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

Proity Nayeeb Akbar

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

电子邮箱：*pakbar@wesleyan.edu*

摘要

准确确定复有效介电常数是光学材料工程的基础，但对于非均质系统而言，这仍是一项关键的计量学挑战。在聚合物共混物和光学复合材料中，散射和非线性介电效应会严重扭曲光谱特征，导致传统的线性解混和数据驱动方法失效。本文提出一种逆向重建框架，可直接从单一红外（IR）消光光谱中提取宽带复介电常数和混合物的组分构成。该方法结合散射理论、洛伦兹振子建模和一组广义非线性有效介质近似（EMAs），从而同时识别组分光谱、估算体积分数，并且尤为重要的是，诊断其潜在微观结构。该重建算法在合成的双组分及多组分聚合物共混物中表现稳健，并对反转型、对数型和立方型混合机制的有效性进行了严格检验。通过比较这些竞争性有效介质近似的统计因果性和拟合质量，该框架能够独特地对共混物的主导相互作用拓扑（例如，共连续结构与分层/串联结构）进行无损光学诊断。重构得到的介电常数谱符合色散关系，并揭示了整个红外范围内具有物理意义的光学性质。该框架为光子学中的逆向计量学确立了新范式，为非线性光学复合材料的定量表征和合理设计奠定了必要的、以物理学为基础的基石。具体而言，该框架通过提供抗散射有效介电常数以用于正向建模，并基于物理原理诊断潜在微观结构，使工程师能够可靠地将制备参数与预期光学功能联系起来。

引言

复介电常数（或复折射率）是光子学和光学材料工程中的核心量，决定着非均质材料中涌现的电磁行为——从生物系统到先进光学复合材料 [1, 2, 3, 4]。尽管它对于超材料和新型传感器等材料的正向设计与建模至关重要，但要直接从实验数据中反演这一固有的、

宽带函数却极为困难 [5, 6]。具体而言，在红外（IR）波段，组分混合会导致强烈的散射和非线性介电相互作用 [7, 8, 9], ，从而扭曲测得的吸收特征，使比尔-朗伯定律 [10] 或克拉默斯-克ронн尼希变换 [11] 等传统解析方法变得不准确或不适用 [12, 13, 14]。

高光谱与光谱成像领域的最新进展，催生了对定量、空间分辨化学分析的需求 [15, 16, 17, 18, 19, 20]。然而，数据解读严重受制于光谱解混（SU）问题 [21]。大多数成熟的光谱解混算法都依赖线性混合模型（LMM），该模型从根本上假设测得的光谱是纯组分按体积分数加权后的简单和 [22, 23, 24]。在散射介质中，近场耦合和密切的介电相互作用会导致光谱特征发生位移、展宽并产生非线性相互作用，使数据落在复杂的非线性流形上，因此这一假设并不成立 [25, 26, 9, 27]。在此语境下，“非线性”指的是用于描述复合材料介电常数的有效介质近似（EMAs）具有非加和、依赖几何结构的特性。 对于这些真实系统，反问题仍然是不适定的：必须根据有限且含噪的数据，不仅推断组分光谱和丰度，还要确定未知的物理相互作用机制 [28, 29, 30, 31, 21]。

在此，我们对物理信息引导的逆重建框架 [32, 33, 34], 作出了根本性推进，将其功能从基础光谱反卷积扩展至宽带介电计量学和微观结构诊断。我们的方法严格整合了光散射的物理过程与混合本构物理（有效介质近似）。该两阶段框架同时实现：**1)**重建介质的复有效介电常数——一种与几何结构无关的材料常数，是正向建模和设计应用所必需的；**2)**恢复纯组分的介电常数光谱（从散射中反卷积得到）；**3)**量化组分体积分数；以及 **4)**诊断内部微观结构，而它是决定复合材料宏观光学性能的首要因素。至关重要的是，我们超越了此前仅限于简单或线性有效介质近似的工作 [32] ，明确纳入了一系列非线性介电混合规则，包括“反转型”、“对数型”和“立方型”模式 [35, 36, 37]。

这种诊断能力的关键在于这些有效介质近似具有各自不同的微观理论依据。将组分介电常数与有效介电常数联系起来的理论基础在于有效介质理论（EMT），该理论由若干基本模型定义，例如麦克斯韦-加内特（基体-夹杂拓扑）近似和布鲁格曼（对称共连续拓扑）近似 [38, 37]。这些近似源自长波场平均理论 [38, 37]。

为严格建模聚合物共混物典型的高度非线性介电效应，我们采用广义有效介质理论模型，通过涵盖三种不同的物理混合情形来扩展这些基础。“立方型”（Looyenga）模型作为 Bruggeman 方法的稳健推广，可在宽体积分数范围内诊断共连续网络拓扑 [39, 37]。“反转型”（Wiener 下界）模型通过表征理论最大电阻（串联混合）来严格检验层状拓扑 [40, 41, 37]。最后，纳入“对数型”（Lichtenecker）模型，以诊断随机

晶粒，代表混合物的性质由组分性质对数的体积平均所决定的情形 [42, 37]。

这种对物理合理拓扑的系统比较是我们微观结构诊断的核心，从根本上驳斥了这些模型属于启发式方法的观点。通过检验哪种模型能给出统计上最稳定且物理上具有因果性的复介电常数谱，该反演框架对材料底层介电微结构提供了定量的无损光学诊断。

我们在合成的二元及多组分聚合物共混物（代表微结构光学复合材料）上展示了该框架的稳健性。这些体系被专门设计为产生微米尺度的自立颗粒——在该几何构型中，米氏散射理论 [43] 是描述所测消光截面的严格第一性原理模型[8, 44]。我们有意采用基础性工作 [32] 中建立的同一基准聚合物体系，以便进行直接的定量比较，从而验证有效介电常数恢复的计量一致性，同时分离出真正新的物理贡献——通过非线性EMA比较对微观结构进行严格诊断。

本工作建立了一种模型一致的单光谱范式，通过将解混建立在第一性原理物理之上，自动求解非线性SU问题。它为定量高光谱成像提供了计算基础，从而能够对非线性复合材料和功能光子材料进行设计、表征与验证[45,46, 47, 48, 49]。

方法

本研究提出了一种基于物理的逆向重建框架，可根据单条红外消光光谱恢复非线性介电混合物的复有效介电常数和组分构成。该方法建立了一种与模型一致的逆向计量标准，可解析强散射且组分复杂介质中的各组分特有贡献。**图1** 概述了完整重建框架的示意图。

