给定各向同性复合材料介电常数的反微观力学问题：球形夹杂

Athindra Pavan[1], Swaroop Darbha[2], 和 Bj¨orn Birgisson[1,3]

[1]佐治亚大学工程学院环境、土木、农业与机械工程学院，200 DW Brooks Drive，雅典，GA 30602，美国[2]德克萨斯农工大学机械工程系，美国德克萨斯州大学城[3]纳扎尔巴耶夫大学教务长办公室，53 Kabanbay batyr Ave.，010000，哈萨克斯坦阿斯塔纳

arXiv:2603.05460v1 [math.OC] 5 Mar 2026

2026年3月6日

摘要

本文介绍凸优化作为研究基于 Eshelby 的反微观力学问题的一种有前景的工具。本文重点研究基于 Eshelby-Mori-Tanaka模型的反微观力学问题，已知复合材料及其所有组分的介电常数时进行求解。对于电导率性质，该模型也完全相同。选择这一模型，是因为它相当简单，而且对于球状夹杂也有闭式解析解。正向微观力学问题是指已知复合材料组分的性质和微观结构信息，确定其有效性质。本文关注各向同性复合材料，并假定夹杂物的分布满足各向同性条件。本文所讨论的反微观力学问题，是已知复合材料及其所有组分的性质，确定其微观结构信息。由于本文仅考虑复合材料的各向同性以及球形夹杂，目标仅是确定复合材料各组分的体积分数。该逆问题被表述为线性规划问题并予以求解。在此之前，本文从凸优化的角度考察了该逆问题及其若干重要变体。最后，本文展示了关于色散材料、测量噪声与所得体积分配质量之间关系的若干有前景的结果，并讨论了凸优化在反微观力学中的应用范围。

0 符号说明

- 粗体小写字母（希腊字母或其他字母）表示向量。例如，本文中的主要向量为 $\boldsymbol{\phi}$。

- 标量用下标标记，如 t_k 等。向量和矩阵用上标标记，以便下标可用于表示对象的各个元素。因此，$\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}$ 是一个向量，而 ϕ_i^S 是该向量的第 i个元素。

- $\mathbf{1}^{\boldsymbol{n}}$ 是一个由 n 1组成的向量， $\boldsymbol{I}^{\boldsymbol{n}}$ 是 $\mathbb{R}^{n\times n}$中的单位矩阵。Boyd的教材 [1] 中用于表示一个由 1 构成的向量与另一个向量‘a’的点积再加上标量‘b’这一求和的记法 $\left(1^{\top}a+b\right)$ 并未采用。向量和标量使用非粗体字符会造成歧义。因此，这里改用（$\mathbf{1}^{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{a}+b$）。

1 引言

细观力学自 1880 年起便成为研究课题，Ernst Gustav Kirsch 等许多研究人员都曾对此进行研究。本文以 Maxwell 关于均匀介质中椭球体在均匀外场作用下产生均匀内部场的研究[2] 为出发点。Stratton 的教材 [3] 于 1941 年首次出版，其中以更直接适用于复合材料研究的方式给出了相同的结果。这些结果用于介电常数细观力学问题。线弹性细观力学问题中与之相对应的结果是 Eshelby 的研究 [4]：当系统在无穷远处受载时，嵌入无限基体中的椭球形非均匀体内部的应力场和应变场是均匀的。此后，这些结果被用于发展多种均匀化（或平均场平均或细观力学）模型。此类模型包括 Mori-Tanaka（M-T）模型和自洽方案（SCS）等（详见 [5], [6], [7], 等）。由于细观力学领域常将这一结果称为 Eshelby-Mori-Tanaka 模型或 Mori-Tanaka-Benveniste 模型，本文将采用这一名称。本研究聚焦于使用 Eshelby-Mori-Tanaka 模型的细观力学逆问题。对于介电常数问题，本文采用 [8]中针对热导率提出的 Eshelby-Mori-Tanaka 模型表述。这一问题表述同样适用于介电常数问题（见 [7]）。正问题（或前向问题）是在已知复合材料组分的性质和微观结构信息（体积分数、夹杂形状和取向、概率密度函数等）的情况下，确定复合材料有效性质的问题。本研究所探讨的逆问题则是在已知复合材料有效性质及所有组分性质的情况下，确定微观结构信息。逆问题的其他变体也已有研究。

本文研究的复合材料，其所有组分都是各向同性、均匀的线性材料（性质呈线性）。此外，该复合材料的微观结构由大量球形夹杂物构成，且这些夹杂物的分布方式使得整个复合材料可以作为具有线性行为的各向同性连续体来研究。这称为统计各向同性， [9]对此进行了详细讨论。如果不作此假设，则研究中必须指定夹杂物材料的概率密度函数（PDF）。这会增加一层复杂性，本文不予探讨。本文采用的 Eshelby-Mori-Tanaka模型应用于一般复合材料时，已知存在可实现性问题， [10], [11],等文献对此进行了讨论。可实现性有两种定义：（1）有效性质符合 Hashin-Shtrikman 界限， [12], ；或（2）所考虑的体积参数对应于定义明确的真实微观结构。对于本文讨论的情况（含球形夹杂的各向同性复合材料），这些都不是问题。具体而言，这是因为本文聚焦于反微观力学，并利用真实介电常数测量来确定体积参数。

反向微观力学问题与等效微观结构的概念相互关联，研究起来颇具挑战性。反微观力学问题有多个版本可供研究。在 [13] 中，例如，已知非均质体的微观结构和体积分数，并使用进化算法确定组分材料的性质。 [14] 研究了反热导率微观力学问题，并求解一个概率密度函数（PDF），该函数描述了各向同性随机非均质材料的微观结构；这种材料的有效性质和组分材料性质均已知。 [14]假设存在无穷多个扁球形形状，其半轴长宽比位于区间(0,1)内。在 [15] 中，他们研究了仅由扁球形夹杂构成的各向同性复合材料的等效微观结构。他们表明，等效微观结构与非均质体的性质无关，而取决于组分的体积分数。在 [16], 中可以看到，对于各向同性复合材料，可以用一种“平均椭球形状”替代形状各异（长宽比不同）的椭球夹杂。这意味着，具有随机取向的相同椭球夹杂、且夹杂形状为这种“平均形状”的微观结构，其有效性质与原始的、含有形状各异的椭球夹杂的微观结构相同。在[16], 中还表明，对于含有任意形状夹杂的各向同性双组分复合材料，可以构造一种等效微观结构，以随机取向的相同椭球夹杂取代原有夹杂。为确定微观结构参数以解决各种反问题，模拟退火（SA）已得到广泛应用（例如[17], [18], [19], [20], [21], [22], [23], ）。这些进化算法

需要消耗大量计算能力。凸优化是一种强大的数学工具，与模拟退火、差分进化等纯计算方法相比，它能更快地求解优化问题。然而，要使用这一工具，问题必须具备特定的结构。本文展示了若干具有所需结构的问题表述，可用于运用这一强大工具。正如本段前面所引述的[24], [16], [15], 等分析性论文为数不多，在反微观力学领域仍有很大的研究空间。

反微观力学领域已有大量研究，但像本文这样利用凸优化来构建优化问题，以求解体积分配的方法却不多。[25], [26], 和 [27] 是运用经典细观力学方法的例子，例如分析偏微分方程以及使用平移法（见 [28]），根据已知的材料性质信息（复合材料及其组分的材料性质）推导夹杂物体积分数的界限。这些方法没有利用 Eshelby结果 [4] 提供的形状信息，而本文则利用了这一信息。

凸优化是数学的一个基础分支，线性规划问题、二次规划问题、最小二乘问题等常见研究问题都属于这一分支。该领域旨在刻画并求解优化问题。运用凸优化时面临的最大挑战，是证明所研究的问题确实属于凸优化问题。不过，对于具有球形夹杂且呈各向同性的 Eshelby-Mori-Tanaka 模型，这一点非常简单。读者可参阅 [1] ，深入了解凸优化的相关概念。

据作者所知，凸优化尚未以本文所介绍的方式应用于基于 Eshelby 的逆微观力学领域。本文利用凸优化，基于 Eshelby-Mori-Tanaka 平均场平均模型，针对复合材料系统的复介电常数构建逆微观力学问题。Eshelby结果的应用利用了基于形状的信息。本研究不同于经典细观力学，其目标是确定实际的体积分配，而非 [27], [26], 和 [25]所给出的界限。本文针对已知复合材料及其组分的复介电常数测量，提出了最终的问题表述；该方法有望用于确定复合材料中各位置的体积分配。该问题严格来说仅适用于含球形夹杂的复合材料。然而，正如第8节所讨论的，借助等效微观结构，应该可以对其进行扩展。考虑包含一般椭球体的、更复杂的微观结构，还可以构建适用范围更广、性能更好的优化问题。目前，允许噪声水平较低，但本研究凸显了材料体系中各组分的色散强度在确定体积分配方面的作用。可以对该问题进行修改，将已知的有关所研究系统的其他物理信息纳入其中，从而降低对各组分色散强度的依赖。

第2节简要介绍正问题的理论背景。第3节将逆问题表述为优化问题。第4节对该优化问题进行描述。第5节探讨了所提出优化问题若干变体的解析解。第6节讨论了该优化问题的两种表述方式，其中第6.2节是针对本文所研究的复合材料系统类别而提出的最终优化问题。第7节介绍了所提出的优化问题在三种不同材料体系中的应用。由于仅使用所有组分材料及复合材料本身的介电常数，应用结果表明，为确保预测的体积分配准确，复合材料系统中需要含有强色散组分。如果无法获得介电常数信息，也可以纳入其他可用的物理约束。本节讨论了约束灵敏度矩阵(G)的秩和最小奇异值要求，以帮助研究人员和工程师针对具体应用构建合适的优化问题。第8节简要讨论了具有复杂微观结构的材料体系的等效微观结构。最后，第9节总结并讨论了所有所得结果。

2 理论背景

用于计算由 n个组分构成、组分各向同性且含有随机取向球状夹杂的复合材料的有效介电常数($\tilde{\varepsilon}$)的Eshelby-Mori-Tanaka模型如下：

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}\left(\phi_i \varepsilon_i \tilde{\boldsymbol{R}}^i\right)}{\sum_{i=0}^{n-1}\left(\phi_i \tilde{\boldsymbol{R}}^i\right)}; \quad R_i = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{3}\left[1 + A^i_{jj}\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{\varepsilon_0}\right]^{-1}; \quad \tilde{\boldsymbol{R}}^i = R_i \boldsymbol{I} \tag{1}$$

其中，与 i^{th} 夹杂材料相关的量如下：

- $\boldsymbol{R}^i$ 是浓度张量。
- $\boldsymbol{A}^i$ 是对称退极化张量（类似于 Eshleby 张量）。
- ϕ_i 是体积分数。

$\boldsymbol{I}$ 是二阶单位张量。波浪号 $\tilde{}$ 表示对所有取向求平均。 $\boldsymbol{A}^i$ 由下式给出：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}^i &= \begin{bmatrix} Q_i & 0 & 0 \\ 0 & Q_i & 0 \\ 0 & 0 & 1-2Q_i \end{bmatrix}; \quad \text{where,} \\
Q_i &= \frac{\alpha_i}{2(\alpha_i^2-1)^{3/2}}(\alpha_i(\alpha_i^2-1)^{1/2} - \cosh^{-1}(\alpha_i)) \quad \text{Prolate shape, } \alpha_i > 1 \\
&= \frac{\alpha_i}{2(1-\alpha_i^2)^{3/2}}(\cos^{-1}(\alpha_i) - \alpha_i(1-\alpha_i^2)^{1/2}) \quad \text{Oblate shape, } \alpha_i < 1 \\
&\text{Where } \alpha_i = l_i/d_i \text{ is the aspect ratio of the spheroidal inclusion}
\end{aligned} \tag{2}$$

