

基于蚁群算法的二维多层亚波长光栅结构设计

汤超龙¹, 赵永强^{1,2*}, 刘芯羽¹

(1. 西北工业大学 自动化学院, 陕西 西安 710129;
2. 西北工业大学 深圳研究院, 广东 深圳 518057)

摘要: 提出一种适用于长波红外波段的二维偏振无关亚波长光栅结构。利用对称二维结构消除一维光栅的偏振相关性, 增加光通量。提出光栅优化评价函数, 将光栅结构参数优化转化为路径寻优问题。最后利用蚁群算法求解最优光栅结构参数。仿真结果表明, 提出的二维多层结构在 10~13 μm 波段具有偏振无关、窄周期、窄带宽、低旁带的优点。提出的优化设计方法收敛速度快, 优化后的光谱曲线横电波 (TE) 和横磁波 (TM) 偏振方向透射率均达到 70%, 带宽 260 nm。

关键词: 二维多层光栅; 参量优化; 蚁群优化; 长波红外
中图分类号: O433 **文献标识码:** A

Structure design of two-dimensional multilayer subwavelength grating based on ant colony algorithm

TANG Chao-Long¹, ZHAO Yong-Qiang^{1,2*}, LIU Xin-Yu¹

(1. School of Automation, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China;
2. Research & Development Institute of Northwestern Polytechnical University, Shenzhen 518057, China)

Abstract: A two-dimensional polarization-independent subwavelength grating structure suitable for long wave infrared band have been proposed. Symmetric two-dimensional structure is used to eliminate polarization dependence of one-dimensional grating and increase luminous flux. The evaluation function of grating optimization was proposed, and then the optimization of grating structure parameters was transformed into a path optimization problem. Finally, the ant colony algorithm was used to solve the optimal grating structure parameters. Simulation results show that the proposed two-dimensional multilayer structure has the advantages of polarization independence, narrow grating period, narrow spectral bandwidth and low side band in 10~13 μm band. The convergence speed of the proposed optimization design method is fast. The transmittance of the polarization direction of transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) reaches 70%, and the spectral bandwidth is 260 nm.

Key words: two-dimensional multilayer grating, parameter optimization, ant colony optimization, long wave infrared (LWIR)

PACS:

引言

分光器件的选取是成像光谱仪器系统设计中的关键, 将直接影响整个成像光谱仪器的性能、结构的复杂程度、体积和重量等各方面^[1-3]。亚波长光

栅作为一种新型光谱分光器件, 因其具有平面化、轻小化、易集成等优点^[4], 受到国内外学者的广泛关注。JAMIE PHILLIPS 等人提出用于长波红外波段的窄带透射亚波长光栅结构, 由硅基和空气组成 Two-step 非对称结构, 通过调整光栅周期, 中心波长

收稿日期: 2021-12-29, 修回日期: 2022-03-23

Received date: 2021-12-29, Revised date: 2022-03-23

基金项目: 陕西省重点研发计划 (2020ZDLGY07-11), 国家自然科学基金 (61771391), 深圳市科技创新委员会基础研究项目 (JCYJ20180306171146740, JCYJ20170815162956949)

Foundation items: Supported by the Key R & D plan of Shaanxi Province (2020ZDLGY07-11), National Natural Science Foundation of China (61771391), Science Technology and Innovation Commission of Shenzhen Municipality (JCYJ20170815162956949, JCYJ20180306171146740)