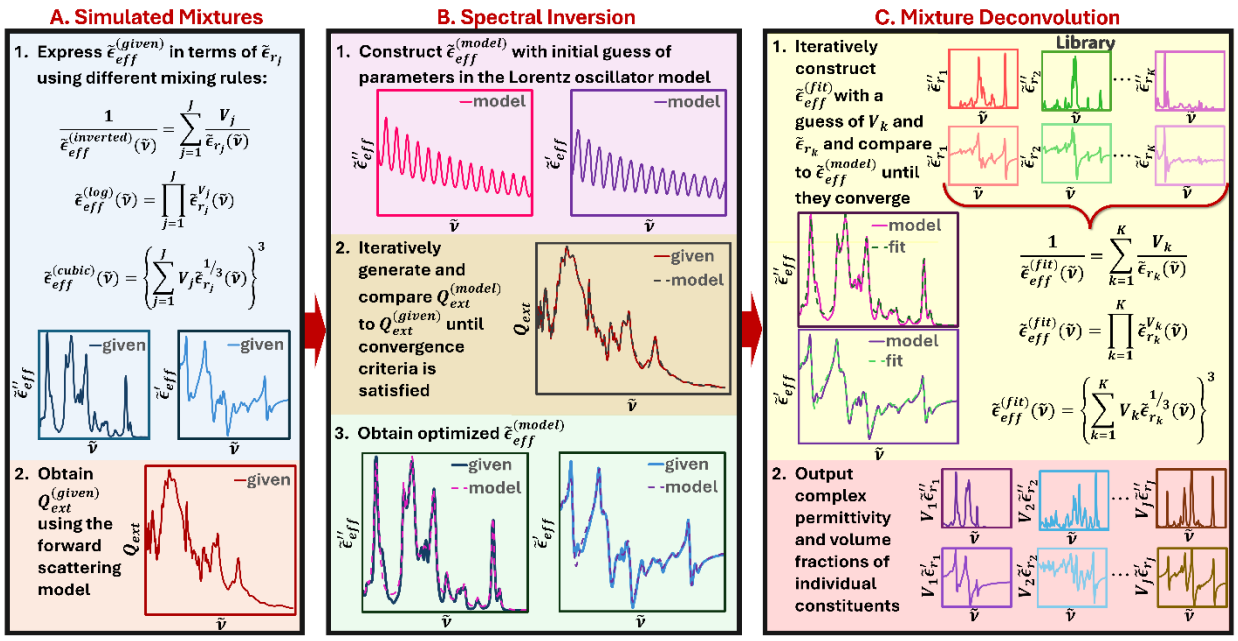


图*1*：用于微观结构诊断的两阶段逆计量框架示意图。该框架将光散射物理过程与混合本构物理严格结合，以求解反问题。**A. 模拟混合物（阶段A：正向模型仿真）：** **1)**对组分复介电常数 $\tilde{\epsilon}_{r_j}$ 和体积分数 V_j应用三种物理上不同的混合拓扑结构——反转型（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}$，代表分层/串联拓扑）、对数型（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(\log)}$，代表统计/随机晶粒混合物）和立方型（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}$，代表共连续混合物），构建复有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(given)}$。**2)**通过求解 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(given)}$对应的麦克斯韦方程组（米氏理论），合成生成“真实值”实验消光效率 $Q_{ext}^{(given)}$。这种合成生成对于精确验证体积分数恢复结果，以及根据绝对已知标准诊断底层混合拓扑结构（反转型、对数型或立方型）是必要的。**B. 光谱反演（阶段 B：有效介电常数恢复）：** **1)** 逆向计量从光谱反演开始：使用洛伦兹振子模型（LOM）拟合实验消光效率 $Q_{ext}^{(given)}$，其参数描述重构介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$。**2)** 基于 LOM 的消光效率 $Q_{ext}^{(model)}$通过米氏模型生成，并通过最小化残差获得不受散射影响的宽带材料常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$，该常数是正向光学设计所必需的。**C. 混合物解卷积（阶段 C：微观结构诊断）：** **1)**对恢复得到的 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$ 同时应用三种相互竞争的混合规则进行解卷积，以获得预测谱 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(fit)}$。**2)**优化过程通过最小化 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$ 与 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(fit)}$之间的残差，分离出各组分性质（$\tilde{\epsilon}_{r_k}$、 V_k），并且最重要的是，识别出误差最低的混合拓扑结构（有效介质近似模型），从而完成对共混物的微观结构诊断。

材料与数据

本研究使用了六种有机聚合物，包括聚甲基丙烯酸甲酯（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）；这些材料具有通过傅里叶变换红外光谱和椭偏测量获得的不同红外特征 [50, 51, 52, 53, 54, 55]。这些数据作为真实值，用于模拟组成和非线性相互作用已知的混合物。

散射区的物理依据

该框架中的光与物质相互作用采用米氏散射理论建模，该理论为球形颗粒的麦克斯韦方程组提供了严格解。对该散射区的选择由无量纲尺寸参数决定，即 x，其定义为：

$$x = 2\pi r\tilde{n}/\lambda, \tag{1}$$

其中，r 为颗粒半径，$\tilde{n}$ 为周围介质的折射率，λ 为入射辐射的波长。在中红外（mid-IR）范围内，λ 大约为$2。5 – 20\ \mu m$ （以波数表示为$500 - 4000\ cm^{-1}$）；鉴于本研究采用的夹杂物半径为$r = 5\ \mu m$，x 约在1.5至12.5之间变化。该范围明确属于米氏散射区（$x \approx 1$），此时波长与夹杂物尺寸相当。在这一散射区内，瑞利近似在物理上并不充分，因为它忽略了微结构夹杂物内部产生的内部场分布和相移。

虽然当前验证采用球形几何结构，以单独评估微观结构诊断算法（**图1**的阶段C）的性能，但阶段 B 反演流程采用模块化架构，旨在提高灵活性。未来涉及非球形或高度各向异性形貌的应用，可通过将米氏正向模型替换为其他求解器来实现，例如针对非球形颗粒的T矩阵法，或针对分层介质的基于菲涅耳公式的模型。

模拟混合物（阶段A：定义散射模型）

合成混合物通过在受控体积分数下组合聚合物而生成（**图1**的阶段A），采用了三种非线性混合模型：反转型、对数型和立方型 [35, 36,37]。对这三种代表不同物理拓扑结构（分别为串联/分层、统计/随机颗粒和共连续/对称）的模型进行有意比较，是我们进行微观结构诊断的基础。如下所述，方程（2）至（4）分别表示采用反转型、对数型和立方混合规则得到的复有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(log)}$ 和 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}$。

$$\frac{1}{\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}(\tilde{\nu})} = \frac{1}{\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(inverted)}(\tilde{\nu}) + i\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(inverted)}(\tilde{\nu})} = \sum_{j=1}^{J} \frac{V_j}{\tilde{\epsilon}_{r_j}(\tilde{\nu})}, \tag{2}$$

$$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(log)}(\tilde{\nu}) = \tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(log)}(\tilde{\nu}) + i\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(log)}(\tilde{\nu}) = \prod_{j=1}^{J} \tilde{\epsilon}_{r_j}^{V_j}(\tilde{\nu}), \quad (3)$$

$$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}(\tilde{\nu}) = \tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(cubic)}(\tilde{\nu}) + i\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(cubic)}(\tilde{\nu}) = \left\{ \sum_{j=1}^{J} V_j \tilde{\epsilon}_{r_j}^{\frac{1}{3}}(\tilde{\nu}) \right\}^3. \quad (4)$$

量 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(log)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(log)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(cubic)}$ 和 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(cubic)}$ 分别表示 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(log)}$ 和 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}$ 的实部和虚部。在此表达式中，$\tilde{\epsilon}_{r_j}$ 和 V_j 分别表示复合体系中第 j 个聚合物组分的复介电常数和体积分数。索引 j 遍历混合物的各个组分，组分总数为 J。

随后，将每种混合物建模为半径为 $5\,\mu m$ 的均匀球体，并使用 PyMieScatt 软件包 [56]，计算其消光效率 Q_{ext}。该软件包通过给定的复有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(given)}$ 求解麦克斯韦方程组。由于消光效率所表达的样品形状和化学组成导致的光损失信息，与表观红外吸光度 A [8, 44] 相同，因此使用这些数据进行重建，并将其称为实验消光光谱 $Q_{ext}^{(given)}$。与 $Q_{ext}^{(given)}$ 对应的复有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(given)}$，可由以下三种混合模型中的任意一种所得到的复有效介电常数表示：$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(log)}$ 或 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}$。

合成生成“真实值”消光光谱，可通过将反演算法的性能与样品制备差异、仪器噪声等实验不确定性分离开来，从而对其进行严格基准评估。我们以六种有机聚合物（聚甲基丙烯酸甲酯、聚碳酸酯、聚二甲基硅氧烷、聚醚酰亚胺、聚对苯二甲酸乙二醇酯和聚苯乙烯）的实验折射率为基础进行米氏散射计算（**图1**的阶段A），确保模拟的“实验”光谱具有较高的物理保真度，因为其中纳入了各纯组分完整的实验色散曲线，为精确评估体积分数恢复和拓扑诊断提供了已知目标。

逆向计量流程

逆向重建框架包含两个阶段：

光谱反演（阶段 B：有效介电常数恢复）

光谱反演（**图1**的阶段 B）考虑了散射，并校正失真，以分离出潜在的介电响应。我们采用洛伦兹振子模型 [43, 34, 33, 32, 57, 58], 拟合实验消光光谱 $Q_{ext}^{(given)}$，通过调整一组最少的参数 ϵ_{∞}, $\tilde{\nu}_{0_{eff(n)}}$、$\tilde{\nu}_{p_{eff}(n)}$ 和 $\gamma_{eff}^{(n)}$，恢复混合物复有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$的实部 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}$和虚部 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}$。索引 $n = 1, \ldots, N$ 表示混合物内不同的振动共振。这些参数描述了所建模的均匀混合组分球体的形状和内部

结构；该球体的各组分之间存在非线性相互作用。有关其物理意义的更多详情，请参阅补充材料及我们此前的研究 [33, 32, 34]。

$$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}(\tilde{\nu}) = \tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}(\tilde{\nu}) + i\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}(\tilde{\nu}), \tag{5}$$

$$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}(\tilde{\nu}) = \sum_{n=1}^{N}\left\{\epsilon_\infty + \frac{\tilde{\nu}_{p_{eff}}^{(n)\ 2}\left(\tilde{\nu}_{0_{eff}}^{(n)\ 2} - \tilde{\nu}^2\right)}{\left(\tilde{\nu}_{0_{eff}}^{(n)\ 2} - \tilde{\nu}^2\right)^2 + \left(\tilde{\nu}\gamma_{eff}^{(n)}\right)^2}\right\}, \tag{6}$$

$$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}(\tilde{\nu}) = \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{\tilde{\nu}_{p_{eff}}^{(n)\ 2}\tilde{\nu}\gamma_{eff}^{(n)}}{\left(\tilde{\nu}_{0_{eff}}^{(n)\ 2} - \tilde{\nu}^2\right)^2 + \left(\tilde{\nu}\gamma_{eff}^{(n)}\right)^2}\right\}. \tag{7}$$

通过使用 PyMieScatt 软件包 [56]求解麦克斯韦方程组，可以计算出与 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{\ mo\ \ e}$对应的消光效率，记为 $Q_{ext}^{(model)}$。随后，通过最小化在一组覆盖中红外光谱的波数 $\tilde{\nu}_l$上评估的两个函数之间的残差 S，得到与 $Q_{ext}^{(given)}$ 的最佳匹配。

$$S\left\{\epsilon_\infty, \tilde{\nu}_{0_{eff}}^{(n)}, \tilde{\nu}_{p_{eff}}^{(n)}, \gamma_{eff}^{(n)}\right\} = \sum_l\left\{Q_{ext}^{(model)}\left[\left\{\epsilon_\infty, \tilde{\nu}_{0_{eff}}^{(n)}, \tilde{\nu}_{p_{eff}}^{(n)}, \gamma_{eff}^{(n)}\right\}, \tilde{\nu}_l\right] - Q_{ext}^{(given)}(\tilde{\nu}_l)\right\}^2, \tag{8}$$