本文仅考虑球形夹杂。因此， $\boldsymbol{A}^i = \frac{1}{3}\boldsymbol{I}$和 $\tilde{\boldsymbol{R}}^i = \frac{3}{3+r_i}\boldsymbol{I}$，其中 $r_i = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0} - 1$。有关正向模型的更多详细信息，请参阅 [8]。

3 优化问题

逆问题涉及：已知复合材料的有效性质及其组分的性质，求解复合材料的微观结构参数。本文求解的是一个简化问题。假设复合材料的材料性质具有各向同性，这是由于夹杂物在复合材料中的分布方式导致的统计各向同性（见 [9]）。对于给定的复合材料，通过几项初步实验可以确定该材料是否具有各向同性。此后，还可以采用等效微观结构的概念（见第8节）。如果已知微观结构使得复合材料系统具有各向同性，且所有夹杂物均为球形，则本文建立的优化问题可以直接应用。对于一般椭球体夹杂，还需要开展更多工作，而本文正是朝着这一方向所作的努力。针对当前的Eshelby-Mori-Tanaka反问题均场平均问题，所涉及的优化问题如下：

$$\begin{aligned}
&\underset{\boldsymbol{\phi}}{\text{Minimize}}\ \eta := |\overline{\varepsilon} - \hat{\varepsilon}| \\
&\text{Subject to:} \\
&\qquad \phi_i \in (0,1)\ \forall\, i \in \{0,1,2,\cdots,(n-1)\}; \\
&\qquad \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\phi} = 1
\end{aligned} \tag{3}$$

这里，$\bar{}\,\varepsilon = \tilde{\varepsilon}/\varepsilon_0$ 和 $\tilde{\varepsilon}$ 采用上一节所述方法计算。$\hat{}\,\hat{}\,\hat{}\,\varepsilon = \hat{}\,\varepsilon/\varepsilon_0$和$\hat{}\,\varepsilon$是复合材料的实验测定的介电常数。本文针对优化问题3给出以下结果：

- 它是一个拟凸优化问题。
- 它对 $n = 2$是严格拟凸的。
- 对于 $n \geq 3$，所有极小化点的集合 $\mathcal{M}$ 均可通过解析方法确定。

4 优化问题的特征

4.1 Eshelby-Mori-Tanaka模型在 ϕ中是拟线性的

方程 1 对球形夹杂进行无量纲化（除以 ε_0）后，可化简为：

$$\overline{\varepsilon} = \frac{\phi_0 + \sum_{i=1}^{n-1}\left(\frac{3(1+r_i)\phi_i}{(3+r_i)}\right)}{\phi_0 + \sum_{i=1}^{n-1}\left(\frac{3\phi_i}{(3+r_i)}\right)};\ \text{where, } r_i = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0} - 1; r_i \in (-1,0)\cup(0,\infty). \tag{4}$$

进一步简化以便于分析，

$$\begin{aligned}
\overline{\varepsilon} &= \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\phi}}{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi}}; \quad 1_{\{i=0\}} \coloneqq \begin{cases} 0\,\forall\, i>0, \\ 1,\ i=0 \end{cases} \quad ; \quad i \in \{0,1,2,\cdots,(n-1)\} \\
p_i &\coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\prod_{k=1}^{n-1}(3+r_k) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left((1+r_i)\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right) \qquad (5) \\
q_i &\coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\prod_{i=1}^{n-1}(3+r_i) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left(\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right) \qquad (6)
\end{aligned}$$

函数 ε 是线性分式函数（参见 Boyd [1]）。已知当对所有 r_i和 $\boldsymbol{\phi}$，$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi} > 0$时，此类函数是拟线性的。因此，回想 $r_i \in (-1,0)\cup(0,\infty)$，可得 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi}$：

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi} = \left(1_{\{i=0\}}\right)\left(\prod_{i=1}^{n-1}\underbrace{(3+r_i)}_{>0}\right)\underbrace{\phi_0}_{>0} + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\underbrace{\sum_{i=1}^{n-1}\left(\prod_{j\neq i;j=1}^{n-1}(3+r_j)\phi_i\right)}_{>0} > 0 \tag{7}$$

4.2 球形夹杂二组分复合材料逆问题的严格拟凸性

对于二组分复合材料的情形，可以证明问题 3 是严格拟凸的。在这种情况下，由于存在全局最小值，因此存在唯一极小化点（$\phi_0^\star, \phi_1^\star$）。这与我们从微观力学文献中得到的结果一致（参见图 3 [24] ）。为证明这一点，首先注意：

$$\min\left(1, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right) < \hat{\varepsilon} < \max\left(1, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right); \quad \hat{\varepsilon} \in \operatorname{Im}\left(\overline{\varepsilon}\right) \tag{8}$$

由于 $\hat{}\varepsilon$ 属于 ε 的像，且 $\overline{\varepsilon}$ 是连续的，$^{-}$因此只需证明 ε 关于 ϕ_1 是单调的。将$^{-}\varepsilon$ （方程 4）仅用 ϕ_1 对 $n=\overline{2}$ 重新表述，并求其导数：

$$\overline{\varepsilon} = \frac{3 + r_1 + 2r_1\phi_1}{3 + r_1 - r_1\phi_1}; \quad \overline{\varepsilon}_{,\phi_1} = \frac{3r_1\left(3+r_1\right)}{\left(3+r_1-r_1\phi_1\right)^2} \tag{9}$$

因此，对于给定的 r_1,$^{-}$ ε 关于 ϕ_1 是单调的，从而问题 3 是一个严格拟凸优化问题。

4.3 含球形夹杂的 n 组分复合材料的拟凸性

在本小节证明本文的主要结果之前，我们先给出一些定义。重述该优化问题：

$$
\begin{array}{l}
\underset{\boldsymbol{\phi},\eta}{\text{Minimize:}}\ \eta \coloneqq \left|\dfrac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\phi}}{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi}} - \hat{\varepsilon}\right| = \left|\dfrac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}}{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\phi}}\right| \\
\text{Subject to:} \\
\qquad \boldsymbol{\phi} \succeq \mathbf{0};\quad \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\phi} = 1 \qquad\qquad (C1)-(C2) \\
\hline
1_{\{i=0\}} \coloneqq \begin{cases} 0, i>0, \\ 1, i=0 \end{cases};\quad r_i \coloneqq \dfrac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0} - 1\ \forall i \in \{1,\cdots,(n-1)\}; \\
\hline
p_i \coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\displaystyle\prod_{j=1}^{n-1}(3+r_j) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left((1+r_i)\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right); \\
q_i \coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\displaystyle\prod_{j=1}^{n-1}(3+r_j) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left(\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right) \\
\qquad u_i \coloneqq p_i - \hat{\varepsilon} q_i
\end{array}
\tag{10}
$$

注意，约束（$C1$）实际上包含两个严格不等式约束。接下来，我们需要了解逆问题何时存在唯一极小化点，甚至是否存在唯一极小化点。目前已证明，一般问题是拟凸的。要使问题存在唯一极小化点，就需要满足严格拟凸性。本文将证明，一般而言，当前的逆问题并非严格拟凸。

首先，评估 $\boldsymbol{u}$ 各项的符号是有意义的，因为已知 $\boldsymbol{\phi}$属于单纯形（$\mathcal{C}$）。根据定义10，$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{p} - \hat{}\varepsilon\boldsymbol{q}$。因此，

$$
\begin{aligned}
u_0 &= \left[\prod_{j=1}^{n-1}(3+r_j)\right](1-\hat{\varepsilon}) \\
u_1 &= p_1 - \hat{\varepsilon}q_1 = 3\left(\prod_{j=2}^{n-1}(3+r_j)\right)(1+r_1-\hat{\varepsilon}) = 3\left(\prod_{j=2}^{n-1}(3+r_j)\right)\left(\tfrac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} - \hat{\varepsilon}\right) \\
u_2 &= p_2 - \hat{\varepsilon}q_2 = 3\left(\prod_{j=1,j\neq 2}^{n-1}(3+r_j)\right)\left(\tfrac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} - \hat{\varepsilon}\right) \\
u_3 &= p_3 - \hat{\varepsilon}q_3 = 3\left(\prod_{j=1,j\neq 3}^{n-1}(3+r_j)\right)\left(\tfrac{\varepsilon_3}{\varepsilon_0} - \hat{\varepsilon}\right) \\
&\vdots \\
u_{n-1} &= p_{n-1} - \hat{\varepsilon}q_{n-1} = 3\left(\prod_{j=1}^{n-2}(3+r_j)\right)\left(\tfrac{\varepsilon_{n-1}}{\varepsilon_0} - \hat{\varepsilon}\right)
\end{aligned}
\tag{11}
$$

另请注意，

$$
\min\left(1, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}, \cdots, \frac{\varepsilon_{n-1}}{\varepsilon_0}\right) < \hat{\varepsilon} < \max\left(1, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}, \cdots, \frac{\varepsilon_{n-1}}{\varepsilon_0}\right);\quad \hat{\varepsilon} \in \mathrm{Im}\left(\overline{\varepsilon}\right) \tag{12}
$$

现在，方程11和12表明，$\boldsymbol{u}$ 的一些项为负，另一些项为正（依据 $\varepsilon_i \lessgtr \hat{}\varepsilon$）。这显然意味着问题10不是严格拟凸的，因为 η 中绝对值内的表达式可能会在多个 $\boldsymbol{\phi}$处变号。这里需要注意的是，在简单复合材料中，$\boldsymbol{u}$的某一项为零的可能性很小。例如，在复杂复合材料中，选择某种组分可能并非因为其介电常数特性，而是因为它具备其他理想属性。因此，研究给定复合材料的逆问题时，考虑何时适合使用介电常数非常重要。

5 解答

优化问题10的解为 $\mathcal{M}$，

$$
\begin{gathered}
\mathcal{M} = \mathcal{C} \cap \mathcal{H}, \text{ with,} \\
\mathcal{H} \coloneqq \{\boldsymbol{\phi} \mid \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi} = 0\},\ \mathcal{C} \coloneqq \{\boldsymbol{\phi} \mid \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\phi} = 1,\ \phi_i > 0\ \forall\, i \in \{0,1,2,\cdots,(n-1)\}\}
\end{gathered}
\tag{13}
$$

与通常的单纯形（$\mathcal{C}$）相比，将 $\boldsymbol{\phi}$ 视为主导组分有序单纯形 $\left(\mathcal{C}_{(0)}\right)$更为合理。因为基体材料“0”的体积分数将高于所有其他组分（也就是说， $\phi_0 \geq \phi_i \, \forall i > 0$）。对于含有球形夹杂的复合材料，基体材料的体积分数会远高于这一数值，尤其是在夹杂物均为相同尺寸的球形时（堆积分数等）。需要注意的是，Eshelby-Mori-Tanaka模型中完全没有明确提及夹杂物的尺寸。事实上，这是该模型的一个缺点（关于可实现性，参见 [11],[10], 等）。因此， $\boldsymbol{\phi}$的实际物理可行集所包含的条目将少于有序单纯形。不过，本文展示了单纯形和有序单纯形的结果，也可以针对具体问题进行类似计算。

