纽约，剑桥大学出版社，2019年，第84-114页。[8] S. Twomey, 《遥感与间接测量中反演数学导论》，阿姆斯特丹、纽约：Elsevier Science，1977年。[9] E. J. Candes和M. B. Wakin, 《压缩采样导论》，*IEEE Sign*

al

Processing Magazine，第25卷，第2期，第21–30页，2008年。[10] Z. Lin、R. Guo、T. Shan、M. Li、F. Yang、S. Xu 和 A. Abubakar, 《非线性逆散射问题中散射场自由度的分析》，*https://arxiv.org/abs/2212.08903v1*，2022年。[11] P. N. Akbar 和 R. Blümel, 《散射介质中聚合物混合物定量分析的红外光谱逆去卷积》，*Analytical Chemistry*，2025年。

[12] P. N. Akbar，《通过反演非线性介电混合规则对光学复合材料进行拓扑诊断》，*arXiv:2603.01380*，2026年。[13] Y. I. K. d. S. Hennadige、P. N. Akbar 和 R. Blümel，《空间分辨化学信息》，*Scientific Reports*，第13卷，第557页，2023年。[14] P. N. Akbar 和 R. Blümel，《模型细胞的逆重建：通过红外光谱细胞学提取结构与分子洞见》，*Plos One*，第20卷，第0320697页，2025年。[15] D. Kahl、P. Wendland、M. Neidhardt、A. Weber 和 M. Kschischo，《动态系统中误差与输入重建的结构可逆性及最优传感器节点布置》，*Physical Review X*，第9卷，第4期，第041046页，2019年。[16] C. P. Hansen，《秩亏与离散不适定问题：线性反演的数值方面》，费城：SIAM，1998年。[17] A.-I. N. Tikhonov 和 V. Y. Arsenin，《不适定问题的解》，华盛顿哥伦比亚特区：V. H. Winston & Sons，1977年。[18] M. Bertero 和 P. Boccacci，《成像逆问题导论》，博卡拉顿：CRC Press，1998年。[19] S. Twomey，《遥感中的信息量》，*Applied Optics*，第13卷，第4期，第942–5页，1974年。[20] I. T. &. C. J. Jolliffe，《主成分分析：综述与最新进展》，*Philosophical Transactions of the Royal Society A*，第374卷，第2065期，第20150202页，2016年。[21] J. L. Lumley，《非均匀湍流的结构》，*Annual Review of Fluid Mechanics*，第25卷，第1期，第539–575页，1967年。[22] S. G. Mallat，《多分辨率信号分解理论：小波表示》，*IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*，第11卷，第7期，第674–693页，1989年。[23] A. V. Oppenheim 和 R. W. Schafer，《数字信号处理》，纽约：Prentice-Hall，1975年。

[24] F. J. Harris, 《利用窗函数进行离散傅里叶变换调和分析》，*IEEE*会刊，第66卷，第1期，第51-83页，1978年。

[25] A. Nuttall, 《具有优异旁瓣特性的一些窗函数》，*IEEE*声学、语音与信号处理汇刊，第29卷，第1期，第84-91页，1981年。[26] S. M. Kay, 《现代谱估计：理论与应用》，恩格尔伍德克利夫斯：Prentice-Hall，1988年。

[27] H. Akaike, 《重新审视统计模型识别》，*IEEE*自动控制汇刊，第19卷，第6期，第716-723页，1974年。

[28] N. Ahmed、T. Natarajan 和 K. R. Rao, 《离散余弦变换》，*IEEE*计算机汇刊，第23卷，第1期，第90-93页，1974年。

[29] K. R. &. Y. P. Rao, 《离散余弦变换：算法、优势、应用》，学术出版社，2014。

[30] B. Deguerre、C. Chatelain 和 G. Gasso, 《离散余弦变换域中的目标检测：亮度是否是解决方案？》，*arXiv:2006.05732v3*。