混合物解卷积（阶段C：微观结构诊断）

随后，将重构得到的复介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$分解为各个组分的贡献（**图1**的阶段C）。该算法通过探索候选材料的复介电常数 $\tilde{\epsilon}_{r_k}$及其相应体积分数 V_k的组合来进行分析：对于低维问题，使用网格搜索 [59]；对于高维混合物，使用梯度下降 [60]；其中 $k = 1, \ldots, K$ 表示光谱数据库中的材料索引。针对三种混合模型（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(inverted)}$、$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(log)}$和 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(cubic)}$），分别独立执行优化。

每种组合都会生成复有效介电常数的预测谱，并将残差平方和（9）最低且复介电常数光谱在物理上最符合因果关系的模型指定为拟合光谱，$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(fit)}$，并据此得出关于混合物拓扑结构的诊断结论。

$$RSS\left[\tilde{\epsilon}_{r_k}, V_k\right] = \sum_l\left\{\tilde{\epsilon}_{eff}^{(fit)}\left[\left\{\tilde{\epsilon}_{r_k}, V_k\right\}; \tilde{\nu}_l\right] - \tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}(\tilde{\nu}_l)\right\}^2. \tag{9}$$

两个阶段均完全自动化，无需预先假设混合物中组分的数量或身份，并且对初始条件具有稳健性（详见结果与补充材料）。由于每个介电函数由三个参数表征——$\tilde{\nu}_{0_{eff}(n)}$、$\tilde{\nu}_{p_{eff}(n)}$和$\gamma_{eff}^{(n)}$——且模型包含单一直流偏置ϵ_∞，该优化对应于在$91 - 103$ 维参数空间中求解逆散射问题，具体取决于

混合物复杂度。有关更多算法与数学细节，请参阅补充材料或我们先前的工作[33, 32, 34]。

精度与灵敏度测试

逆向重建框架在双组分和多组分混合物上得到验证，同时采用了已知初始条件和随机初始条件。性能根据复介电常数的重建误差以及预测体积分数进行评估。

结果

对重建框架进行了评估，以确立其作为物理信息逆计量工具的能力，具体方式是严格恢复宽带复介电常数$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$，并基于非线性混合模型的比较开展后续微观结构诊断。我们的测试涵盖受反转型、对数型和立方混合规则支配的、不同体积分数下的双组分和多组分混合组分球体。

光谱反演（阶段 B：有效介电常数恢复）

光谱反演（**图1**的阶段 B）首先在模拟的双组分和多组分聚合物球体上得到验证，方法是将重建的复有效介电常数谱与实验获得的真实值进行比较。对于双组分分析，使用三种非线性混合模型（反转型、对数型和立方型）模拟了15种混合物组合。这一广泛的实验矩阵旨在验证有效介电常数恢复在不同化学组成、体积比和已知混合拓扑下的一致性与精度。

混合物的标记如下：PC-PDMS、聚碳酸酯-聚醚酰亚胺、PC-PET、PEI-PDMS、PEI-PET、聚对苯二甲酸乙二醇酯-聚二甲基硅氧烷、聚甲基丙烯酸甲酯-聚碳酸酯、PMMA-PDMS、PMMA-PEI、PMMA-PET、PMMA-PS、聚碳酸酯-聚苯乙烯、PDMS-PS、PEI-PS 和 PET- PS。每种混合物均在三种不同体积分数下进行测试：10%:90%、30%:70%和50%:50%。命名规则（例如 PC-PDMS 或 PC-PEI）表示涉及的两种聚合物，其中排在前面的组分对应第一个体积分数。例如，PC- PDMS 在10%: 90%时，表示10%聚碳酸酯（PC）和90%聚二甲基硅氧烷（PDMS）。

多组分体系由聚甲基丙烯酸甲酯、聚碳酸酯、聚二甲基硅氧烷、聚对苯二甲酸乙二醇酯、聚醚酰亚胺和聚苯乙烯组成，并在六种主要组分和次要组分比例各异的情形下进行测试：**A)**40%:10%: 5%: 15%: 20%: 10%、**B)** 30%: 20%: 10%: 5%: 15%: 20%、**C)**5%: 5%: 65%: 5%: 5%: 15%、**D)** 0%:0%: 78%: 3%: 7%: 12%、**E)**19%: 13%: 41%: 8%: 18%: 1%，以及**F)** 16.5%: 16.5%: 16.5%: 16.5%: 16.5%: 17.5%。其中，标记为19%:13%:41%:8%: 18%: 1% PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS 的混合物代表一种由19%聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA）、13%聚碳酸酯（PC）、41%

聚二甲基硅氧烷（PDMS）、8%聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）、18%聚醚酰亚胺（PEI）和1%聚苯乙烯（PS）组成的复合材料。

采用反转型、立方型和对数混合规则对三个体积分数下的二元混合物进行建模，其光谱反演结果分别见补充材料部分的**图 S1** 至**S3**。**图 2**至**4**展示了多组分混合物阶段 B 的结果，为诊断阶段提供复有效介电常数输入。我们比较了在分别假定三种混合拓扑时得到的重构有效介电常数$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$：反转型（**图 2**）、对数型（**图 3**）和立方型（**图 4**）。每幅图包含三个子图：分图**(a)**在指定体积分数下比较实验复有效介电常数的虚部$\tilde{\epsilon}_{eff}''$（实线黄色）与重构虚部$\tilde{\epsilon}_{eff}''^{(model)}$（虚线紫色）；分图**(b)**将实验复有效介电常数的实部$\tilde{\epsilon}_{eff}'$（实线绿色）与重构实部$\tilde{\epsilon}_{eff}'^{(model)}$（虚线蓝色）进行对照；分图**(c)**在相同体积分数下比较实验消光效率$Q_{ext}^{(given)}$（实线浅蓝色）与数值拟合$Q_{ext}^{(model)}$（虚线深红色）。

如**图 2–4(c)**所示，在所有测试情境中，重建得到的消光效率光谱（深红色虚线）与合成的真实值数据（浅蓝色实线）高度吻合，证实了该反演框架具有稳健的抗散射能力。至关重要的是，重建得到的复有效介电常数，$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$（包括实部和虚部），符合物理规律、具有因果性，且不含原始消光数据中常见的几何伪影。使用基于实验组分折射率生成的合成数据，可确保拟合中的任何残差偏差均源于算法性能，而非物理样品差异。阶段 B 的这一成功验证了该框架能够可靠地提取光学建模与设计所需的内禀宽带材料常数。在广泛变化的组分、体积分数和已知混合拓扑结构下，精确恢复复有效介电常数，为后续阶段 C 的微观结构诊断提供了必要且准确的输入。

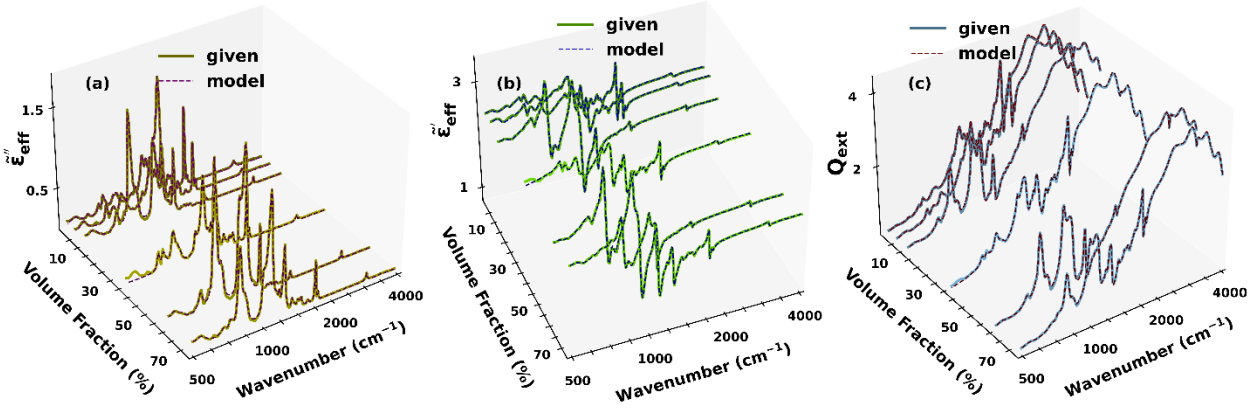


图 *2*：多组分共混物的逆向计量：反转型混合拓扑结构下的宽带有效介电常数恢复。 光谱反演结果

（阶段 B）针对六种多组分混合物（*PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS*），其体积分数分别为：40%: 10%: 5%: 15%: 20%: 10%、30%: 20%:10%: 5%:15%: 20%、5%: 5%: 65%: 5%: 5%: 15%、0%: 0%: 78%: 3%: 7%: 12%、19%:13%: 41%: 8%: 18%: 1%和16.5%:16.5%:16.5%: 16.5%:16.5%: 17.5%，并假设采用反向混合拓扑（分层/串联）。该图通过准确恢复复有效介电常数（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$）这一基本材料常数，验证了逆向重建框架的保真度。***(a)***和***(b)***分别展示了实验值（真实值）与重建得到的实部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}$）和虚部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}$）高度吻合，证实了恢复得到的介电函数符合克拉默斯-克罗尼希一致性。***(c)***展示了消光效率（$Q_{ext}^{(model)}$）的拟合结果高度吻合，证实仅凭单个光谱即可完整反演散射问题。（为便于可视化，图中数据均以聚二甲基硅氧烷的体积分数为基准绘制。）