为解析确定所有极小化点的集合 $\mathcal{M}$，需利用 $\boldsymbol{u}$ 各分量的符号以及 $\boldsymbol{\phi}$ 所在集合的边。当 $\varepsilon - \hat{}\varepsilon$ 从该集合某一顶点上的负值变为相邻顶点上的正值时， $\bar{\eta} = 0$ 位于一条边上。 $\boldsymbol{u}$ 各分量的符号以及 $\boldsymbol{\phi}$ 所在集合的边在这方面很有用。于是，集合 $\mathcal{M}$ 是 $\boldsymbol{\phi}$ 所在集合的边上所有使 $\eta = 0$ 成立的点的凸包。该集合将自动成为 $\mathcal{C}$的子集。 $\boldsymbol{\phi}$ 的集合的某个顶点本身也可能位于$\mathcal{M}$中，但这仅在 $\boldsymbol{u}$ 的某一特定分量为零时发生。在接下来的两小节中，将确定 $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{C}$ 与 $\phi \in \mathcal{C}_{(0)}$ 的解集 $\mathcal{M}$ 。

5.1 $\boldsymbol{\phi}$ 位于单纯形（$\mathcal{C}$）

$$\mathcal{C} \coloneqq \{\boldsymbol{\phi} \mid \mathbf{1^n} \cdot \boldsymbol{\phi} = 1, \, \phi_i > 0 \, \forall \, i \in \{0, 1, 2, \cdots, (n-1)\}\} \tag{14}$$

$\mathcal{C}$ 的顶点为 $\boldsymbol{e_i}$，其中 $\boldsymbol{e_i}$ 构成$\mathbb{R}^n$的标准／克罗内克 δ 基（$\boldsymbol{e_i} \cdot \boldsymbol{e_j} = \delta_{ij}$）。 $\mathcal{C}$有 n 个顶点以及（n（$n-1$）） /2 条边。为清晰陈述该结果，作如下定义：

$$\mathcal{P}_1 \coloneqq \{i \mid u_i > 0\}; \; \mathcal{P}_2 \coloneqq \{i \mid u_i < 0\}; \; \mathcal{Z} \coloneqq \{i \mid u_i = 0\} \tag{15}$$

边 $\mathcal{C}$ 上的向量 $\boldsymbol{\phi}^{ij}$ 可用 $t_{ij} \in$ (0,1) 参数化，

$$\boldsymbol{\phi}^{ij}(t_{ij}) = t_{ij}\boldsymbol{e_i} + (1 - t_{ij})\boldsymbol{e_j} \, \forall \, i, j \in \{0, 1, 2, \cdots, (n-1)\}, i \neq j \tag{16}$$

因此，极小值集合 $\mathcal{M}$ 变为：

$$\mathcal{M}_{\mathcal{C}} = conv\{\{e_i \mid i \in \mathcal{Z}\} \cup \{\boldsymbol{\phi}^{ij\star} \mid i \in \mathcal{P}_1, j \in \mathcal{P}_2\}\} \text{ where, } \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\phi}^{ij\star} = 0 \tag{17}$$

其中，满足 $i \in \mathcal{Z}$ 的 $\boldsymbol{e_i}$ 是一个极小值，表示该复合材料并非复合材料，而只是 i^{th} 材料。忽略此解。$\boldsymbol{\phi}^{ij\star}$是 $\mathcal{C}$边上的 $\boldsymbol{\phi}$ 个向量，满足 $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\phi}^{ij\star} = 0, i \in \mathcal{P}_1, j \in \mathcal{P}_2$。注意，

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\phi}^{ij\star} = t_{ij}^{\star} u_i + \left(1 - t_{ij}^{\star}\right) u_j = 0 \text{ so, } t_{ij}^{\star} = \frac{u_j}{u_j - u_i} \tag{18}$$

因此，由方程 16 可得，

$$\boldsymbol{\phi}^{ij\star} = \frac{u_j}{u_j - u_i}\boldsymbol{e_i} - \frac{u_i}{u_j - u_i}\boldsymbol{e_j} \tag{19}$$

这样的点共有 $|\mathcal{P}_1| \cdot |\mathcal{P}_2|$ 个（最多为 $(n(n-1))/2$）。因此，解为，

$$\boxed{\mathcal{M} = conv\left\{\boldsymbol{\phi}^{ij\star} \mid \boldsymbol{\phi}^{ij\star} = \frac{u_j}{u_j - u_i}\boldsymbol{e_i} - \frac{u_i}{u_j - u_i}\boldsymbol{e_j} \, \forall \, u_i > 0, u_j < 0\right\}} \tag{20}$$

$\boldsymbol{u}$个条目使用方程 11 计算。

5.2 $\boldsymbol{\phi}$ 位于主导分量有序单纯形 $\left(\mathcal{C}_{(0)}\right)$

主导分量有序单纯形定义如下：

$$\mathcal{C}_{(0)} = \{\boldsymbol{\phi} \in \mathbb{R}^n : \phi_i \geq 0, \mathbf{1^n} \cdot \boldsymbol{\phi} = 1, \phi_0 \geq \phi_i \, \forall \, i \in \{1, 2, 3, \cdots, n-1\}\} \tag{21}$$

$\mathcal{C}_{(0)}$ 有 2^{n-1} 个顶点。 $S \subseteq \{1, 2, 3, \cdots, (n-1)\}$ 用于指代这些顶点：

$$\phi_i^S = \begin{cases} \frac{1}{|S|+1}, & i = 0 \text{ or } i \in S, \\ 0, & i \notin \{0\} \cup S \end{cases} \tag{22}$$

例如，对于 $n=4$，8 个顶点为：

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\varnothing}=(1,0,0,0), \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1\}}=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,0\right), \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2\}}=\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2},0\right), \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{3\}}=\left(\frac{1}{2},0,0,\frac{1}{2}\right), \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2\}}=\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3},0\right), \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2,3\}}=\left(\frac{1}{3},0,\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right) \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,3\}}=\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},0,\frac{1}{3}\right), \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2,3\}}=\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)\end{gathered} \tag{23}$$

$\mathcal{C}_{(0)}$ 有（$n-1$）2^{n-2} 条边。因此，对于 $n=4$，共有 12 条边。它们是：

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\varnothing}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\varnothing}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\varnothing}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{3\}}, \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,3\}}, \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2,3\}}, \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{3\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,3\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{3\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2,3\}}, \\ \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2,3\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{2,3\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2,3\}}, \quad \boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,3\}}-\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}=\{1,2,3\}}\end{gathered} \tag{24}$$

对于 $\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{C}$的情况， $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}$ 的顶点值就是 $\boldsymbol{u}$ 本身的各个条目。 $\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{C}_{(0)}$的情况则并非如此。记 u^S 为与 $S\subseteq\{1,2,3,\cdots,(n-1)\}$相关联的顶点处的 $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}^S$ 。那么，根据方程 11，

$$u^S\coloneqq\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}; \quad u^S=\frac{u_0+\sum\limits_{i\in S}u_i}{|S|+1} \tag{25}$$

u^S 和带有 $k\notin S$ 的 $u^{S\cup\{k\}}$ 是相邻顶点处的 $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}$ 值。 $\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}}$ 用于表示连接顶点 $\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}$ 和 $\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}\cup\{\boldsymbol{k}\}}$ 的边上的 $\boldsymbol{\phi}$值。因此，

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}}=t_{S,k}\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}+(1-t_{S,k})\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}\cup\{\boldsymbol{k}\}}; \\ t_{S,k}\in(0,1), k\in\{1,2,\cdots,(n-1)\}, k\notin S, S\subseteq\{1,2,\cdots,(n-1)\}\end{gathered} \tag{26}$$

如果将上述关于 $\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}}$ 的方程与 $\boldsymbol{u}$作点积并令其等于零，则有：

$$\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}\star}=t^{\star}_{S,k}u^S+(1-t^{\star}_{S,k})u^{S\cup\{k\}}=0; \quad t^{\star}_{S,k}=\frac{u^{S\cup\{k\}}}{u^{S\cup\{k\}}-u^S} \tag{27}$$

请注意，在这种情况下，只有顶点 $\boldsymbol{\phi}=$（1/（$|S|+1$） 1/（$|S|+1$） $\cdots$， 1/（$|S|+1$））是一个包含所有组分的复合材料。其他顶点至少有一个条目为零。因此，忽略顶点处为零的 $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}$，不作明确说明。无论如何，如果该解成立，那么写成边交点凸包形式的解 $\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}\star}$ 将包含这个 $\boldsymbol{\phi}$ 值。因此，

$$\boxed{\begin{gathered}\mathcal{M}_{\mathcal{C}_{(0)}}=conv\left\{\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}\star}\,\middle|\,\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S},\boldsymbol{k}\star}=t^{\star}_{S,k}\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}}+\left(1-t^{\star}_{S,k}\right)\boldsymbol{\phi}^{\boldsymbol{S}\cup\{\boldsymbol{k}\}}\,\forall\,u^Su^{S\cup\{k\}}<0\right\} \\ S\subseteq\{1,2,\cdots,(n-1)\},\ k\in\{1,2,\cdots,(n-1)\}, k\notin S \\ \phi_i^S=\begin{cases}\frac{1}{|S|+1}, & i=0 \text{ or } i\in S,\\ 0, & i\notin\{0\}\cup S\end{cases}; \quad u^S=\frac{u_0+\sum\limits_{i\in S}u_i}{|S|+1}; \quad t^{\star}_{S,k}=\frac{u^{S\cup\{k\}}}{u^{S\cup\{k\}}-u^S}\end{gathered}} \tag{28}$$

5.3 唯一极小化点 $\boldsymbol{\phi}^{\star}$

因此，可以看出，具有球形夹杂的各向同性复合材料的 Eshelby-Mori-Tanaka 逆问题可归结为在凸多面体 $\mathcal{M}$中确定单个 $\boldsymbol{\phi}$。在凸优化中，重点在于寻找具有实用价值的数值解，而不是解析的闭式解。因此，下面将介绍一个可以使用 cvxpy 等求解器求解的优化问题。该优化问题的特征将决定利用它计算出的解的质量和实用性。对此将进行较为详细的讨论。实现这一目标有许多方法，但必须遵循所涉及的物理学规律。本小节首先介绍一种基础方法，作为一个效果不佳的示例。

$$\underset{\boldsymbol{\phi}}{\text{Minimize:}} \ -\sum_i\ln(\phi_i)-\sum_{i\geq1}\ln(\phi_0-\phi_i) \quad \text{subject to:} \quad \mathbf{1}^n\cdot\boldsymbol{\phi}=1,\ \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\phi}=0 \tag{29}$$

上面的 问题29 并不是求解极小化点 $\boldsymbol{\phi}^{\star}$ 的良好表述，因为它是极小值集合$\mathcal{M}_{\mathcal{C}_{(0)}}$ 的对数质心，其仅取决于主导分量有序单纯形 $\mathcal{C}_{(0)}$ 的几何形状，而不取决于包含诸如 $\boldsymbol{u}$、 $\boldsymbol{p}$、或 $\boldsymbol{q}$等向量的任何物理学因素。该问题中的第二个约束只是一个半平面，并不能帮助从多面体$\mathcal{M}_{\mathcal{C}_{(0)}}$中确定一个符合物理学规律的良好极小化点。