作者简介 (Biography): 汤超龙 (1993-), 男, 安徽芜湖人, 博士研究生, 主要研究领域为光栅及光栅阵列设计、光栅光谱成像

E-mail: tangchaolong@mail.nwpu.edu.cn

*通讯作者 (Corresponding author): E-mail: zhaoyq@nwpu.edu.cn

可以覆盖 $9.5 \sim 11.2 \mu\text{m}$, 该结构提高了长波红外波段一维矩形光栅的光谱分辨率及透射率^[5]。Nicholas O'Keefe 等人提出金属-电介质-金属亚波长孔阵列, 该阵列通过改变光栅周期实现对红、绿、蓝三个波段的透射。将一维光栅中多层结构延伸至二维结构, 利用金属-电介质-金属层减小光谱带宽, 增加光谱分辨率^[6]。Ang Wang 和 Yaping Dan 提出用于中波红外 $3.5 \sim 7.8 \mu\text{m}$ 波段的亚波长结构, 该结构通过在氟化钙基底上对铬膜刻蚀纳米孔, 仅改变光栅周期组成孔阵列, 实现了八波段的亚波长光栅孔阵列的设计^[7]。Benjamin Craig 等人提出用于中长红外波段的亚波长同轴孔径阵列, 将光栅周期从 $1.7 \mu\text{m}$ 改变至 $3.7 \mu\text{m}$, 实现了在 $6.2 \sim 14.2 \mu\text{m}$ 的 101 个波段带通滤波器, 但该结构光谱带宽较大^[8]。

通过对光栅滤光片研究现状的分析, 我们发现用于长波红外波段的光栅结构较少。对于一维亚波长光栅结构, 其偏振相关性会使光通量降低, 且这些亚波长光栅结构的光谱带宽较大、覆盖波段范围较小, 在设计亚波长光栅阵列时光谱之间的混叠现象会使得光栅阵列光谱分光性能变差。而用于长波红外波段的二维光栅结构则存在着光谱带宽较大的问题。本文提出了一种适用于长波红外波段的偏振无关二维多层亚波长光栅结构及优化设计方法, 利用二维结构的对称性消除一维光栅的偏振相关性; 而为了解决二维多层亚波长光栅待优化结构参数与光谱响应曲线机理模型难以建立、二者无明确函数关系的问题, 使用蚁群算法^[9-10] (ACO) 对光栅结构参数进行优化。优化结果表明, 相比于 FDTD Solutions 设计软件中的粒子群优化算法^[11-12] (PSO), 蚁群算法优化的收敛速度更快, 优化后二维多层亚波长光栅具有更高的光谱分辨率和透过率。

1 光栅结构

本文提出的适用于长波红外波段的偏振无关二维多层亚波长透射光栅, 其结构如图 1 所示:

该结构由锆和氟化钡两种材料构成, 包括: 基底层、光栅层、对称高反层和覆盖层。基底层材料为锆, 厚度 $d_s = 500 \mu\text{m}$; 光栅层由锆以二维结构组成, 其中空隙位置填充氟化钡。对称高反层由氟化钡/锆/氟化钡组成, 层数为六, 对称分布于光栅层上下两侧, 厚度为 $\frac{\lambda}{4n}$ (n 为材料折射率, λ 为工作中心波长), 计算得 $d_{\text{BaF}_2} = 1.785 \mu\text{m}$, $d_{\text{Ge}} = 0.625 \mu\text{m}$; 覆盖层材料同样是锆, 且 $d_{\text{Ge}} = 0.625 \mu\text{m}$ 。除上述计算可得固定参数外, 光栅周期 P 、光栅占空比 f 、槽深 d , 是直接影响光栅光谱性能的可变参数, 需要对其进行参数优化。

2 基于蚁群算法的亚波长光栅优化

2.1 蚁群算法的原理

以蚁群算法求解著名的旅行商问题 (TSP) 为背景对蚁群算法进行介绍。设蚂蚁群体中蚂蚁的总数量为 m , 路径中要经过的城市数量为 n , 城市 i 和城市 j 之间的相互距离为 d_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$), t 时刻城市 i 和城市 j 路径上的信息素浓度为 $\tau_{ij}(t)$ 。初始时刻, 假设各个城市间连接路径上的信息素浓度相同, $\tau_{ij}(0) = \tau_0$ 。蚂蚁 k ($k = 1, 2, \dots, m$) 根据各个城市间连接路径上的信息素浓度大小决定下一个访问城市, 设 $P_{ij}^k(t)$ 表示 t 时刻蚂蚁 k 从城市 i 转移到城市 j 的概率, 其计算式如下:

$$P_{ij}^k = \begin{cases} \frac{[\tau_{ij}(t)]^\alpha [\eta_{ij}(t)]^\beta}{\sum_{s \in \text{allowed}_k} [\tau_{is}(t)]^\alpha [\eta_{is}(t)]^\beta}, & j \in \text{allowed}_k \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (1)$$