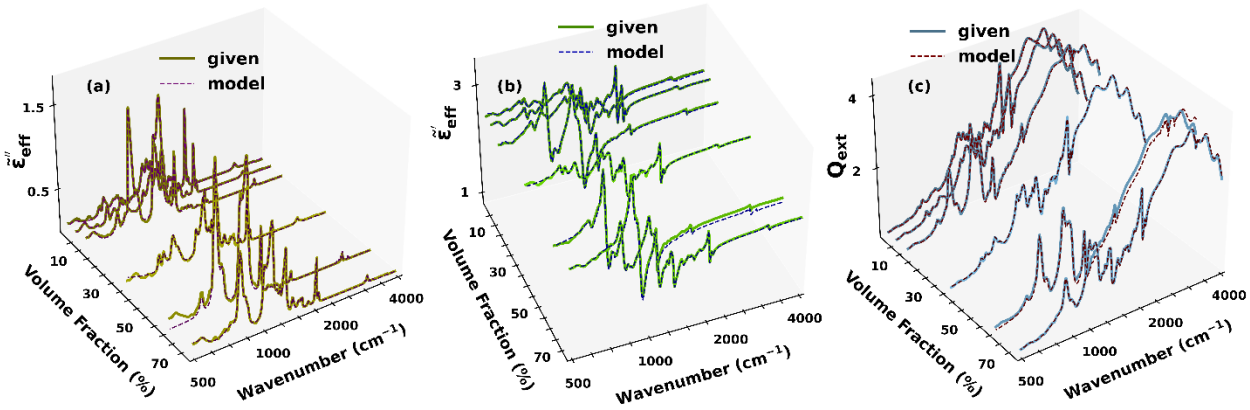


图 ***3***：多组分共混物的逆向计量学：对数混合拓扑下的宽带有效介电常数恢复。在体积分数分别为：40%：10%：5%：15%：20%：10%、30%：20%：10%：5%：15%：20%、5%：5%：65%：5%：5%：15%、0%：0%：78%：3%：7%：12%、19%：13%：41%：8%：18%：1%和16.5%：16.5%：16.5%：16.5%：16.5%：17.5%的六种多组分混合物（*PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS*）中，假设采用对数混合拓扑（统计/随机颗粒），给出了光谱反演（阶段 B）的结果。该图通过准确恢复复有效介电常数（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$）这一基本材料常数，验证了逆向重建框架的保真度。面板***(a)***和***(b)***显示了实验值（真实值）与重建的实部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}$）和虚部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}$）之间的高度一致性，证实了所恢复介电函数的克拉默斯-克罗尼希一致性。面板***(c)***显示了消光效率（$Q_{ext}^{(model)}$）的良好拟合，证实了仅凭单条光谱即可完整反演散射问题。（图中以 *PDMS* 的体积分数为横坐标进行绘制，以便于可视化。）

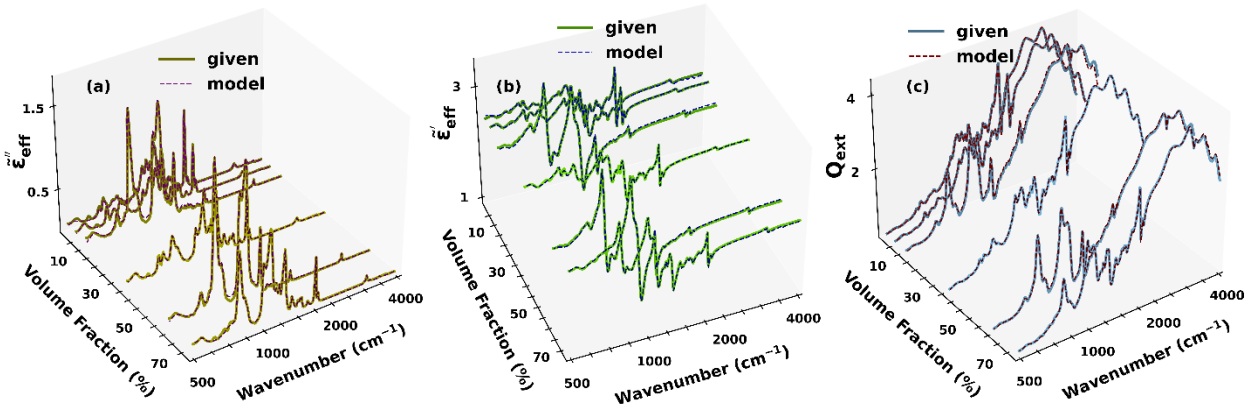


图 ***4***：多组分共混物的逆向计量：立方混合拓扑下的宽带有效介电常数恢复。 展示了六种多组分混合物（*PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS*）在以下体积分数下的光谱反演（阶段 *B*）结果：40%: 10%: 5%: 15%: 20%: 10%、30%: 20%:10%: 5%:15%: 20%、5%: 5%: 65%: 5%: 5%: 15%、0%: 0%: 78%: 3%: 7%: 12%、19%:13%: 41%: 8%: 18%: 1%和16.5%:16.5%: 16.5%:16.5%:16.5%: 17.5%，并假设采用立方型混合拓扑（共连续/对称）。该图通过展示复有效介电常数（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$）——一种基本材料常数——的准确恢复，验证了逆向重建框架的保真度。面板***(a)***和***(b)***显示实验值（真实值）与重建得到的实部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime(model)}$）和虚部（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{\prime\prime(model)}$）高度吻合，证实了恢复的介电函数满足克拉默斯-克罗尼希一致性。面板***(c)***显示消光效率（$Q_{ext}^{(model)}$）的拟合效果极佳，证实仅凭单个光谱即可完整反演散射问题。（为便于可视化，图中以 *PDMS* 的体积分数为横坐标。）

混合物解卷积（阶段C：通过拓扑比较进行微观结构诊断）

在阶段 B 成功恢复复有效介电常数（$\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$）后，应用了微观结构诊断框架（**图1**的阶段 C）。该阶段比较三种相互竞争的混合拓扑（反转型、对数型和立方型）的物理保真度，以严格确定支配共混物光学响应的主要相互作用机制。所选模型必须为混合物中的各组分生成统计稳定性最高且具有物理因果性的介电常数谱，同时准确给出各组分的体积分数。

为严格检验该框架的诊断能力，阶段 B 中恢复的 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(model)}$ 光谱分别采用反向模型、对数模型和立方模型进行独立解卷积。正如拓扑验证矩阵（**补充 表 S1** 和 **S2**）所示，在所有测试的双组分和多组分合成体系中，使残差

平方和（RSS）最小且产生最符合物理因果关系的介电常数谱的模型，始终与用于生成正向模拟数据的混合模型完全一致。这一结果并非同义反复，而是对该框架诊断保真度的决定性验证。它证明，逆过程能够严格区分各个有效介质近似模型中所蕴含的不同物理假设（拓扑结构）。例如，当输入有效介电常数 $\tilde{\epsilon}_{eff}^{(given)}$ 是基于立方型（Looyenga）拓扑结构生成时，逆框架的最小化过程明确选择了立方模型，从而正确诊断出混合组成聚合物球体中的共连续网络微观结构。相反，对反转型模型（串联／层状拓扑结构）和对数模型（统计／随机颗粒拓扑结构）的系统性排斥证实，该共混物的有效介电常数由均匀互穿所支配，而非由势垒电阻或非相互作用颗粒的纯统计平均所决定。这一拓扑诊断是重建框架的主要诊断输出。

为说明采用非线性框架的必要性，我们将其与先前工作 [32] 中使用的线性混合模型（LMM）进行了比较分析。如**补充表 S1** 和 **S2**所示，在米氏散射区应用于微结构复合材料时，LMM 得出的残差始终显著更高。从物理角度看，LMM 失效的原因在于它无法考虑散射介质固有的相移消光和局域共振位移。与本文研究的非线性拓扑结构不同，LMM 假设组分之间不存在相互作用；在强散射条件下，这一假设无法满足克拉默斯-克罗尼希一致性。因此，LMM 会得到非因果的有效介电常数重建结果，而非线性流形则能成功解混这些介电相互作用，恢复材料本征性质。

成功诊断出正确的混合拓扑结构后，我们评估了该框架的分析性能。组分定量的准确性可作为次级验证，表明所选的有效介质近似模型不仅能描述其底层物理过程，还能提供可靠的数值结果。

在双组分体系中，网格搜索与梯度下降均得到了准确且一致的结果，体积分数预测值平均偏离真实值不到~2%。PC-PDMS、PC-PET和PEI-PET的结果见**图 5**；其余混合物的重建结果汇总于**补充 表 S3**。两种算法近乎相同的输出凸显了该方法在识别组分并定量其浓度方面的可靠性——无需事先了解材料、其比例或混合规则。此外，对于多组分体系（最多六个组分），梯度下降在所有测试的混合模型中均成功识别了全部组分身份，并恢复了其体积分数（**图 6，补充表 S4**）。主导组分（如聚二甲基硅氧烷）的重建标准差低于0.5%，表明一旦拓扑已知，两阶段重建框架即使对于聚苯乙烯等低丰度组分也依然稳健，其方差仅略高。