6 将物理学编码在约束中的优化问题

6.1 使用上图公式和 Charnes-Cooper变量变换

$$
\begin{aligned}
&\underset{\boldsymbol{z},s,t}{\text{Minimize: }} t \\
&\text{Subject to: } \boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{z}+p_0 s=1 && (C1)\\
&\qquad \underbrace{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{z}+p_0 s}_{=\bar{\varepsilon}} \le t+\hat{\varepsilon} && (C2)\\
&\qquad -\underbrace{\left(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{z}+p_0 s\right)}_{=\bar{\varepsilon}} \le t-\hat{\varepsilon} && (C3)\\
&\qquad \mathbf{1^{(n-1)}}\cdot\boldsymbol{z}\le s; && (C4)\\
&\qquad \left(s-\mathbf{1^{(n-1)}}\cdot\boldsymbol{z}\right)\ge z_k\;\forall\, k\in\{1,2,\cdots,(n-1)\} && (C5)\\
&\qquad \boldsymbol{z}\succeq\mathbf{0};\quad s\ge 0,\quad t\ge 0; && (C6)-(C8)\\
&\qquad r_i \coloneqq \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0}-1\;\forall i\in[1,\cdots,(n-1)];\quad p_0\coloneqq\prod_{k=1}^{n-1}(3+r_k)\\
&\qquad p_i^{inc}\coloneqq 3\left((1+r_i)\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right);\quad \boldsymbol{x}\coloneqq\boldsymbol{p^{inc}}-p_0\mathbf{1^{(n-1)}};\\
&\qquad q_i^{inc}\coloneqq 3\left(\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}(3+r_j)\right);\quad \boldsymbol{y}\coloneqq\boldsymbol{q^{inc}}-p_0\mathbf{1^{(n-1)}};\\
&\qquad \boldsymbol{\phi^{inc}}\coloneqq(\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_{n-1});\quad \boldsymbol{z}\coloneqq s\boldsymbol{\phi^{inc}};\quad s\coloneqq\frac{1}{\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{\phi^{inc}}+p_0};
\end{aligned}
\tag{30}
$$

这是一个通过上图公式和 Charnes-Cooper变量变换得到的线性规划（LP）问题（参见 [1] 中的第4.3.2节）。众所周知，线性规划是凸的，因此无需证明其凸性。

然而，尽管问题30具有正确的物理约束，但这仍然不够，因为需要确定 $\boldsymbol{\phi}$的（$n-1$）个独立变量（组分），而独立约束数量不足。问题30中的约束（$C1$）用于实现变量变换，这与代数有关；而（$C2$），（$C3$）本质上只是一个物理约束。要确定 $\boldsymbol{\phi}^{\star}$，至少需要（$n-1$）个独立约束来施加物理约束。然而，采用 Charnes-Cooper变量变换的问题公式（如问题30）不适合纳入多频率数据，因为用于实现变量变换的缩放约束（$C1$）会带来问题。因此，下一节将提出另一种公式。

6.2 多频率复介电常数与基于上图的公式

处理独立约束不足的一种方法是，对所有色散相在至少$(n-1)$个不同频率下测量介电常数（实部）。也可以测量复介电常数（实部和虚部）并获得独立约束。必须修改问题10以反映这一变化。在问题31中，下标（上标）“(k)”用于标量（向量），以表示在不同频率下的测量。

$$
\begin{array}{l}
\underset{\boldsymbol{\phi},\eta}{\text{Minimize: }}\ \eta \coloneqq \max_k \left|\bar{\varepsilon}_{(k)} - \hat{\varepsilon}_{(k)}\right| = \max_k \left|\dfrac{\boldsymbol{p^{(k)}}\cdot\boldsymbol{\phi}}{\boldsymbol{q^{(k)}}\cdot\boldsymbol{\phi}} - \hat{\varepsilon}_{(k)}\right| \\
\text{Subject to:} \\
\qquad \boldsymbol{\phi} \succeq \mathbf{0};\quad \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\phi} = 1 \\
\hline
1_{\{i=0\}} \coloneqq \begin{cases} 0, i>0, \\ 1, i=0 \end{cases};\ r_{i(k)} \coloneqq \dfrac{\varepsilon_{i(k)}}{\varepsilon_0} - 1\ \forall i \in \{1,\cdots,(n-1)\}; \\
k \in \{1,\cdots,m\} \text{ with } m \geq (n-1);\ \text{(measurement frequencies)} \\
\hline
p_i^{(k)} \coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\prod_{i=1}^{n-1}(3+r_{i(k)}) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left(\left(1+r_{i(k)}\right)\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}\left(3+r_{i(k)}\right)\right); \\
q_i^{(k)} \coloneqq \left(1_{\{i=0\}}\right)\prod_{i=1}^{n-1}\left(3+r_{i(k)}\right) + 3\left(1-1_{\{i=0\}}\right)\left(\prod_{j\neq i,j=1}^{n-1}\left(3+r_{i(k)}\right)\right)
\end{array}
\tag{31}
$$

随后使用 η 的上图。这将给出更多独立约束。以下稳健的单次线性规划采用问题31的上图公式，将除基体材料外的所有组分视为色散的，并考虑复介电常数，其表述为:

$$
\begin{array}{ll}
\underset{\boldsymbol{\phi},t,\boldsymbol{c},\boldsymbol{d}}{\text{最小化:}}\ t & \\
\text{约束条件:}\quad \boldsymbol{\phi}\succeq\mathbf{0};\ \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\phi}=1;\quad t\geq 0; & (C1)-(C3) \\
\qquad -\boldsymbol{A\phi}\preceq\boldsymbol{c};\quad \boldsymbol{A\phi}\preceq\boldsymbol{c} & (C4) \\
\qquad -\boldsymbol{B\phi}\preceq\boldsymbol{d};\quad \boldsymbol{B\phi}\preceq\boldsymbol{d} & (C5) \\
\qquad \boldsymbol{c}+\boldsymbol{d}\preceq t\boldsymbol{q^{\max}} & (C6) \\
\hline
k\in\{1,\cdots,m\}(m\text{ 频率}) & \\
\boldsymbol{a^{(k)}} \coloneqq \Re\left(\boldsymbol{p^{(k)}} - \hat{}\boldsymbol{\varepsilon_{(k)}}\boldsymbol{q^{(k)}}\right); & \boldsymbol{b^{(k)}} \coloneqq \Im\left(\boldsymbol{p^{(k)}} - \hat{}\boldsymbol{\varepsilon_{(k)}}\boldsymbol{q^{(k)}}\right); \\
\boldsymbol{A} \coloneqq \left(\boldsymbol{a^{(1)}}\quad \boldsymbol{a^{(2)}}\quad \cdots\quad \boldsymbol{a^{(m)}}\right)^\top; & \boldsymbol{B} \coloneqq \left(\boldsymbol{b^{(1)}}\quad \boldsymbol{b^{(2)}}\quad \cdots\quad \boldsymbol{b^{(m)}}\right)^\top; \\
\boldsymbol{q^{\max}} \coloneqq \text{最大}_i\ \left|q_i^{(k)}\right|; & \boldsymbol{A,B}\in\mathbb{R}^{m\times n};\quad \boldsymbol{c,d,q^{\max}}\in\mathbb{R}^m
\end{array}
\tag{32}
$$

这里，在问题32中，$(C4)$和$(C5)$分别是 m个独立约束，每个都用于确保物理规律成立。请注意，用于归一化介电常数的组分（对于每个组分，$r_{i(k)}$）必须是非色散的（介电常数不随测量频率变化）。因此，在问题32中， ε_0 必须是非色散的。如果不是，则必须使用另一个非色散组分进行归一化。如果复合材料的所有组分都是色散的，则可以直接重新表述该问题。这里作出这一选择只是为了简化说明。请注意，与问题30不同，这种表述能够利用复合材料在多个频率下的介电常数测量。

如何才能准确知道需要多少种、何种约束（$C4$）和（$C5$），才能唯一且正确地确定 $\boldsymbol{\phi^\star}$? 为此，需要为问题32中的系统确定一个充分的 约束灵敏度矩阵 。首先定义单纯形切空间，因为对于一个 n 组分复合材料，独立变量的数量为 $n-1$。

$$
\begin{array}{c}
\boldsymbol{\phi^1},\boldsymbol{\phi^2}\in\mathcal{C},\ \text{then } \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}=0 \text{ where } \boldsymbol{\Delta\phi}=\left(\boldsymbol{\phi^1}-\boldsymbol{\phi^2}\right). \\
\text{So define tangent subspace: } \mathcal{T} \coloneqq \{\boldsymbol{\Delta\phi}\in\mathbb{R}^n : \mathbf{1^n}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}=0\}
\end{array}
\tag{33}
$$

现在，定义一个张成 $\mathcal{T}$的标准正交基 $\boldsymbol{V}$:

$$
\begin{array}{c}
\boldsymbol{S} \coloneqq \left(\boldsymbol{I^{(n-1)}}\quad -\mathbf{1^{(n-1)}}\right)^\top \text{ and } \boldsymbol{V} \coloneqq \boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{S}^\top\boldsymbol{S}\right)^{-\frac{1}{2}};\ \boldsymbol{S,V}\in\mathbb{R}^{n\times(n-1)} \\
\text{Notice, } \boldsymbol{\Delta\phi}=\boldsymbol{V\Delta\phi^{inc}} \text{ and } \left\|\boldsymbol{\Delta\phi}\right\|_2 = \left\|\boldsymbol{\Delta\phi^{inc}}\right\|_2
\end{array}
\tag{34}
$$

因此，对 $\boldsymbol{\Delta\phi^{inc}}$ 起作用的约束灵敏度矩阵 $\boldsymbol{G}$可定义如下:

$$
\begin{array}{c}
\boldsymbol{G} \coloneqq \begin{pmatrix}\boldsymbol{QA}\\ \boldsymbol{QB}\end{pmatrix}\boldsymbol{V};\quad \boldsymbol{Q} \coloneqq \operatorname{diag}\left(1/q_1^{\max}, 1/q_2^{\max},\cdots,1/q_m^{\max}\right);\quad \boldsymbol{G}\in\mathbb{R}^{2m\times(n-1)}; \\
\text{So, } \begin{pmatrix}\boldsymbol{QA}\\ \boldsymbol{QB}\end{pmatrix}\boldsymbol{\Delta\phi} = \boldsymbol{G\Delta\phi^{inc}}
\end{array}
\tag{35}
$$

因此，要使逆问题具有可辨识性，$\boldsymbol{G}$的秩必须至少为 $n-1$，才能保证 $\boldsymbol{\phi}^{\star}$的可辨识性。这意味着，如果只测量介电常数的实部，则至少需要在 $m=n-1$ 个频率下进行测量。如果测量复介电常数，则至少需要在 $m=(n-1)/2$ 个频率下进行测量。决定预测的体积分配质量的另一个指标是 $\boldsymbol{G}$ ($\sigma_{\min}(\boldsymbol{G})$) 的最小奇异值。一般而言，$\sigma_{\min}(\boldsymbol{G})$的值越高，体积分配的质量越好。将测量视为含噪数据后，可以通过推导 $\|\boldsymbol{\phi}^{\star}-\boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}\|_{\infty}$ 的一个粗略界限来说明这一点。