$$\eta_{ij}(t) = \frac{1}{d_{ij}}$$

式中: $\eta_{ij}(t)$ 为启发函数, 表示蚂蚁从城市 i 转移到城市 j 的期望程度; allowed_k 表示蚂蚁 k 下一步允许转

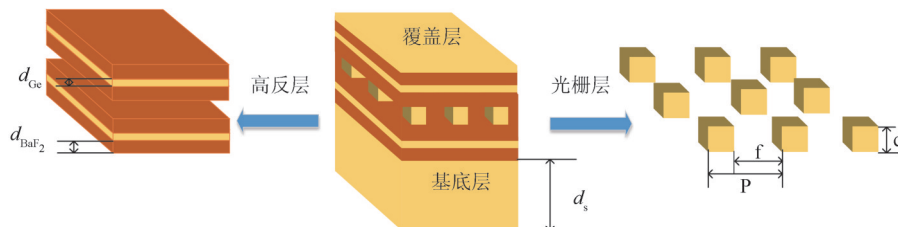


图 1 偏振无关二维多层亚波长光栅结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of polarization independent two-dimensional multilayer subwavelength grating

移的城市集合; ρ 是信息素重要程度因子,其值越大,表示信息素浓度在转移中起的作用越大; β 为启发函数重要程度因子,其值越大,表示启发函数在转移中的作用越大,蚂蚁会以较大的概率转移到距离短的城市。

当所有蚂蚁 n 完成一次循环后,对各个城市间连接路径上的信息素浓度进行更新,更新规则如下:

$$\tau_{ij}(t+n) = (1-\rho) \cdot \tau_{ij}(t) + \Delta\tau_{ij}$$

$$\Delta\tau_{ij} = \sum_{k=1}^m \Delta\tau_{ij}^k \quad (2)$$

式中: $\rho(0 < \rho < 1)$ 表示信息素的挥发系数, $\Delta\tau_{ij}^k$ 表示第 k 只蚂蚁在城市 i 与城市 j 连接路径上释放的信息素浓度, $\Delta\tau_{ij}$ 表示所有蚂蚁在城市 i 与城市 j 连接路径上释放的信息素浓度之和,它的计算方法根据模型而定,一般地:

$$\Delta\tau_{ij}^k = \begin{cases} \frac{Q}{F}, & \text{若蚂蚁在本次循环中经过点 } ij \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

式中: Q 为常数, F 为评价函数,在旅行商问题中, F 为蚂蚁 k 本次在循环中所走的路径的长度。

2.2 亚波长光栅优化评价函数的建立

对于二维多层亚波长光栅,其光谱响应曲线通过仿真软件经数值分析计算求得,待优化的光栅结构参数,包括光栅周期、光栅槽深、光栅占空比,与光谱响应曲线之间无明确的函数关系。因此要将光栅结构参数优化转换为路径优化问题,再使用蚁群算法求解最优光栅结构参数。解决的思路是将光栅占空比和光栅槽深等参数的有效位数字置于 XOY 坐标系中,如 $f=0.53, d=0.73 \mu\text{m}, P=6.3 \mu\text{m}$,可以重写为 $f=5 \times 10^{-1} + 3 \times 10^{-2}, d=7 \times 10^{-1} + 3 \times 10^{-2}, P=6 + 3 \times 10^{-1}$,与之对应的6位数字序列为537363。可以画出一个二维 XOY 坐标系,横坐标为1~6,纵坐标为0~9,如图2所示:

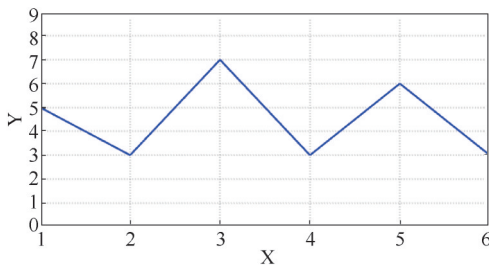


图2 光栅结构参数在 XOY 坐标系中对应的路径图

Fig. 2 Path diagram corresponding to the grating structure parameters in XOY coordinate system

其中坐标系的每个节点 J 的坐标值为 (x_i, y_i) ($i=1, 2, \dots, 6$), x_i 表示当前节点的 i 值, y_i 表示该节点的数值,因此一个路径对应一组优化参数,计算如式(4):

$$\begin{cases} f = y_1 \times 10^{-1} + y_2 \times 10^{-2} \\ d = y_3 \times 10^{-1} + y_4 \times 10^{-2} \\ P = y_5 + y_6 \times 10^{-1} \end{cases} \quad (4)$$