尽管该框架旨在无需先验假设即可运行，但它可以方便地纳入关于组分身份、浓度或混合行为的部分已知信息。提供此类信息可进一步提高重建准确度并降低计算成本——尤其是在针对性诊断或材料表征工作流程中。

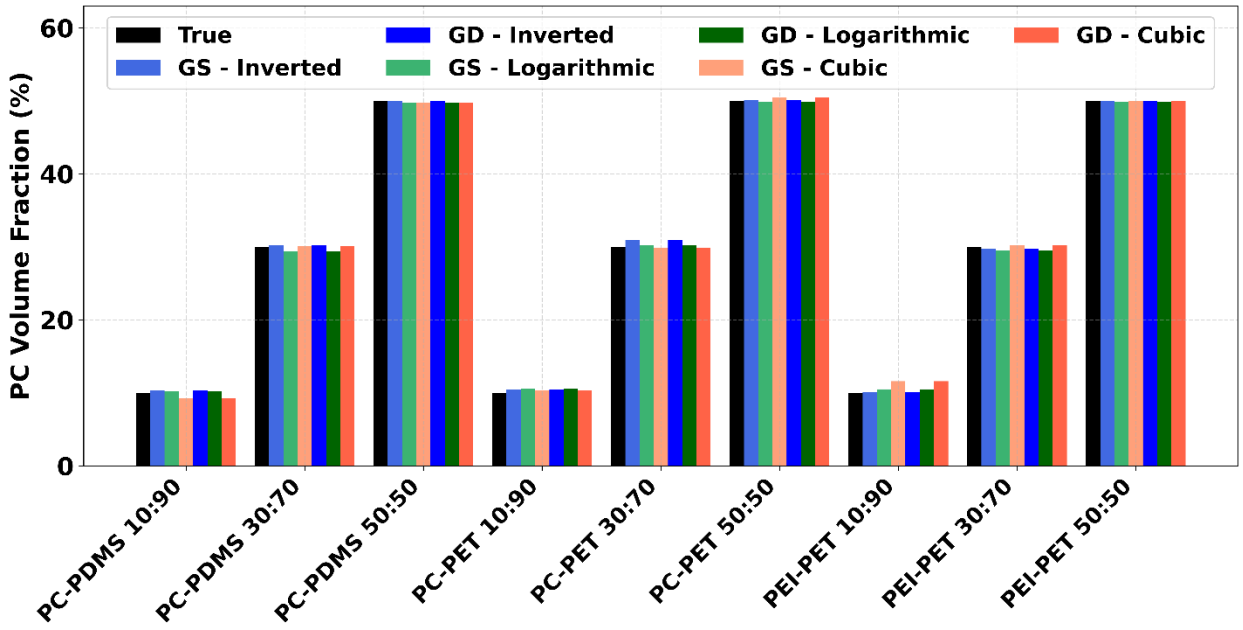


图 *5*：双组分体系分析准确度的验证。使用网格搜索（*GS*）和梯度下降（*GD*）得到的混合物解卷积结果由三种相互竞争的拓扑模型（反转型、对数型和立方型）生成，展示了双组分聚合物共混物（*PC-PDMS*、*PC-PET*和*PEI-PET*）的组分识别与体积分数恢复准确度，三种体积分数为（10%：90%，30%：70%，和 50%：50%）。所恢复体积分数一致的高准确度验证了所选、经物理诊断的混合拓扑结构的保真度。尽管所有模型的体积分数恢复均保持稳定，微观结构诊断由表***S1***中的残差平方和数值决定。

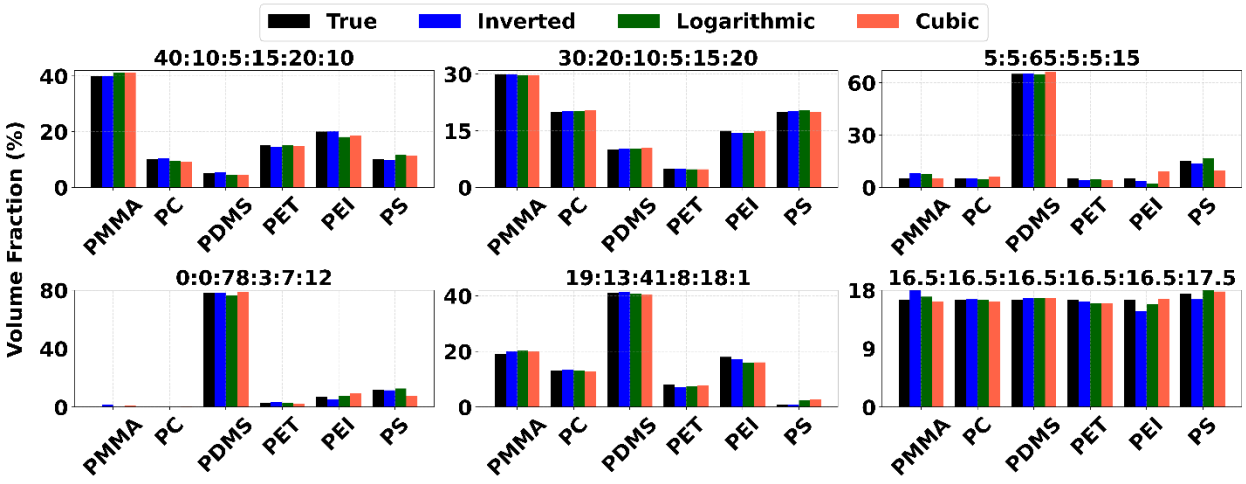


图 ***6***：多组分体系分析准确度的验证。采用梯度下降得到的混合物解卷积结果由三种相互竞争的拓扑模型（反转型、对数型和立方型）生成，展示了多组分聚合物共混物（聚甲基丙烯酸甲酯-聚碳酸酯-聚二甲基硅氧烷-聚对苯二甲酸乙二醇酯-聚醚酰亚胺-聚苯乙烯）在六组体积分数（40%:10%: 5%:15%:20%: 10%、30%:20%: 10%: 5%: 15%: 20%、5%: 5%: 65%: 5%: 5%: 15%、0%: 0%: 78%: 3%: 7%: 12%、19%:13%: 41%: 8%: 18%: 1%以及16.5%: 16.5%: 16.5%: 16.5%: 16.5%: 17.5%）下组分识别与体积分数恢复的准确度。体积分数恢复中持续较低的误差证实了重建框架在不同组成与拓扑假设下的预测准确度。尽管所有模型的体积分数恢复均保持稳定，微观结构诊断仍由表 ***S2***中的残差平方和数值决定。

对初始条件的敏感性

非线性反演算法可能对初始条件高度敏感，这给自动表征带来了重大挑战。为评估我们的反向计量框架的稳定性和可靠性，我们在随机初始条件下，对选定的二组分（30%:70% PC-PDMS）和多组分（19%: 13%: 41%: 8%: 18%: 1%聚甲基丙烯酸甲酯-聚碳酸酯-聚二甲基硅氧烷-聚对苯二甲酸乙二醇酯-聚醚酰亚胺-聚苯乙烯）混合物分别进行了2000次独立重建。该测试验证了优化景观表现良好，且无论起始点如何，框架都能得出一致的结果。

我们使用网格搜索和梯度下降算法，对三种相互竞争的混合拓扑（反转型、对数型和立方型）进行了敏感性分析（**图 S4-S6**）。在每种情况下，面板**(a)**展示网格搜索的结果，面板**(b)**展示梯度下降的结果。二组分30%: 70% PC– PDMS 混合物的预测体积分数（**图 S4-S6**）始终呈现窄幅分布，紧密聚集在真实值附近，且直方图右偏，表明其偏离正态分布。

在反演混合规则（**图 S4**）下，网格搜索预测值主要介于29%和33%之间，均值为30.7%，中位数为30.5%，众数为30.2%，标准差为0.85%。这表明重建误差约为0.7%。同一案例的梯度下降结果介于29.5%和31.5%之间，均值为30.1%，中位数为30.1%，众数为25.0%，标准差略小，为0.65%，表明精密度略有提高。在对数型混合规则（**图 S5**）下，网格搜索得到的数值介于28.5%和31%之间，均值和中位数均为29.6%，众数为29.6%，标准差为0.35%，重建误差较小，为0.4%。梯度下降算法产生了相似的结果——均值和中位数均为29.6%，众数为30.0%，标准差为0.35%——同样表明其与真实值的偏差为0.4%。在立方型混合规则（**图 S6**）下，网格搜索预测值范围为28%至31.2%，均值为29.4%，中位数和众数均为29.3%，标准差为0.41%，对应的重建误差为0.6%。梯度下降估计值介于28.5%和30.7%之间，均值和中位数均为29.3%，众数为30.0%，标准差略大，为0.70%，偏差为0.7%。

在全部三种混合规则和两种算法下，预测体积分数的均值和中位数与真实值的偏差均小于1%。具体而言，标准差始终较低，表明无论假定何种有效介质近似拓扑，优化过程都具有较高的精密度和较低的变异性。这种在根本不同的物理模型之间表现出的一致性证实，搜索算法找到的局部极小值具有很高的稳定性。

通过梯度下降得到的多组分混合物中各组分的预测体积分数，分别针对反转型、对数型和立方型混合规则，显示于**图 7-9**中。每种情况下，面板**(a)**展示了多组分混合物中所有组分的体积分数直方图概览，这些直方图在整个光谱范围内绘制于同一画框中。面板**(b)**则分别展示各个组分的体积分布，每个组分单独置于一个画框中。