在问题32中，假设$\hat{}\varepsilon_{(k)}$ 含有噪声，这与真实实验中的情况相同。因此，对于所有 k，$\hat{}\varepsilon_{(k)}$ 满足：

$$\begin{gathered}\hat{\varepsilon}_{(k)} \coloneqq \hat{\varepsilon}_{\mathrm{t}(k)}+\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}(k)}; \quad \hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}(k)}=\varepsilon_{\mathrm{n}(k)}/\varepsilon_0; \quad \varepsilon_{\mathrm{n}(k)}=\varepsilon_{\mathrm{n}(k)_R}+i\varepsilon_{\mathrm{n}(k)_I}; \\ \varepsilon_{\mathrm{n}(k)_R}\sim\mathcal{U}\left(-\delta_R,\delta_R\right); \quad \varepsilon_{\mathrm{n}(k)_I}\sim\mathcal{U}\left(-\delta_I,\delta_I\right)\end{gathered} \tag{36}$$

这里，$\hat{}\varepsilon_{\mathrm{t}(k)}$ 指在频率 k 下测得的复合材料真实归一化介电常数（总计 m 个频率）。$\hat{}\varepsilon_{\mathrm{n}(k)}$ 是$\hat{}\varepsilon_{(k)}$中的噪声分量。($\boldsymbol{\phi}^{\star}$，$t^{\star}$，$\boldsymbol{c}^{\star}$，$\boldsymbol{d}^{\star}$)是问题32的优化器，而 $\boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}$ 是与不同频率 m下的介电常数$\hat{}\varepsilon_{\mathrm{t}(k)}$ 相对应的复合材料真实体积分配。 $\boldsymbol{\Delta\phi}$定义为$\boldsymbol{\phi}^{\star}-\boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}$。为了确定给定目标函数 $\|\boldsymbol{\phi}\|_2$时噪声的界限，这里引入了一些新定义。

$$\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})} \coloneqq \boldsymbol{p}^{(\boldsymbol{k})}-\hat{\varepsilon}_{\mathrm{t}(k)}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}; \quad \text{Notice, } \boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}=0. \tag{37}$$

$$\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})} \coloneqq \boldsymbol{p}^{(\boldsymbol{k})}-\hat{\varepsilon}_{(k)}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}=\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}-\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}(k)}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}; \tag{38}$$

$$\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}=\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}-\underbrace{\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}}_{=0}=\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}; \tag{39}$$

$$\text{Using } \boldsymbol{a}^{(\boldsymbol{k})},\boldsymbol{b}^{(\boldsymbol{k})},\boldsymbol{A}, \text{ and } \boldsymbol{B} \text{ from Problem 32 :}$$

$$\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})} \coloneqq \Re\left(\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\right); \boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})} \coloneqq \Im\left(\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\right) \text{ and so on.} \tag{40}$$

$$\boldsymbol{A}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}} \coloneqq \left(\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\mathbf{1})} \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{m})}\right)^{\top}; \quad \boldsymbol{B}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}} \coloneqq \left(\boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\mathbf{1})} \quad \cdots \quad \boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{m})}\right)^{\top} \tag{41}$$

将使用以下恒等式：

$$|z_R+iz_I|\le|z_R|+|z_I|;\ z_R,z_I\in\mathbb{R}; \tag{I1}$$

$$|\Re(z)|+|\Im(z)|\le 2|z|;\ z,w\in\mathbb{C}; \tag{I2}$$

$$|\Re(z+w)|+|\Im(z+w)|\le(|\Re(z)|+|\Im(z)|)+(|\Re(w)|+|\Im(w)|) \tag{I3}$$

利用恒等式I1和$\hat{}\varepsilon_{\mathrm{n}(k)}$的定义，可得

$$\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}}^{\max} \coloneqq \max_k\left|\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n(k)}}\right|\le\frac{\delta_R+\delta_I}{\varepsilon_0} \tag{42}$$

这里，$t^{\star}$ 是最小化后的目标函数。接下来，将方程38与 $\boldsymbol{\phi}^{\star}$点乘，并利用方程39，

$$\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}=\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}=\boldsymbol{u}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}+\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}(k)}\left(\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right) \tag{43}$$

接下来使用恒等式 I3 得到：

$$\begin{aligned}\left|\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}\right|+\left|\boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}\right| &\le\left[\left|\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right|+\left|\boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right|\right] \\ &+\left[\left|\Re\left(\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n(k)}}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right)\right|+\left|\Im\left(\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n(k)}}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right)\right|\right]\end{aligned} \tag{44}$$

对于第一个 $[\cdot]$的界，使用问题32的约束条件（$C6$）。对于第二个$[\cdot]$的界，使用恒等式 I2。

$$\left|\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right|+\left|\boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right|\le t^{\star}q_k^{\max}; \tag{45}$$

$$\left|\Re\left(\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n(k)}}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right)\right|+\left|\Im\left(\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n(k)}}\boldsymbol{q}^{(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\phi}^{\star}\right)\right|\le 2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}}^{\max}q_k^{\max} \tag{46}$$

将不等式 44、45 和 46 代入，可得对每个 k,

$$\left|\boldsymbol{a}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}\right|+\left|\boldsymbol{b}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{t}}(\boldsymbol{k})}\cdot\boldsymbol{\Delta\phi}\right|\le\left(t^{\star}+2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}}^{\max}\right)q_k^{\max} \tag{47}$$

两边除以 $q_k^{\max}$，利用约束灵敏度矩阵 35 将所有不等式叠加，并根据 L_2 范数的定义，

$$\begin{aligned}\left\|\begin{pmatrix}\boldsymbol{QA}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{t}}}\\ \boldsymbol{QB}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{t}}}\end{pmatrix}\boldsymbol{\Delta\phi}\right\|_2 = \left\|\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{t}}}\boldsymbol{\Delta\phi}^{\boldsymbol{inc}}\right\|_2 = \sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{t}}}\right)\|\boldsymbol{\Delta\phi}\|_2 \le \sqrt{2m}\left(t^{\star}+2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{n}}^{\max}\right)\\ \le \sqrt{2m}\left[t^{\star}+2\left(\frac{\delta_R+\delta_I}{\varepsilon_0}\right)\right]\end{aligned} \tag{48}$$

这里， $\sigma_{\min}$**(**$\boldsymbol{G}$**)**是 $\boldsymbol{G}$的最小奇异值。除了秩**(**$\boldsymbol{G}$**)**之外，另一个需要关注的主要数值是 $\sigma_{\min}$**(**$\boldsymbol{G}$**)**。它决定了体积分配的质量，并取决于材料体系。给定观测噪声（$\delta_R+\delta_I$），可以确定所得体积分配的质量：

$$\boxed{\|\boldsymbol{\Delta\phi}\|_\infty \le \|\boldsymbol{\Delta\phi}\|_2 \le \frac{\sqrt{2m}}{\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{t}}}\right)}\left[t^{\star}+2\left(\frac{\delta_R+\delta_I}{\varepsilon_0}\right)\right]} \tag{49}$$

得出上述界限的目的是说明，可以通过考察系统的矩阵 $\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}$ 和 $t^{\star}$ 值来确定进行测量的频率。显然， $t^{\star}$ 较低是必要条件。除此之外， $\boldsymbol{G}$的最小奇异值 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$必须较高。该值取决于$\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$；但对于某一材料体系，如果某个组分在给定频率范围内具有很强的色散特性，且测量在此范围内进行，那么该体系的 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$ 将较高。此界限并非紧界限，且取决于 $\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$ ；除了说明约束灵敏度矩阵 $\boldsymbol{G}$的重要性之外，并无其他帮助。它表明，必须考察 $\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}$ 和 $\boldsymbol{t}^{\star}$，以确保所采用的约束足以获得良好的体积分配。下一节将把问题32应用于3种由3个组分构成的不同材料体系，并研究该不等式的行为，进而研究问题32的表现。本文仅考虑复介电常数测量。如果已知有关该系统的其他物理信息，可以修改 $\boldsymbol{G}$ ，并确定其秩和 $\sigma_{\min}$ ，以判断问题32能否良好适用。

在本研究的所有计算中，均使用 cvxpy 配合一种基于原对偶内点法（P-D IPM）的求解器——嵌入式锥优化求解器（ECOS，见 [29]）。 [1] 第 11 章简要介绍了用于线性规划的原对偶内点法的工作原理。ECOS 是一款为嵌入式应用而开发的快速求解器，有望用于复合材料体积分配的实时计算。

7 应用

本节将问题32应用于三种不同的三组分材料体系。每种材料体系都仅包含一个色散组分和两个非色散组分。

- 材料体系1（MS-1）：环氧树脂、玻璃微珠、孔隙。
- 材料体系2（MS-2）：集料、波特兰水泥浆体、孔隙。
- 材料体系3（MS-3）：含碳环氧树脂、玻璃微珠、孔隙。

^理想情况下，$\hat{}\varepsilon_{\mathrm{t}(k)}$ 值应通过实验确定。然而，为了验证^反演方法的性能，本文中的 $\hat{}\varepsilon_{\mathrm{t}(k)}$ 值是使用正向模型1以及针对各材料体系中色散组分的适当色散模型计算得到的。然后，加入上一节所述的噪声，得到$\hat{}\varepsilon_{(k)}$ ，再将其传入优化问题32。验证中使用了若干随机生成的 $\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$值。比较体积分数的图（图1和图2）考虑了100个随机生成的 $\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$ 值。比较在进行测量的频率数量（m）上误差的图考虑了30,000个随机生成的 $\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$值。随机生成的体积分配（$\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{t}}$）使得可实现性不成问题。为简便起见，本节所有计算均考虑噪声水平 $\delta_R=\delta_I=0.1$ 。

“测量”值的频带是根据色散组分的色散特性确定的。对于 MS-1 和 MS-2，选用 0.4-3.0 吉赫兹范围

。这也是市售探地雷达（GPR）设备的工作范围。对于 MS-3，使用了 0.5-1.0 MHz 频带。

前面列出的第一种和第三种材料体系，其微观结构与本文所研究的几乎完全相同。玻璃微珠制成的形状恰好是球形，而孔隙则假定为球形。对于波特兰水泥混凝土体系，需要采用一种等效微观结构。下一节将对此进行讨论。

7.1 MS-1：环氧树脂、玻璃、孔隙

微观结构的详细信息如下：

- 纯环氧树脂材料作为基体材料，下标记为“0”。一种常用模型（单一德拜弛豫模型，并考虑电导率（见 [30]））用于描述其在 0.4-3.0 吉赫兹频带内的色散：

$$\begin{gathered}\varepsilon_0(\omega)=\varepsilon_{0(\infty)}+\frac{\Delta\varepsilon_0}{1-i\omega\tau_0}+\frac{is_0}{\omega\varepsilon_{\text{vacuum}}}\ \text{with,}\\ \varepsilon_{0(\infty)}=2.90,\ \Delta\varepsilon_0=0.6,\ \tau_0=1.5\times10^{-10}\text{s},\ s_0=10^{-12},\\ \varepsilon_{\text{vacuum}}=8.854187817\times10^{-12}\text{F/m}\end{gathered}\tag{50}$$

  对于 $m=1$，考虑频率 2.0 吉赫兹。对于 $m=2$，3，4，5，考虑 0.4-3.0 吉赫兹频带内等间隔的频率。

- 玻璃在微观结构中以球形夹杂物的形式存在，下标记为“1”。玻璃的介电常数取为常数 $\varepsilon_1=5.5+0.05i$。
- 气孔或孔隙以球体形式出现，空气以下标“2”表示。空气的介电常数取为常数 $\varepsilon_2=1.0006$。