与旅行商问题不同的是,亚波长光栅结构参数的优化变为路径优化问题以后,并不关注最短路径是什么,只关注每个节点的值所组成的结构参数能否获得最优光谱响应曲线,因此只考虑蚁群在节点处的信息素浓度,不考虑节点与节点路径之间的信息素浓度,即启发函数重要程度因子 $\beta = 0$,这样不仅简化了路径选择问题,同时也符合亚波长光栅结构参数寻优。

对于不同的问题,蚁群算法中评价函数 F 的设计直接关系到算法求解的质量。对于亚波长光栅优化而言,需要得到最优光学性能,即光栅光谱响应曲线的透射率、带宽及中心波长的位置。因此选取理想光谱曲线每个波点的透射率 R_{e,λ_i} 与实际光谱曲线中对应波点透射率 R_{r,λ_i} 的标准差作为评价函数,如式(5)。影响光谱透射率大小的因素有光栅周期 P 、光栅占空比 f 、槽深 d ,因此将它们作为优化参数集 $F(f, d, P)$ 。为了使得优化设计的二维结构光栅周期较小,旁带低及加工易实现性,对优化参量进行了一定的约束。

$$F = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [R_{e,\lambda_i}(f, d, P) - R_{r,\lambda_i}(f, d, p)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$f \in (0, 1), d \in (0, 1), P \in (0, \lambda) \quad (5)$$

式中, R_{e,λ_i} 是不同波长入射时的理想透过率,理想光谱曲线在不同波长入射时的透射率设定如下:中心波长 $11.4074 \mu\text{m}$ 处透过率为100%,带宽为300 nm,波长 $11.2574 \mu\text{m}$ 和 $11.5574 \mu\text{m}$ 处透过率设置为50%,波长 $11.1074 \mu\text{m}$ 和 $11.7074 \mu\text{m}$ 处透过率设置为0。 R_{r,λ_i} 是将优化参数集中的参数代入时域有限差分法计算得到的实际透过率, N 是波长所取的点数。

在约束条件下,将每次优化后的参数代入时域有限差分法计算实际光谱曲线每个点的透射率,当实际光谱曲线透射率与理想光谱曲线透射率越接近时, F 函数的值越小。反之, F 函数的值越大代表实际光谱曲线与理想光谱曲线误差较大,优化结果较差,计算使得 F 函数值最小的变量值 (f_b, d_b, P_b) 就

是优化后的最优结构参数,如式(6)。

$$(f_b, d_b, P_b) = \operatorname{argmin} F(f, d, P) \quad (6)$$

2.3 蚁群算法优化亚波长光栅参数流程

(1)在FDTD Solutions中对结构进行建模,MATLAB与Lumerical scrip集成;

(2)确定初始参数蚁群数量Num_max、信息素重要程度因子 α 、信息素的挥发程度 ρ 以及最大迭代次数maxIts,待优化光栅结构参量个数 j ;

(3)从第一只蚂蚁、第一次迭代开始优化,第一只蚂蚁在第一个节点的纵坐标值 y_i 随机给定(即第一条路径的起点随机);计算第一只蚂蚁从节点 i 转移到节点 $i+1$ 的概率 $P^k(t)$ 并转移蚂蚁(i 自增);重复上述步骤,直到 $i \leq j$,第一只蚂蚁走完第一条路径,给出路径图,并计算优化参数 f, d, P ;

(4)将计算得到的 f, d, P 传输至FDTD solution中,仿真获得每个波长点的透射率,根据式(5)计算得到评价函数值,然后根据式(2)(3)更新信息素浓度,在FDTD Solutions的窗口中给出所计算的 f, d, P 值以及评价函数值;

(5)如果迭代次数未达到最大迭代次数,进行下一次迭代,否则输出最后一次迭代得到的 f, d, P 值以及最优评价函数值。

基于蚁群算法的二维多层亚波长光栅结构优化设计算法,如表1所示。

表1 基于蚁群算法的二维多层亚波长光栅结构优化设计算法

Table 1 Structure optimization design algorithm of two-dimensional multilayer subwavelength grating based on ant colony algorithm