对于反转型混合物相互作用（图7），体积分数的主要分布范围如下：PMMA（16.5% – 21.5%，中位数为19.6%）、PC（10% – 14%，中位数为12.3%）、PDMS（39% – 41%，中位数为40.8%）、PET（3% – 12%，中位数为7.9%）、PEI（14% – 21%，中位数为18.3%）和PS（0% – 4.5%，中位数为1.1%）。预测均值约为：PMMA 19.5%（PMMA）、PC 12.1%、PDMS 40.7%、PET 8.0%、PEI 18.0%和PS 1.4%，对应的标准差分别为1.0%、0.8%、0.4%、1.5%、1.2%和1.0%。在对数型相互作用下（图8），体积分数范围相近：PMMA（16.5 – 24%，中位数为21.5%）、PC（10% – 14%，中位数为12.0%）、PDMS（39.5% – 42%，中位数为40.8%）、PET（6% – 11%，中位数为8.1%）、PEI（13% – 20%，中位数为16.6%）和PS（0% – 5%，中位数为1.7%）。对应的均值为PMMA 21.1%、PC 11.9%、PDMS 40.8%、PET 8.3%、PEI 16.7%和PS 1.8%，标准差分别为1.7%、0.8%、0.4%、1.0%、1.3%和1.2%。立方混合规则的结果（图9）显示出几乎相同的范围：PMMA（16.5% – 24%，中位数为20.6%）、PC（10% – 14%，中位数为12.1%）、PDMS（39.5% – 42%，中位数为40.7%）、PET（6% – 11%，中位数为8.0%）、PEI（13% – 20%，中位数为16.8%）和PS（0% – 5%，中位数为1.9%）。预测均值为PMMA 21.0%、PC 11.9%、PDMS 40.8%、PET 8.2%、PEI 16.8%和PS 2%，标准差分别为1.9%、0.8%、0.5%、1.0%、1.4%和1.2%。

我们从这项多组分稳定性分析中得出两项关键推论：**1)**拓扑不敏感性和**2)**高稳健性/稳定性。首先，对数模型和立方模型预测的体积分数范围、均值和中位数非常相似，与反演规则所得结果仅有细微差异。这表明整个计量方法具有稳健性，即无论假设何种具体混合拓扑结构，梯度下降算法都能持续给出准确预测。这一结果有力地增强了阶段C所进行的拓扑诊断的可靠性。其次，所有混合规则下，含量最高的组分聚二甲基硅氧烷的重建结果都高度稳定（重建体积分数~ 40.7% – 40.8%），且变异性最低（标准差~ 0.4% – 0.5%）。相比之下，变异性最大的是聚苯乙烯，它在混合物中的占比最低。聚苯乙烯的标准差相对于其均值较大，这凸显了分辨浓度极低的组分所面临的固有物理限制；鉴于微量组分的光谱特征极弱，这一结果也在预料之中。

这些结果证实，优化景观足够平滑且表现良好，进一步表明该重建框架适用于实际光学材料表征中的自动化反演建模和微观结构诊断。然而，对于复杂得多的系统——例如组分数量更多、光谱重叠严重或信噪比较低的混合物——我们承认，对初始条件的敏感性可能会更加显著。尽管如此，本研究开发的方法仍广泛适用于各类介电材料。大多数介电材料在红外区域都具有特征吸收特征；虽然峰位和峰宽可能有所不同，但其红外光谱的总体结构往往遵循相似的振动模式[28]。因此，该方法可稳健地推广至各种在红外区域具有强吸收特征的介电材料。

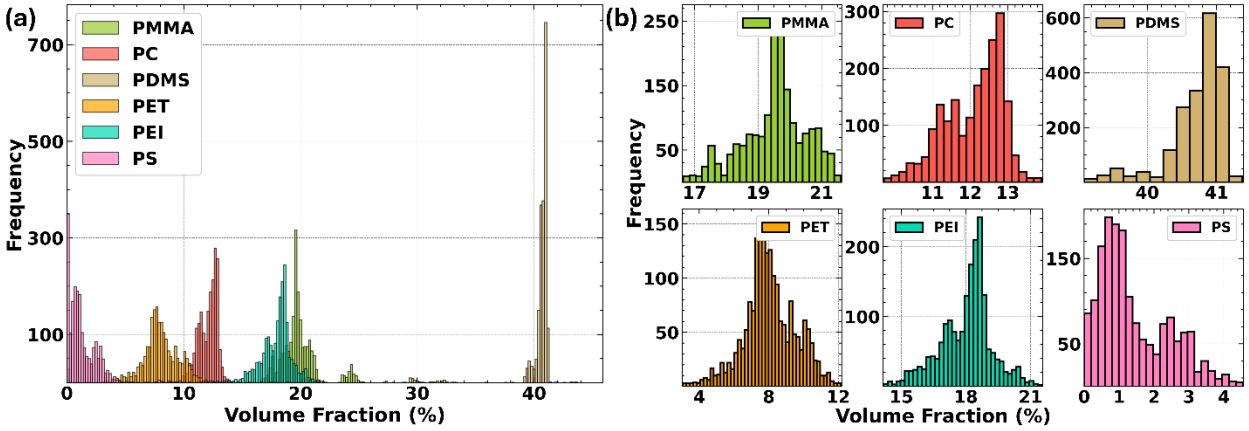


图*7*: 反向混合拓扑下的算法稳定性与精度。采用梯度下降，对多组分混合物（19%:13%:41%:8%:18%:1% 聚甲基丙烯酸甲酯 - 聚碳酸酯 - 聚二甲基硅氧烷 - 聚对苯二甲酸乙二醇酯-聚醚酰亚胺-聚苯乙烯）在2000组随机初始条件下进行敏感性研究所得的结果。体积分数重建采用反演混合规则（对应分层/串联拓扑）。面板***(a)***展示了整个体积分数范围内所有组分的合并直方图，面板***(b)***则在单独的框中展示各组分的分布。

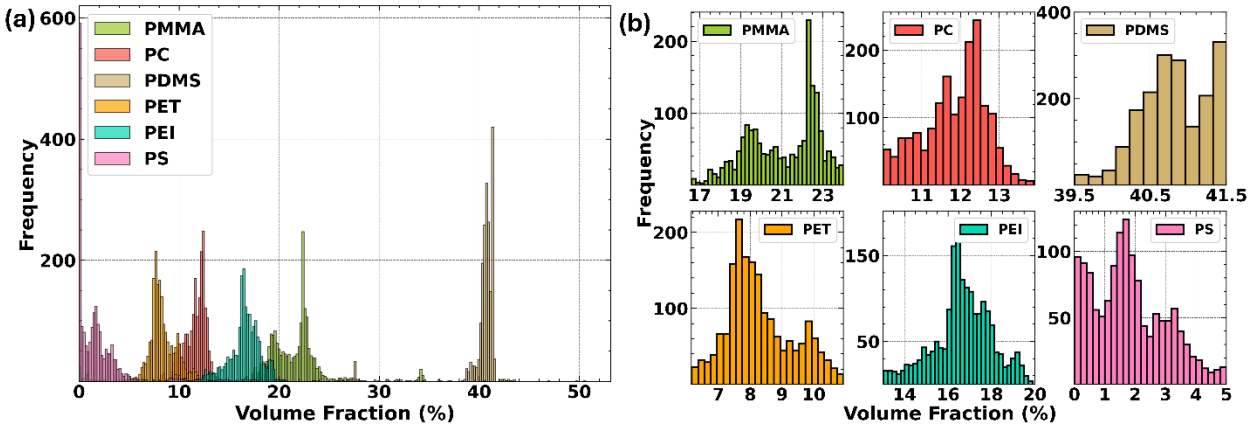


图 ***8***： 对数混合拓扑下的算法稳定性与精度。采用梯度下降法，在 2000 个随机初始条件下，对多组分混合物（19%:13%: 41%: 8%: 18%: 1% *PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS*）进行敏感性研究所得的结果。体积分数重建采用对数混合规则（代表统计／随机颗粒拓扑）。面板 ***(a)*** 展示了所有组分在完整体积分数光谱范围内的组合直方图，面板 ***(b)*** 则展示了分别置于不同框架中的各组分分布。

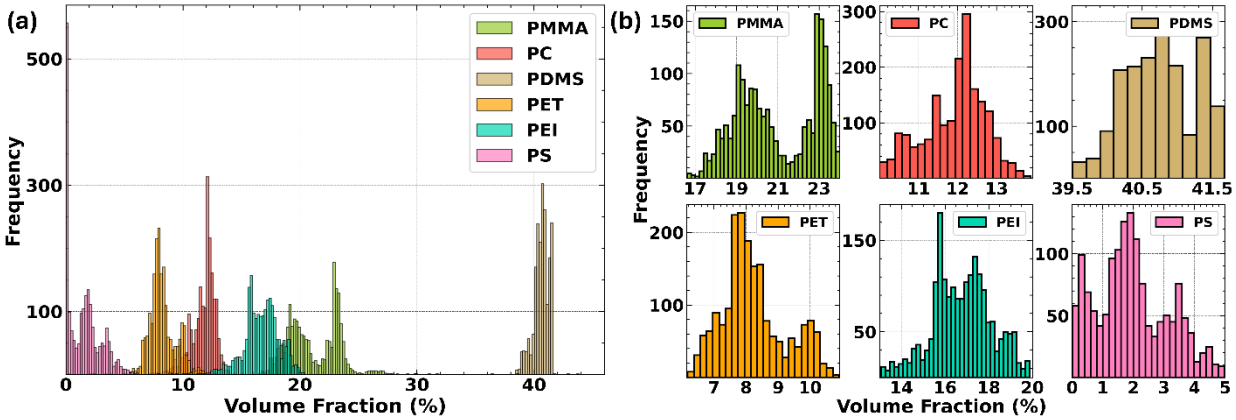


图 ***9***： 立方混合拓扑下的算法稳定性与精度。采用梯度下降法，在 2000 个随机初始条件下，对多组分混合物（19%: 13%:41%: 8%: 18%: 1%*PMMA-PC-PDMS-PET-PEI-PS*）进行敏感性研究所得的结果。体积分数重建采用立方混合规则（代表共连续网络拓扑）。面板 ***(a)*** 展示了所有组分在完整体积分数光谱范围内的组合直方图，面板 ***(b)*** 则展示了分别置于不同框架中的各组分分布。