- $\boldsymbol{\phi^{\mathbf{t}}}\in\{\boldsymbol{\phi^{\mathbf{t}}}|\,\phi_0\geq0.65,\ \phi_1\geq0.1,\phi_2\geq0.02,\ \mathbf{1^3}\cdot\boldsymbol{\phi^{\mathbf{t}}}=1\}$

上述性质与模型1一起用于确定 m个不同频率下的真实介电常数。随后按第6.2小节中的模型加入噪声，再将其传入问题32以确定体积分配。本质上，目标是确定 $\boldsymbol{\phi^\star}$，使其等于 $\boldsymbol{\phi^{\mathrm{t}}}$。该程序同样适用于本节所研究的另外两个材料系统。

纯环氧树脂的色散性不强，其结果在图1中问题32预测体积分配的有效性上清晰可见。增加测量的频率数量 m 似乎并不能提高问题32的性能，如图3a(1)、3b(1)、4a(1)所示。

7.2 MS-2：集料、波特兰水泥浆体、孔隙

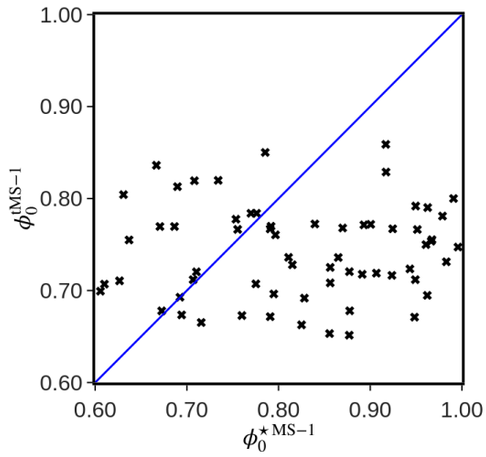
该材料体系的实际微观结构非常复杂。理想情况下，若要采用下文所述的简单等效微观结构，就必须使用不同于实际材料的材料性质（$\varepsilon_0^\star$，$\varepsilon_1^\star$，$\varepsilon_2^\star$ 与 ε_0，ε_1，ε_2 不同；见下一节）。不过，本小节假设（$\varepsilon_0^\star$，$\varepsilon_1^\star$，$\varepsilon_2^\star$）与（ε_0，ε_1，ε_2）相同，以展示该体系的行为。等效微观结构的详细信息如下：

- 骨料为基体材料，下标记作“0”。骨料的介电常数取为常数 $\varepsilon_1=5.5+0.05i$。

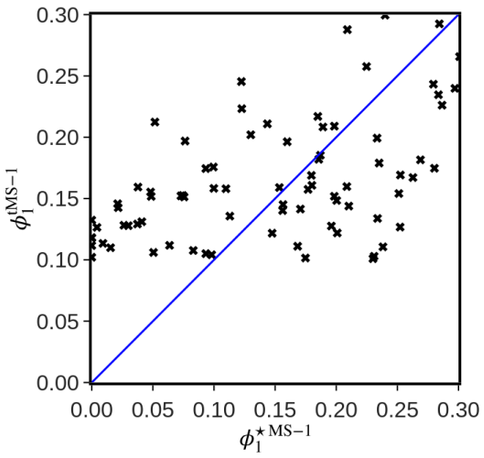
- 波特兰水泥浆体在微观结构中呈球形夹杂，下标记作“1”。就介电常数实部而言，该组分的色散程度几乎与纯环氧树脂相当，但其虚部的色散程度则高得多。假设波特兰水泥浆体经过室内环境调节，且孔隙中含有一定水分，因此据此选择参数。其在 0.4-3.0 吉赫兹频带内的色散通常采用以下模型（含直流电导率的 Cole-Cole弛豫模型，见 [31]）：

$$\begin{gathered}\varepsilon_1(\omega)=\varepsilon_{1(\infty)}+\frac{\Delta\varepsilon_1}{1+(-i\omega\tau_1)^{1-\beta_1}}+\frac{is_{1(dc)}}{\omega\varepsilon_{\text{vacuum}}}\ \text{with,}\\ \varepsilon_{1(\infty)}=4.2,\ \Delta\varepsilon_1=0.8,\ \tau_1=2.0\times10^{-10}\text{s},\ \beta_1=0.35,\ s_{1(dc)}=2.0\times10^{-3}\text{S/m}.\end{gathered}\tag{51}$$

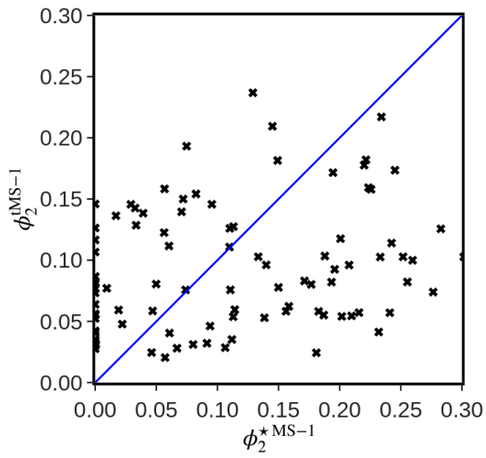
  对于 $m=1$，考虑频率 2.0 吉赫兹。对于 $m=2$，3、4，5，考虑频带 0.4-3.0 吉赫兹内的等间隔频率。



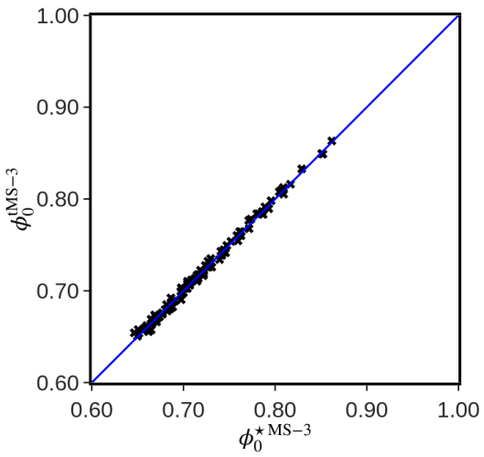
(a(1)) MS-1 中纯环氧树脂的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 2.0 吉赫兹下测量）。



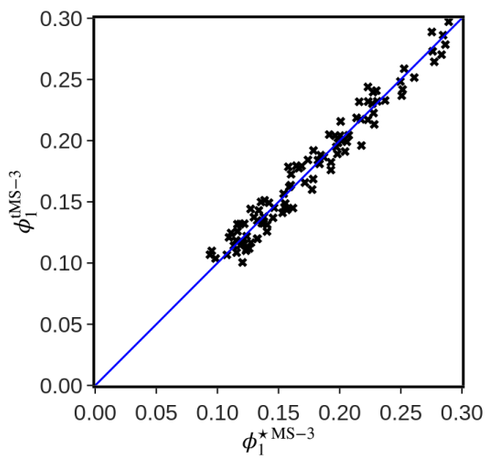
(a(2)) MS-1 中玻璃的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 2.0 吉赫兹下测量）。



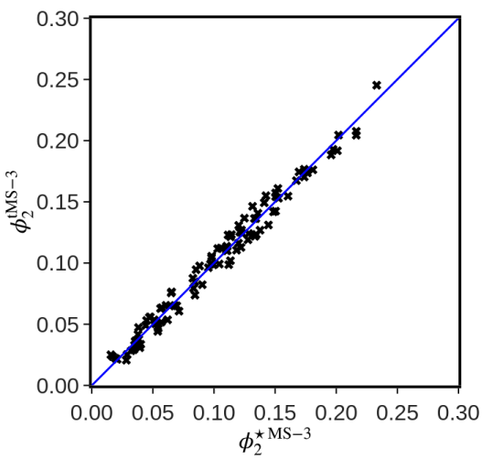
(a(3)) MS-1 中孔隙的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 2.0 吉赫兹下测量）。



(b1) MS-3 中含碳环氧树脂的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 0.5 MHz 下测量）。



(b2) MS-3 中玻璃的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 0.5 MHz 下测量）。



(b3) MS-3 中孔隙的体积分数：$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$（在 0.5 MHz 下测量）。

图1：问题32中 MS-1 和 MS-3 对 ϕ^{t} 的恢复性能，分别对应$\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$。MS-1 的测量频率为 2.0 吉赫兹，MS-3 的测量频率为 0.5 MHz。

- 气孔或孔隙呈球形，空气以下标“2”表示。空气的介电常数取为常数 $\varepsilon_2 = 1.0006$。

- $\boldsymbol{\phi^{t}} \in \{\boldsymbol{\phi^{t}} | \, \phi_0 \geq 0.65, \, \phi_1 \geq 0.1, \phi_2 \geq 0.02, \, \mathbf{1^3} \cdot \boldsymbol{\phi^{t}} = 1\}$

含有一定孔隙水分、经室内条件调节的波特兰水泥浆体，其介电常数实部呈轻微色散，虚部呈中等程度的色散。图 2 显示，在噪声水平为 $\delta_R = \delta_I = 0.1$ 时，问题32在 $m = 5$ 时表现良好，在 $m = 1$ 时表现较差（见图 2、3a(2)、3b(2) 和 4a(2)）。不过请注意，对于$m = 5$，最大值 $t^{\star}$ 较高。事实上，对于所考虑的所有材料体系，较高的 m 意味着较高的最大值 $t^{\star}$。还请注意，对于所考虑的所有材料体系，较高的 m 也意味着较高的最小值$\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$。

7.3 MS-3：含碳环氧树脂、玻璃微珠、孔隙

微观结构的详细信息如下：

- 含碳环氧树脂材料是下标为‘0’的基体材料。考虑一种低于渗流阈值、具有中等电导率的炭黑填充环氧树脂。该组分具有很强的色散性，因此采用包含直流电导率和普适介电响应的 Cole-Cole 弛豫模型描述其在 0.5-1.0 MHz 频带内的色散（参见 [31],和 [32]）：

$$\begin{gathered} \varepsilon_0(\omega) = \varepsilon_{0(\infty)} + \frac{\Delta\varepsilon_0}{1 + (-i\omega\tau_0)^{1-\beta_0}} + \frac{i}{\omega\varepsilon_{\text{vacuum}}}\left(s_{0(dc)} + A_0\omega^{s_0}\right) \text{ with,} \\ \varepsilon_{0(\infty)} = 3.0, \, \Delta\varepsilon_0 = 150, \, \tau_0 = 2.0 \times 10^{-5}\text{s}, \, \beta_0 = 0.35, \\ s_{0(dc)} = 3.0 \times 10^{-4}\text{S/m}, \, A_0 = 1.0 \times 10^{-9}\text{S/m} \cdot \text{s}^{s_0}, \, s_0 = 0.8 \end{gathered} \tag{52}$$