[31] N. Vogel、S. Utech、G. T. England、T. Shirman、K. R. Phillips、N. Koay、I. B. Burgess、M. Kolle、D. A. Weitz 和 J. Aizenberg, 《层级结构产生的颜色：微米级球形胶体组装体的多样光学性质》，美国国家科学院院刊，第 112 卷，第 35 期，第 10845–10850 页，2015。

[32] O. Dubovik、M. Herman、A. Holdak、T. Lapyonok、D. Tanre、J. L. Deuze、F. Ducos、A. Sinyuk 和 A. Lopatin, 《用于从光谱多角度偏振卫星观测中增强气溶胶性质反演的统计优化反演算法》，大气测量技术，第 4 卷，第 6 期，第 975–1018 页，2011。

[33] R. Bhargava, 《红外光谱成像：新一代技术》，《应用光谱学》，第66 卷，第 10 期，第 1091–1120 页，2012 年。

[34] R. G. Kraus、E. D. Emmons、J. S. Thompson 和 A. M. Covington, 《高压下聚碳酸酯的红外吸收光谱》，聚合物科学杂志*B*辑：聚合物物理，第46卷，第7期，第734-742页，2008年。

[35] Z. Chen、J. N. Hay 和 M. J. Jenkins，《聚对苯二甲酸乙二醇酯结晶过程的傅里叶变换红外光谱分析》，《欧洲聚合物杂志》，第48卷，第9期，第1586-1610页，2012年。[36] S. Hamouni、O. Arous、D. Abdessemed、G. Nezzal 和 B. V. d. Bruggen，《采用渗透汽化工艺萃取醇和烷烃》，《大分子研讨会》，第386卷，第1期，2019年。[37] B. K. Chen、C. T. Su、M. C. Tseng 和 S. Y. Tsay，《制备具有改善的热学、力学和介电性能的聚醚酰亚胺纳米复合材料》，《聚合物通报》，第57卷，第6期，第671-681页，2006年。

[38] J. Fu、Y. Xu 和 Q. Li，《不同粒子尺寸聚苯乙烯微球的制备及聚苯乙烯胶体晶体的组装》，《中国科学：技术科学》，第 53 卷第 11 期，第 3088–3093 页，2010 年。

[39] S. Dirlikov 和 J. L. Koenig，《以氧-18 标记的聚甲基丙烯酸甲酯的红外光谱》，《应用光谱学》，第 33 卷第 6 期，第 551–555 页，1979 年。[40] J. D. D. Smith，《PyMieScatt：Python米氏散射软件包》，2017 年。[在线]。网址：https://github.com/bsmpg/PyMieScatt。

[41] P. Virtanen、R. Gommers、T. E. Oliphant、M. Haberland、T. Reddy、D. Cournapeau、E. Burovski、P. Peterson、W. Weckesser、J. Bright 和 S. J. a. o. {van der Walt}，《{SciPy} 1.0：{Python}科学计算基础算法》，《自然·方法》，第 17 卷第 3 期，第 261–272 页，2020 年。

[42] C. E. Shannon，《通信的数学理论》，《贝尔系统技术期刊》，第27卷，第3期，第379-423页，1948年。[43] A. V. Oppenheim 和 R. W. Schafer，《数字信号处理》，恩格尔伍德克利夫斯，新泽西州：Prentice-Hall，1975年。[44] X. Zhang、J. Qiu、J. Zhao、X. Li 和 L. Liu，《聚合物红外波段复折射率测量》，《定量光谱学与辐射传输杂志》，第252卷，107063页，2020年。[45] M. David、D. Disnan、A. Lardschneider、D. Wacht、H. Hoang、G. Ramer、H. Detz、B. Lendl、U. Schmid、G. Strasser 和 B. Hinkov，《为集成光子学应用开发的旋涂聚乙烯薄膜的结构和中红外光学性质》，《光学材料快报》，第12卷，第2168-2180页，2022年。