Algorithm: Structure optimization design of two-dimensional multilayer subwavelength grating based on ACO
1: Initialization: maximum number of ant colonies Num_max, number of iterations maxIts, number of parameters to be optimized j , a random integer $y_i (0 \leq y_i \leq 9)$, $\alpha = 1$, $\rho = 0.3$
2: for Its=1 to maxIts
3: for Num=1 to Num_max
4: for $i=1$ to j
5: Calculate transition probability $P_{ij}^k(t)$ by Formula (1)
6: end for
7: Draw the path diagram of grating structure parameters f, d and P
8: Calculate the values of f, d and P by Formula (4)
9: Built the grating model by the values of f, d, P in FDTD solutions
10: Calculate $R_{r,\lambda}$
11: Calculate the evaluation function value F by Formula (5)
12: Update pheromone concentration matrix by Formula (2)&(3)
13: end for
14: Output F_{best} of this iteration and its corresponding values of f, d and P
15: end for
16: Output: the global minimum evaluation function value G_{best} and its corresponding values of f, d and P

2.4 优化结果分析

2.4.1 偏振角对光谱性能的影响

一维亚波长光栅结构通常存在偏振效应,会降低光的使用效率,本文利用二维结构的对称性消除了偏振效应,改变偏振角,分析偏振角对光谱性能的影响,如图3所示:

偏振角从 0° 至 180° 改变,光谱带宽、中心波长位置以及透射率都未发生改变,偏振角的改变对光

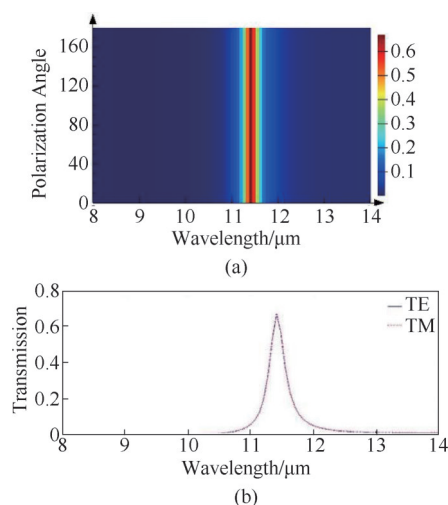


图3 (a)偏振角对光谱曲线的影响,(b)TE、TM分别入射时的光谱曲线

Fig. 3 (a) Influence of polarization angle on spectral curve, (b) the spectral curves of TE and TM incident respectively

谱性能没有影响。图3中蓝色实线和红色虚线分别表示TE波和TM波以相同条件入射二维结构的光谱曲线,结果表明二者曲线完全一致,因此该结构具有偏振无关的特性。

2.4.2 光栅结构参数优化速度与光谱分光性能

依照上述基于蚁群算法的亚波长光栅设计方案,确定初始参数蚁群数量 $Num_max=20$,信息素重要程度因子 $\alpha=1$,信息素的挥发程度 $\rho=0.3$ 以及最大迭代次数 $maxIts=200$ 。优化后的最优路径如图4所示:

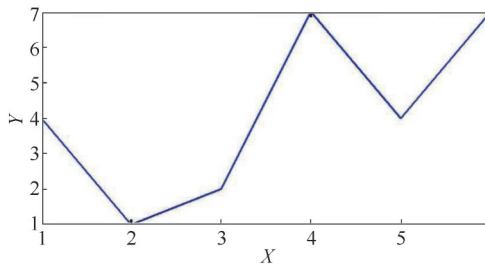


图4 ACO优化后的最优路径

Fig. 4 The optimal path optimized by ACO

优化后得 $f=0.41$, $d=0.27\ \mu\text{m}$, $P=4.7\ \mu\text{m}$ 。把优化后的结构参数代入FDTD Solutions中,仿真实际光谱曲线,将蚁群算法的迭代曲线以及优化后的光谱曲线与FDTD Solutions设计软件中的粒子群优化算法优化迭代300次得到的结果进行比较。如图5所示,图5(a)中是ACO评价函数随迭代次数的变化,图5(b)是PSO评价函数随迭代次数的变化。