  对于 $m = 1$，考虑频率 0.5 MHz。对于 $m = 2$，3，4，5，考虑 0.5-1.0 MHz 频带内等间隔的频率。

- 玻璃在微观结构中以球形夹杂物的形式出现，下标为‘1’。玻璃的介电常数取为常数 $\varepsilon_1 = 5.5 + 0.05i$。

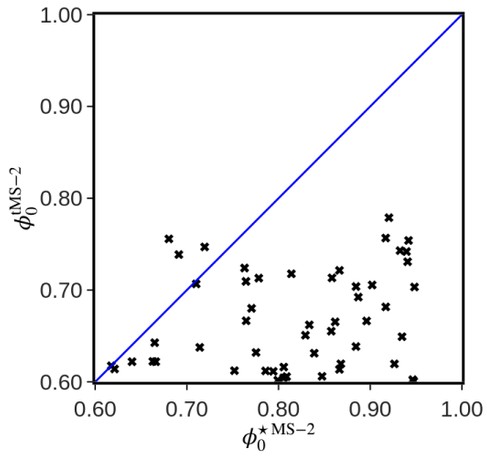
- 气孔或孔隙呈球形，空气以下标“2”表示。空气的介电常数取为常数 $\varepsilon_2 = 1.0006$。

- $\boldsymbol{\phi^{t}} \in \{\boldsymbol{\phi^{t}} | \, \phi_0 \geq 0.65, \, \phi_1 \geq 0.1, \phi_2 \geq 0.02, \, \mathbf{1^3} \cdot \boldsymbol{\phi^{t}} = 1\}$

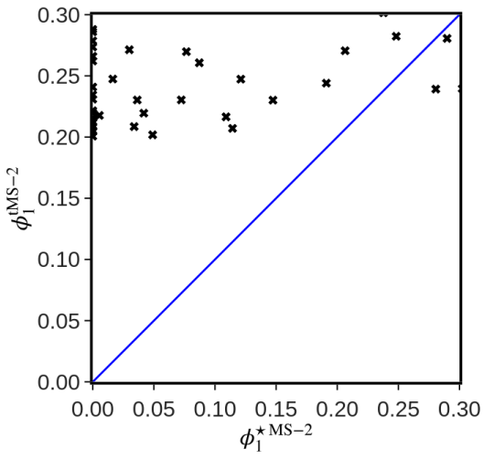
该材料体系中的基体材料具有很强的色散性，因此是应用问题32的最佳材料体系，因为只需进行一次频率测量，而且甚至 $t^{\star}$ 值也会很低。参见图1、3a(3)、3b(3)和4a(3)。

8 等效微观结构

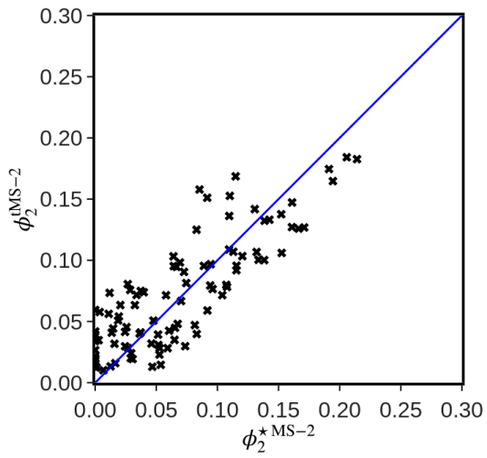
本文将等效微观结构定义为：其有效性能（介电常数）和体积组成与所研究的复合材料相同，且其微观结构简单，仅含球形夹杂。图5和图6展示了对于一种由两种组分构成、等效微观结构仅含球形夹杂的各向同性复合材料，通用正演细观力学问题和反微观力学问题的目标。为简明起见，此处展示的是单频版本的问题（不考虑色散）。



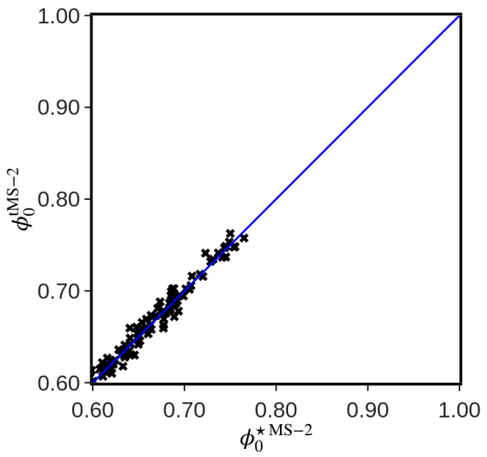
(a(1)) $\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$ 对应的 MS-2 集料体积分数（在 2.0 吉赫兹处测量）。



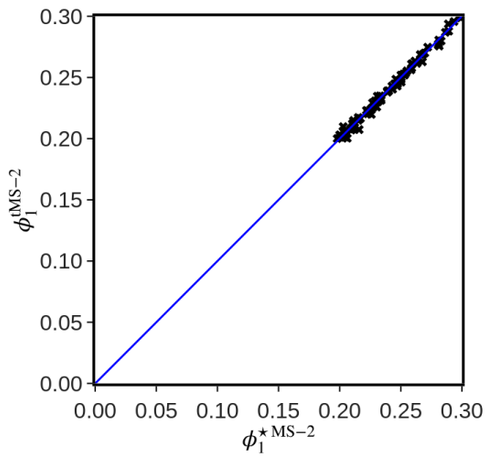
(a(2)) $\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和$m = 1$ 对应的 MS-2 波特兰水泥浆体体积分数（在 2.0 吉赫兹处测量）。



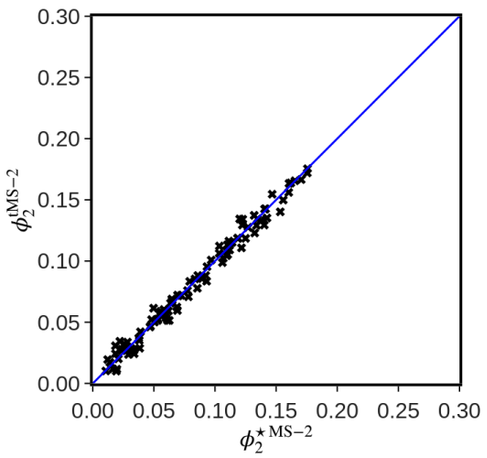
(a(3)) $\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 1$ 对应的 MS-2 孔隙体积分数（在 2.0 吉赫兹处测量）。



(b(1)) $\delta_R = \delta_I = 0.1$ 和 $m = 5$ 对应的 MS-2 集料体积分数（在 0.4–3.0 吉赫兹频带内 5 个等间隔频率处测量，包括 0.4 吉赫兹和 3.0 吉赫兹）。

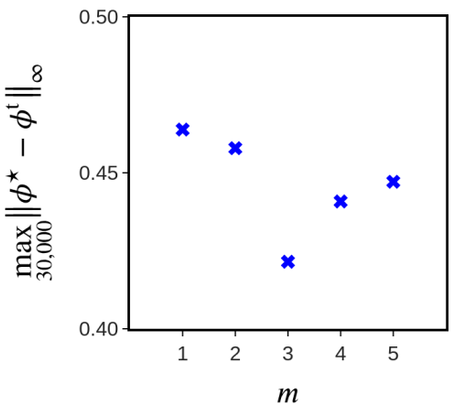


(b(2)) $\delta_R = \delta_I = 0.1$和$m = 5$ 对应的 MS-2 波特兰水泥浆体体积分数（在 0.4–3.0 吉赫兹频带内 5 个等间隔频率处测量，包括 0.4 吉赫兹和 3.0 吉赫兹）。

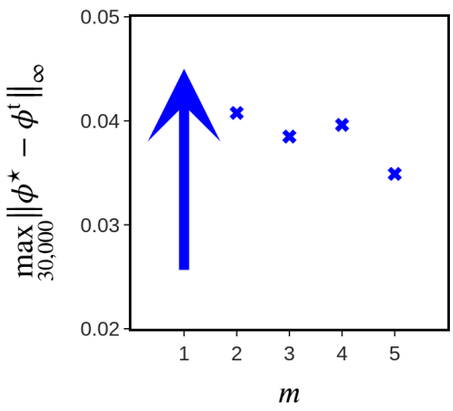


(b(3)) MS-2 中孔隙的体积分数，适用于 $\delta_R = \delta_I = 0.1$和 $m = 5$ （在 0.4–3.0 吉赫兹频带内的 5 个等间隔频率处进行测量，包括 0.4 吉赫兹和 3.0 吉赫兹）。

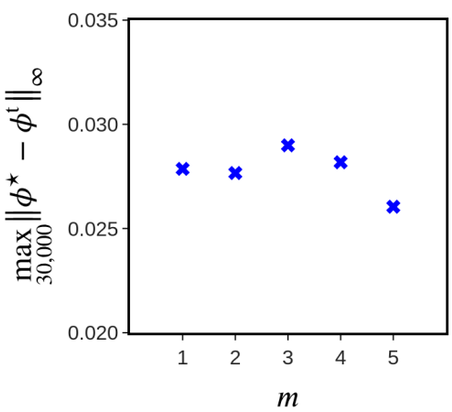
图2：问题32在MS-2中的性能（以恢复 ϕ^{t}衡量），适用于 $\delta_R = \delta_I = 0.1$和 $m = 1$ （仅在2.0吉赫兹频率下测量）以及 $m = 5$ （在0.4–3.0吉赫兹频带内以5个等间隔频率进行测量，包括0.4吉赫兹和3.0吉赫兹）。



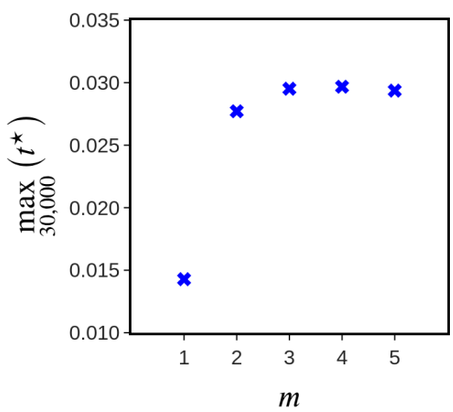
(a(1)) MS-1 在 ϕ、$\delta_R = \delta_I$ =0.1 时的最大误差。$m = 1$：在 2 吉赫兹处测量一次。$m = 2$，3，4，5：在 0.4–3.0 吉赫兹频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.4 和 3.0 吉赫兹。



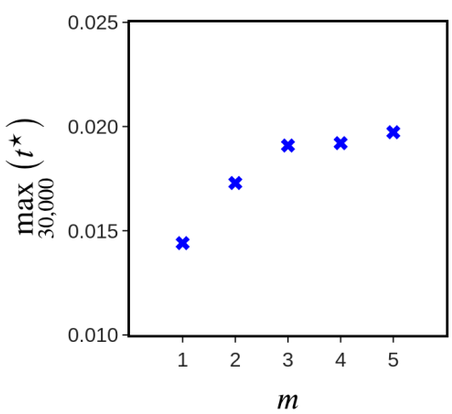
(a(2)) MS-2 在 ϕ、$\delta_R = \delta_I$ =0.1 时的最大误差。$m = 1$：在 2 吉赫兹处测量一次。$m = 2$，3，4，5：在 0.4–3.0 吉赫兹频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.4 和 3.0 吉赫兹。对于 $m = 1$，最大值$_{30,\ 000}\|\phi^\star - \phi^{\mathrm{t}}\|_\infty$ 非常高≈ 0.62025。