讨论

结果表明，所提出的逆向重建框架仅凭单条红外消光光谱，便能可靠地建立逆向计量标准，同时恢复非线性混合物的宽带复有效介电常数和组分层级信息。该方法能够在不同组成的样品中稳定地恢复有效材料常数（阶段 B），并进一步进行微观结构诊断（阶段 C），这验证了其在表征先进光学复合材料方面的普适性。

在模拟混合物中，即使存在显著的光谱重叠和非线性混合，该算法仍能准确推断组分的数量、种类及其体积分数。尤为重要的是，框架能够正确重建已知的正向混合模型（例如，将立方逆模型与立方型输入数据相匹配），这有力地验证了其诊断能力。在反转型、对数型和立方混合规则下，该框架均保持了精密度，凸显了其区分不同物理相互作用拓扑结构（分别为分层/串联、统计/随机颗粒和共连续网络）的能力。此外，重建结果在

随机初始化下仍高度稳定，表明其优化景观表现良好，适用于自动化无监督计量学。

该框架的一项显著优势是，无需预先了解组分数量或混合模型即可启动重建。相反，算法会自动推断组成成分的身份和相互作用模型。该框架通过同时比较多个相互竞争的有效介质近似拓扑的残差，并施加物理约束（例如体积分数之和为 1，以及复介电常数满足因果关系）来实现这一点。这种方法能够无损地对材料内部微观结构进行光学诊断——这对于理性材料设计至关重要，但无法通过常规光谱学获取。不同于峰拟合 [26], 比尔-朗伯分析 [12], 或无监督机器学习 [61], 等传统方法，我们的方法以介电理论为基础，能够提供具有物理可解释性的结果（复有效介电常数和有效介质近似拓扑），因此非常适用于组成未知或高度可变的诊断和材料应用。

然而，该框架也存在局限性。当前实现依赖球形几何和各向同性散射的假设（由米氏理论严格定义），这限制了其直接应用于需要采用其他几何正向模型的样品。此外，正如敏感性分析所示，对于低丰度组分，其微弱的光谱信号会被强吸收物种掩盖，因此体积分数估计的准确性会降低。这些挑战自然引出了若干拓展方向，包括支持其他正向模型，例如用于分层介质的模型（如基于菲涅耳公式的模型）或用于各向异性散射体的模型。整合稀疏框架或压缩感知框架也可能有助于提高低丰度组分的定量能力，并进一步提升计算效率。

该算法的性能随混合物复杂度呈次线性增长。由于红外光谱特征具有稀疏性，增加组分数量只会使所需基组略有扩展。计算复杂度主要由混合物解卷积阶段（阶段C）中稳健的基于梯度的优化所决定；即使在六组分的情况下，该方法也表现良好，能够避免局部极小值，且对初始化不敏感。相比之下，网格搜索方法因参数空间维数较高而难以扩展，但为确保验证的完整性，仍予以保留。重建通常需要5至20分钟（在配备16 GB随机存取存储器的标准台式计算机上，例如 Intel i5-6500U CPU），在研究和原型开发中兼顾了准确性与计算效率。

总之，本研究建立了一种用于复杂复合材料逆向计量的物理引导的逆向重建方法。通过成功解析本征有效介电常数和潜在的微观结构拓扑，该框架提供了必要且具有物理依据的数据，使研究能够从经验观察转向非线性光学材料的理性设计与定量表征。

结论

本研究为复杂异质光学材料的表征建立了新的逆向计量标准。我们提出了一种物理引导的逆向重建框架，能够直接从单个红外消光光谱中成功提取非线性散射混合物的宽带复有效介电常数和组分构成。

通过整合严谨的米氏散射理论、符合色散关系的洛伦兹振子模型，以及一套广义的非线性介电混合规则（有效介质近似），该两阶段方法实现了全面表征：既能恢复有效介质的色散特性、确定其组成成分的种类及体积分数，还能关键性地对材料内在的微观结构拓扑进行无损诊断。

该框架在涵盖反转型、对数型和立方型混合机制的大型合成聚合物混合物矩阵上得到了严格验证。最佳拟合有效介质近似与已知正向模型之间的系统性一致，为该方法能够可靠区分不同物理拓扑结构（层状、随机颗粒和共连续）提供了确凿证明。这种拓扑诊断是该方法一项核心且新颖的输出，使材料科学家能够将制备参数直接关联到观测到的宏观光学功能。

不同于依赖校准、峰拟合或假定线性的传统光谱分析方法，该方法完全基于物理学原理，与模型保持一致且具有高度可解释性，无需预先了解混合物组分或其相互作用机制。通过同时提供用于正向设计应用的抗散射有效介电常数和基于物理学原理的微观结构诊断，该框架为定量高光谱成像、软物质表征以及功能性光子复合材料的理性设计提供了计算基础，从而确立了一种可推广的方法，用于对复杂非均质系统进行高精密度的光学分析。

作者贡献

P.A. 独立构思了该项目，实施了计算方法，完成了所有模拟，并撰写了手稿。

资金支持

本研究未获得外部资金支持。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

数据可用性

本研究使用的所有数据均来自可自由获取的公开来源（如适用，详见参考文献）。计算框架依赖于开源 Python 软件包 PyMieScatt[56], ，所有分析均可使用该软件复现。补充信息中提供了复现结果的详细分步说明。

参考文献

[1] G. Lantz、M. Studniarek、J. Kalilainen、F. Rager、O. Sologubenko、M. Bator 和 C. B. Doiron，《氟代酮 C5F10O 与空气混合物在冷却至露点以下时的介电耐受性》，《*IEEE*电介质与电气绝缘学报》，第 30 卷，第 90–96 页，2023 年。

[2] H. H. Lowry，《混合物介电常数的意义》，《富兰克林研究所期刊》，第 203 卷，第 3 期，第 413–439 页，1927 年。

[3] J. D. González-Teruel、S. B. Jones、F. Soto-Valles、R. Torres-Sánchez、I. Lebron、S. P. Friedman 和 D. A. Robinson，《介电谱及混合模型在描述黏土矿物和黏质土壤介电弛豫中的应用》，《传感器》，第 20 卷，第 22 期，文章编号 6678，2020 年。

[4] A. Szypłowska、A. Lewandowski、S. Yagihara、H. Saito、K. Furuhata、J. Szerement、M. Kafarski、A. Wilczek、J. Majcher、A. Woszczyk 和 W. Skierucha，“用于测定有机质含量可变土壤水分的介电模型”，《土壤学》，第 401 卷，页码 115288，2021 年。

[5] J. Sun 和 J. Zhou，“超材料：材料科学中的艺术”，《工程》，第 44 卷，第 145-161 页，2025 年。

[6] M. Javaid、A. Haleem、S. Rab、R. P. Singh 和 R. Suman，“日常生活中的传感器：综述”，《国际传感器》，第 2 卷，页码 100121，2021 年。

[7] R. Bhargava，《红外光谱成像：下一代》，《应用光谱学》，第66卷，第10期，第1091-1120页，2012年。

[8] A. J. Schofield、R. Blümel、A. Kohler、R. Lukacs 和 C. J. Hirschmugl，“通过将吸收带建模为法诺共振，在红外显微光谱中提取纯吸光度光谱”，《化学物理学杂志》，第150卷，第15期，第154124页，2019年。[9] A. V. Mitrofanov、A. A. Voronin、D. A. Sidorov-Biryukov、A. Pugžlys、E. A. Stepanov、G. Andriukaitis、T. Flöry、S. Ališauskas、A. B. Fedotov、A. Baltuška 和 A. M. Zheltikov，“大气中的中红外激光丝”，《科学报告》，第5卷，第8368页，2015年。[10] D. J. Griffiths，《电动力学导论》，新泽西州萨德尔河上游：普伦蒂斯·霍尔，1999年。[11] J. H. Solheim、E. Gunko、D. Petersen、F. Großerüschkamp、K. Gerwert 和 A. Kohler，“用于细胞和组织红外显微光谱的米氏消光扩展乘法信号校正开源代码”，《生物光子学杂志》，第12卷，第8期，2019年。[12] D. L. Pavia、J. R. Vyvyan、G. S. Kriz 和 J. R. Vyvyan，《光谱学导论》，第5版，马萨诸塞州波士顿：圣智学习，2015年。[13] G. R. Chatwal 和 S. K. Anand，《化学仪器分析方法》，孟买：喜马拉雅出版社，2019年。[14] R. M. Silverstein 和 G. C. Bassler，《有机化合物的光谱鉴定》，新泽西州霍博肯：John Wiley & Sons，1963年。[15] T. Ray 和 B. Murray，“荒漠植被中的非线性光谱混合”，*Remote Sensing Environment*，第55卷，第59-64页，1996年。[16] J. P. Combe、P. Launeau、V. Carrere、D. Despan、V. Mleder、L. Barille 和 C. Sotin，“通过可见光-红外高光谱图像的非线性反演绘制底栖微藻生物量分布图”，*Remote Sensing Environment*，第98卷，第4期，第371-387页，2005年。[17] W. Liu 和 E. Y. Wu，“非线性混合模型的比较：亚像元分类”，*Remote Sensing Environment*，第18卷，第2期，第145-154页，2005年。[18] K. Arai，“基于蒙特卡罗模拟的遥感卫星图像混合像元非线性混合模型”，《空间研究进展》，第41卷，第11期，第1715-1723页，2008年。