对比图5(a)和(b),最小评价函数值 F 都等于0.191,ACO在迭代25次以后评价函数值达到最小并趋向收敛,而PSO在优化290次时评价函数值才达到最小,并且还未完全收敛。将基于ACO和PSO优化后的光栅结构参数分别代入FDTD Solutions中计算光谱曲线,结果如图6所示。

结果表明,ACO优化后的光谱曲线透射率为70%,带宽260 nm。PSO优化后的光谱透射率为68%,带宽310 nm。相比于PSO优化后的结果,ACO优化不仅迭代速度快,且光谱性能更优,光谱透射率更高,带宽更小,更接近理想光谱曲线。

2.4.3 光栅光谱调谐性能

图7给出了光栅周期为 $4.7\ \mu\text{m}$,光栅槽深为 $0.27\ \mu\text{m}$ 的光栅结构,光栅占空比变化时光栅光谱性能的改变。从仿真结果可以看出,随着占空比的减小,带宽大小呈现微小变化,中心波长可以实现 $10\ \mu\text{m}$ 至 $13\ \mu\text{m}$ 的调谐,光谱混叠现象较少。

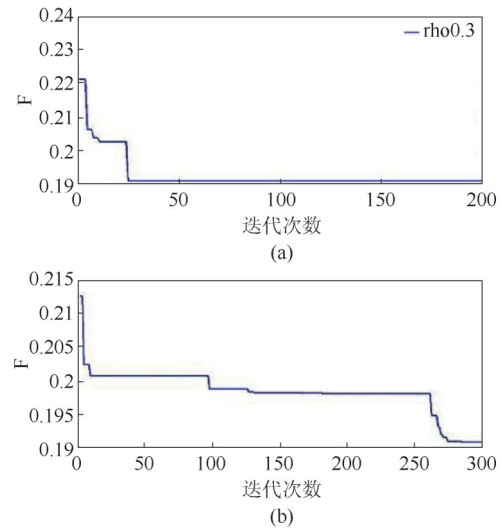


图5 (a)ACO优化F随迭代次数的变化,(b)PSO优化F随迭代次数的变化

Fig. 5 (a) The change of F value with the number of iterations during ant colony optimization, (b) the change of F value with the number of iterations during particle swarm optimization

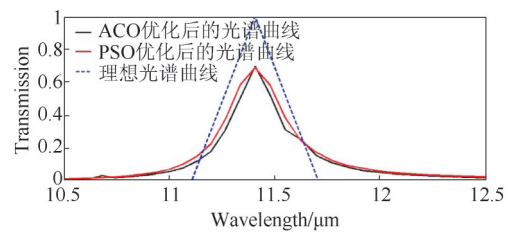


图6 优化后的光谱曲线与理想光谱曲线对比(黑色实线:ACO;红色实线:PSO)

Fig. 6 The optimized spectral curve compared with the ideal spectral curve (black line: ACO; red line: PSO)

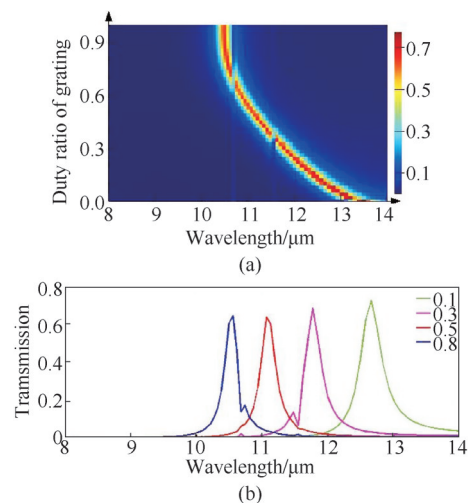


图7 光谱曲线随光栅占空比的变化

Fig. 7 The change of spectral curve with duty ratio of grating

3 结论

本文提出一种适用于长波红外波段的二维多层亚波长光栅结构,用FDTD Solutions对其进行建模,并确定仿真条件,将光栅周期 P 、光栅占空比 f 以及槽深 d 作为优化参数集,将亚波长光栅结构优化参数集置于 XOY 坐标系中,将其转化为路径寻优问题,然后根据理想光谱曲线与目标光谱曲线各个波长点处透过率的标准差作为光栅光谱响应的评价函数,使用具有收敛速度较快,全局优化能力较强的蚁群算法对亚波长光栅结构参数进行优化。从迭代速度、以及优化后的结果对FDTD Solutions设计软件中的粒子群优化算法和蚁群算法进行比较,结果表明粒子群优化算法迭代较慢,并且优化结果并非最优。蚁群算法正反馈机制使得优化收敛加快,并且优化后的结果优于粒子群算法。本文提供的长波红外波段的二维多层亚波长光栅结构具有偏振无关、光通量较大、光栅周期较小、光谱调谐范围大等特点,对发展热红外多光谱成像技术具有重要意义;而将蚁群算法应用于亚波长光栅优化的相关思路也对光栅设计中的参数优化产生启发。

References

- [1] TUHTASUN Merdan, FAN Chen-Fang, LI Xiao-Wen, *et al.* Infrared optical properties of one-dimensional 4H-SiC gratings and its nano-ruler application [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (买尔旦·吐合达洪, 樊晨芳, 李晓温, 等。一维4H-碳化硅光栅红外光学特性及红外尺应用。《红外与毫米波学报》, 2020, **39**(2):221-227.
- [2] Arvelo E R, Cevher V, Liu M K, *et al.* Ultrasensitive hyperspectral imaging and biodetection enabled by dielectric metasurfaces [J]. *Nature Photonics*, 2019, **13**:390-396.
- [3] Cheng R, Zou C L, Guo X, *et al.* Broadband on-chip single-photon spectrometer [J]. *Nature communications*, 2019, **10**(1):1-7.
- [4] CHEN Rui, LIU Xia, WANG Hong, *et al.* From subwavelength grating to metagrating: principle, design and applications [J]. *Infrared and Laser Engineering* (陈瑞, 柳夏, 王虹, 等。从亚波长光栅到超构光栅:原理,设计及应用。《红外与激光工程》, 2020, **49**(9):20201039-1-20201039-22.
- [5] Scherr M, Barrow M, Phillips J. Long-wavelength infrared transmission filters via two-step subwavelength dielectric gratings [J]. *Optics letters*, 2017, **42**(3):518-521.
- [6] He X, O'Keefe N, Sun D, *et al.* Plasmonic narrow band-pass filters based on metal-dielectric-metal for multispectral imaging [C]//2018 Conference on Lasers and Electro-Optics Pacific Rim (CLEO-PR). IEEE, 2018: 1-2.
- [7] Wang A, Dan Y. Mid-infrared plasmonic multispectral filters [J]. *Scientific reports*, 2018, **8**(1):1-7.
- [8] Craig B, Meng J, Shrestha V R, *et al.* High-resolution mid-infrared spectral reconstruction using a subwavelength coaxial aperture array [C]//CLEO: Applications and Technology. Optical Society of America, 2019: JTu2A.48.
- [9] Jin H, He Q, He M, *et al.* Optimization for medical logistics robot based on model of traveling salesman problems and vehicle routing problems [J]. *International Journal of Advanced Robotic Systems*, 2021, **18**(3): DOI: 10.1177/172988142111022539.
- [10] WANG Yuan, CHEN Ming, XING Li-Ning, *et al.* Deep intelligent ant colony optimization for solving travelling salesman problem [J]. *Journal of Computer Research and Development* (王原, 陈名, 邢立宁, 等。用于求解旅行商问题的深度智慧型蚁群优化算法。《计算机研究与发展》, 2021, **58**(8):1586-1598.
- [11] GAO Jian, WANG Qing-Kang, WANG Dan-Yan. Design of transmittance filters based on particle swarm optimization algorithm [J]. *Laser Technology* (高健, 王庆康, 王丹燕。基于粒子群优化算法的透射滤光片设计。《激光技术》, 2018, **42**(5):617-621.
- [12] LI Hao-Guang, YU Yun-Hua, PANG Yan, *et al.* Research of Parameter Optimization of Preprocessing and Feature Extraction for NIRS Qualitative Analysis Based on PSO Method [J]. *Spectroscopy And Spectral Analysis* (李浩光, 于云华, 逢燕, 等。粒子群算法的近红外光谱定性分析预处理及特征提取参数优化方法研究。《光谱学与光谱分析》2021, **41**(9):2742-2747.