[19] W. Fan、B. Hu、J. Miller 和 M. Li，“一种新型非线性模型与常见线性模型在实验室模拟森林高光谱数据分析中的比较研究”，*International Journal of Remote Sensing*，第 30 卷，第 11 期，第 2951–2962 页，2009 年。[20] B. Somers、K. Cools、S. Delalieux、J. Stuckens、D. V. der Zande、W. W. Verstraeten 和 P. Coppin，“用于果园树木覆盖度估算的非线性高光谱混合分析”，*Remote Sensing Environment*，第 13 卷，第 1183–1193 页，2009 年。[21] N. Keshava 和 J. F. Mustard，“光谱解混”，*IEEE Signal Processing Magazine*，第 19 卷，第 1 期，第 44–57 页，2002 年。

[22] J. M. Bioucas-Dias、A. Plaza、N. Dobigeon、M. Parente、Q. Du、P. Gader 和 J. Chanussot，《高光谱解混综述：几何、统计和基于稀疏回归的方法》，*IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*，第 5 卷，第 2 期，第 354-379 页，2012 年。

[23] R. N. Clark 和 T. L. Roush，《反射光谱学：遥感应用中的定量分析技术》，*Journal of Geophysical Research*，第 89 卷，第 7 期，第 6329-6340 页，1984 年。

[24] R. B. Singer 和 T. B. McCord，《火星：明亮与暗色表面材料的大尺度混合及其对光谱反射率分析的影响》，载于第十届月球与行星科学会议论文集，休斯敦，1979 年。

[25] P. C. Sousa、J. Carneiro、R. Vaz、A. Cerejo、. F. T. Pinho、M. A. Alves 和 M. S. N. Oliveira，《大振幅振荡剪切下全血的剪切黏度与非线性行为》，*Biorheology*，第50卷，第269–282页，2013年。

[26] B. C. Smith，《红外光谱解释：系统方法》，佛罗里达州博卡拉顿：CRC出版社，1998年。

[27] R. A. Meyers，《分析化学百科全书：应用、理论与仪器》，第1版，奇切斯特、纽约：John Wiley & Sons，2000年。

[28] A. T. Odularu，《红外光谱学在样品表征中的重要意义及基于红外光谱学的同步辐射概念》，*Journal of Spectroscopy*，第2020卷，第1期，第11页，2020年。

[29] B. Lavine、J. Almirall、C. Muehlethaler、C. Neumann 和 J. Workman，《红外光谱比较标准——法医与分析化学文献综述》，*Forensic Chemistry*，第 18 卷，页码 100224，2020。

[30] P. R. Griffiths 和 J. A. D. Haseth，《傅里叶变换红外光谱法》，第 2 版，霍博肯，新泽西州：John Wiley & Sons，2007 年。[31] L. Harper、J. Powell 和 E. M. Pijl，《法医药物检测方法概述及其对减害即时检测服务的适用性》，《减害杂志》，第 14 卷，第 1 期，第 1-13 页，2017 年。[32] 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卷积》，《分析化学》，2025 年。[33] P. N. Akbar 和 R. Blümel，《模型细胞的逆向重建：通过红外光谱细胞学提取结构与分子信息》，*PLOS ONE*

，

第 20 卷，第 0320697 页，2025 年。[34] Y. I. K. d. S. Hennadige、P. N. Akbar 和 R. Blümel，《空间分辨化学信息》，《科学报告》，第 13 卷，第 557 页，2023 年。

[35] R. Simpkin，《由麦克斯韦方程组推导 Lichtenecker 对数混合公式》，《*IEEE* 微波理论与技术汇刊》，第 58 卷，第 3 期，第 545–550 页，2010 年。

[36] K. Lichtenecker，《混合物的介电常数》，《物理学杂志》，第 27 卷，第 115–158 页，1926 年。

[37] A. Sihvola，《电磁混合公式及其应用》；IEE 电磁波系列 47，伦敦：电气工程师学会，1999 年。[38] R. Landauer，《非均匀介质中的电导率》，《美国物理联合会会议论文集》，第 40 卷，第 2–45 页，1978 年。[39] H. Looyenga，《非均匀混合物的介电常数》，《物理学》，第 31 卷，第 401–406 页，1965 年。[40] O. Wiener，《稳态流动场的混合物理论》，莱比锡皇家萨克森科学学会数学—物理学分会论文集，第 32 卷，第 509–604 页，1912 年。[41] O. Wiener，《论混合物理论》，《物理学杂志》，第 5 卷，第 332–339 页，1904 年。

[42] K. Lichtenecker，《天然和人造混合物的介电常数》，《物理学杂志》，第 27 卷，第 115–118 页，1926 年。[43] H. C. van de Hulst，《小粒子的光散射》，纽约州米尼奥拉：多佛出版社，1981 年。[44] K. C. Dale，《光学性质虚部的曲线拟合：因果关系对线形的限制》，《分子光谱学杂志》，第 205 卷，第 2 期，第 261–268 页，2001 年。[45] B. Chu、X. Zhou、R. Kailiang、N. Bret、M. Lin、Q. Wang、F. Bauer 和 Q. M. Zhang，《具有高电能量密度和快速放电速度的介电聚合物》，《科学》，第 313 卷，第 334–336 页，2006 年。[46] L. Zhu 和 Q. Wang，《用于高能量密度和低损耗的**新型铁电聚合物

s

介电材料，《大分子》第 45 卷，第 7 期，第 2937-2954 页，2012 年。[47] Y. Wang、X. Zhou、Q. Chen、B. J. Chu 和 Q. M. Zhang，“用于介电电容器的高能量密度聚合物最新进展”，《*IEEE*电介质与电气绝缘学报》第 17 卷，第 4 期，第 1036–1042 页，2010 年。[48] S. Bertolazzi、J. Wünsche、F. Cicoira 和 C. Santato，“采用聚合物栅介质的并四苯薄膜晶体管”，《应用物理快报》第 99 卷，第 1 期，第 013301–013303 页，2011 年。[49] H. S. Nalwa，《高低介电常数材料及其应用手册》，学术出版社，第 2 卷，1999 年。[50] 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学”，《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。[51] 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。[52] S. Hamouni、O. Arous、D. Abdessemed、G. Nezzal 和 B. V. d. Bruggen，“利用渗透汽化过程萃取醇和烷烃”，《大分子研讨会论文集》第 386 卷，第 1 期，2019 年。

[53] B. K. Chen、C. T. Su、M. C. Tseng 和 S. Y. Tsay，“制备具有改进热学、机械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。

[54] J. Fu、Y. Xu 和 Q. Li，“不同粒径聚苯乙烯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，页码 3088-3093，2010 年。

[55] S. Dirlikov 和 J. L. Koenig，“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，页码 551-555，1979 年。

[56] J. D. D. Smith，“PyMieScatt：Python 米氏散射软件包”，2017 年。[在线]。获取地址：https://github.com/bsmpg/PyMieScatt。

[57] T. L. Myers、R. G. Tonkyn、T. O. Danby、M. S. Taubman、. B. E. Bernacki、J. C. Birnbaum、S. W. Sharpe 和 T. J. Johnson，“用于光学建模和检测的 57 种无机及有机液体的光学常数 n 和 k 的精确测量”，《应用光谱学》，第 72 卷，第 4 期，页码 535-550，2018 年。

[58] C. Mätzler，《米氏散射和吸收的 MATLAB 函数，第 2 版》，研究报告第 2002-11 号，2002 年。

[59] M. Feurer 和 F. Hutter，《自动化机器学习：方法、系统与挑战》，瑞士沙姆：Springer Link，2019 年。

[60] S. Boyd 和 L. Vandenberghe，《凸优化》，剑桥：剑桥大学出版社，2004 年。

[61] P. Mishra、A. Biancolillo、J. M. Roger、F. Marini、A. Nordon 和 D. N. Rutledge，“基于集成学习的振动光谱数据预处理新趋势”，《分析化学趋势》，第 131 卷，第 116019 页，2020 年。

[62] B. C. Smith，“光谱扣除”，《光谱学》，第 36 卷，第 5 期，第 14-19 页，2021 年。

[63] D. J. Rowe、D. Smith 和 J. S. Wilkinson，“中红外波段全血及抗凝剂、镇痛剂和缓冲液水溶液的复折射率光谱”，《科学报告》，第 7 卷，第 7356 页，2017 年。