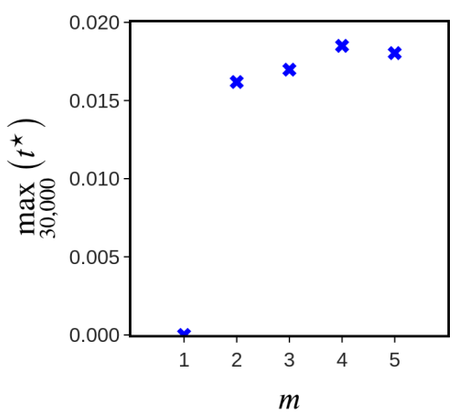
(a(3)) MS-3 在 $\delta_R = \delta_I$ =0.1 条件下 ϕ 中的最大误差。$m = 1$：在 0.5 MHz 处进行一次测量。$m = 2, 3, 4, 5$：在 0.5-1.0 MHz 频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.5 和 1.0 MHz。



(b(1)) MS-1 的 $\delta_R = \delta_I = 0.1$的最大 $t^\star$ 。$m = 1$：在 2 吉赫兹处进行一次测量。$m = 2, 3, 4, 5$：在 0.4-3.0 吉赫兹频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.4 和 3.0 吉赫兹。

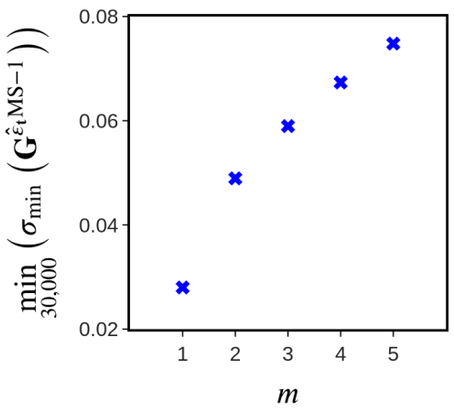


(b(2)) MS-2 的 $\delta_R = \delta_I = 0.1$的最大 $t^\star$ 。$m = 1$：在 2 吉赫兹处进行一次测量。$m = 2, 3, 4, 5$：在 0.4-3.0 吉赫兹频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.4 和 3.0 吉赫兹。

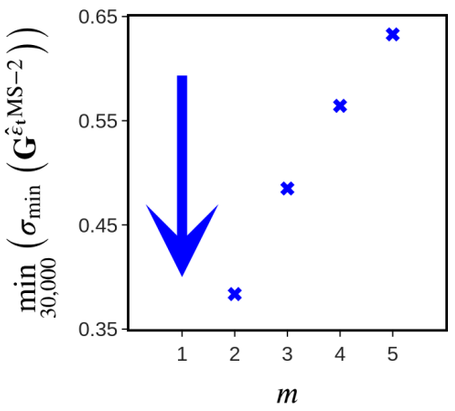


(b(3)) MS-3 的最大 $t^\star$ ，适用于 $\delta_R = \delta_I = 0.1$。$m = 1$：在 0.5 MHz 处进行一次测量。$m = 2$，3，4，5：在频带 0.5-1.0 MHz 内以等间隔频率进行 m 次测量，包括 0.5 和 1.0 MHz。

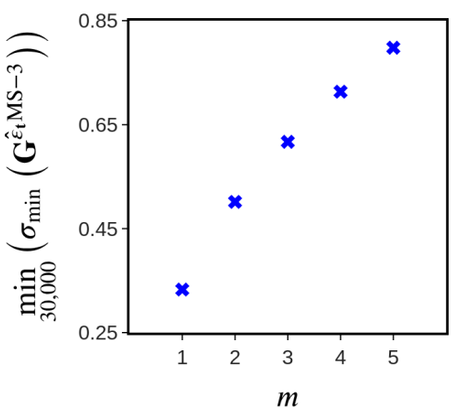
图 3：问题32 的性能，以 max$_{30,\ 000}\|\phi^\star - \phi^{\mathrm{t}}\|_\infty$ 和 max$^{30,000}(t^\star)$ 表示，作为进行测量的频率数量 (m) 的函数，适用于 $\delta_R = \delta_I = 0.1$。



(a(1)) MS-1 在 $\delta_R = \delta_I$ =0.1 时的最小 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$。 $m = 1$：在 2 吉赫兹处进行一次测量。 $m = 2, 3, 4, 5$：在 0.4–3.0 吉赫兹频带内（包括 0.4 和 3.0 吉赫兹）的等间隔频率上进行 m 次测量。



(a(2)) MS-2 在 $\delta_R = \delta_I$ =0.1 时的最小 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$。 $m = 1$：在 2 吉赫兹处进行一次测量。 $m = 2, 3, 4, 5$：在 0.4–3.0 吉赫兹频带内（包括 0.4 和 3.0 吉赫兹）的等间隔频率上进行 m 次测量。对于 $m = 1$，最小值 $\min_{30,000}\left(\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)\right)$ 非常低 ≈ 0.01725。



(a(3)) MS-3 的最小 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)$，当 $\delta_R = \delta_I$ =0.1 时。 $m = 1$：在 0.5 MHz 处测量一次。 $m = 2$、3、4、5：在 0.5–1.0 MHz 频带内的等间隔频率处进行 m 次测量，包括 0.5 和 1.0 MHz。

图4：问题32的性能，以 $\min_{30,\,000}\left(\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t}\right)\right)$ 为指标，随测量所用频率数量的变化情况（m），对应于 $\delta_R = \delta_I = 0.1$。

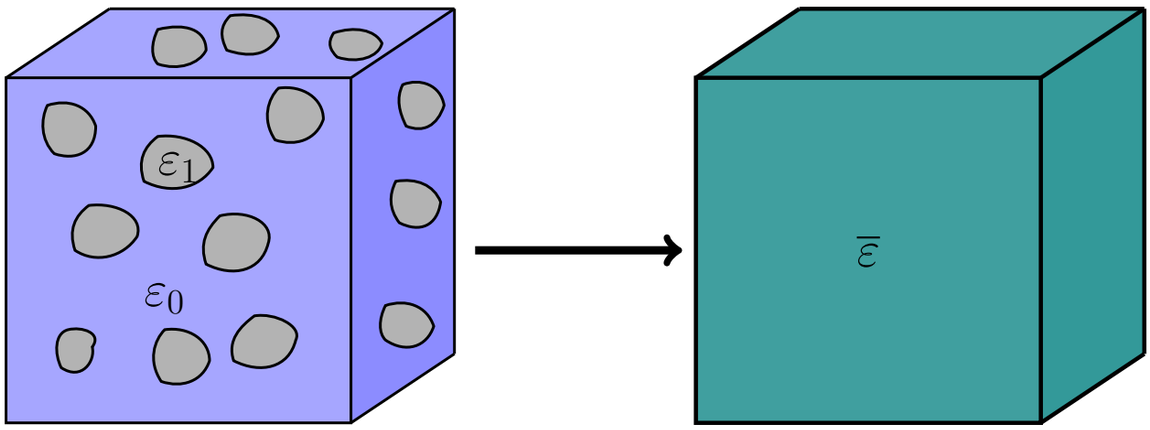


图 5：各向同性双组分复合材料的正演细观力学问题 .

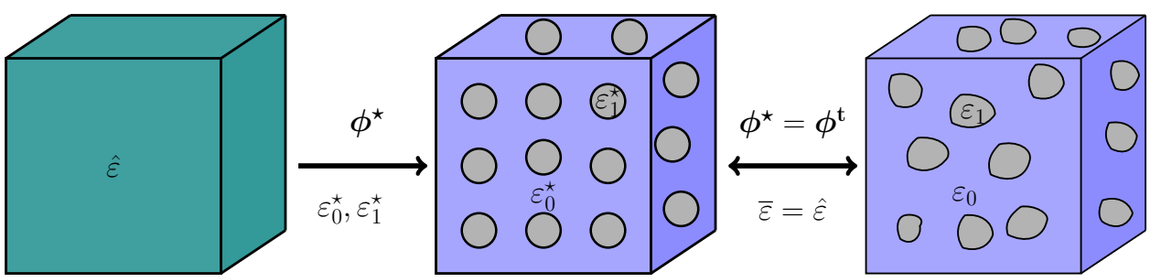


图 6：各向同性双组分复合材料的逆问题，其等效微观结构仅由球形夹杂组成。此处的目标是找到 $(\underline{\boldsymbol{\phi}}^\star,\ \varepsilon_0^\star,\ \varepsilon_1^\star)$，使得 $\varepsilon(\boldsymbol{\phi}^\star,\ \varepsilon_0^\star,\ \varepsilon_1^\star) = \hat{\varepsilon}$ 且 $\boldsymbol{\phi}^\star = \boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}$。

所研究材料的介电常数必须具有各向同性。细观力学文献表明，对于含有任意形状夹杂的复合材料，若等效微观结构仅含球形夹杂，且各组分的介电常数与真实微观结构中对应组分的介电常数相同，同时保持体积分数划分，则严格来说这样的等效微观结构是不可能实现的（参见 [24], [16], 等）。因此，还必须确定 $\varepsilon_0^\star$ 和 $\varepsilon_1^\star$，使得 $\boldsymbol{\phi}^\star = \boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}$。可以通过其他方式确定 $\varepsilon_0^\star$ 和 $\varepsilon_1^\star$，也可以将它们与 $\boldsymbol{\phi}$ 一同作为决策变量，构建一个优化问题。上述优化问题的优化器将为 $(\boldsymbol{\phi}^\star,\ \varepsilon_0^\star,\ \varepsilon_1^\star)$。对于波特兰水泥混凝土材料体系，必须采用这种做法，因为其微观结构极其复杂，而等效微观结构则非常简单。

9 结论

本文实现了以下目标：

- 证明了球形夹杂双组分复合材料的 Eshelby-Mori-Tanaka 逆问题在 $\boldsymbol{\phi}$ 中是严格拟凸的。

- 证明了具有球形夹杂的 n 组分复合材料的 Eshelby-Mori-Tanaka 逆问题在 $\boldsymbol{\phi}$ 中是拟凸的，并确定了在单纯形 $(\mathcal{C})$ 中 $\boldsymbol{\phi}$ 以及在主导分量有序单纯形 $(\mathcal{C}_{(0)})$ 中 $\boldsymbol{\phi}$ 的所有极小解集合。

- 利用 Charnes-Cooper变量变换和上图公式 (30) 构造了一个等价线性规划，并讨论了其不足之处。这样做是为了说明，要解决含 3 个组分的复合材料逆问题，要么需要更多频率下的测量，要么至少需要在某一给定频率下进行一次复介电常数测量。

- 逆问题的多频率表述由（32）确定。如果没有不同频率下的介电常数测量值，也可以利用有关材料体系的其他信息来增加问题的约束条件。良好预测的要求是秩 $\left(\boldsymbol{G}^{\hat{}}{}_{\boldsymbol{\varepsilon}_t}\right) = n-1$, $\sigma_{\text{最小}}\left(\boldsymbol{G}^{\hat{}}{}_{\boldsymbol{\varepsilon}_t}\right)$ 较高，且 $t^\star$ 较低。

- 随后，使用问题32，利用3种材料体系的正向计算值（使用模型1）来验证逆问题表述。研究了测量所用频率数量、噪声与 $\|\boldsymbol{\Delta\phi}\|_\infty$ 之间的关系。固定噪声水平下的主要发现如下：

  – 材料体系中存在强色散组分，将能够以较少的频率测量实现出色的体积预测。– 随着频率测量次数的增加，最优目标函数 $t^\star$ in- creases。– 随着频率测量次数的增加，约束灵敏度矩阵的最小奇异值 $\sigma_{\min}\left(\boldsymbol{G}^{\boldsymbol{\varepsilon}_t}\right)$ increases。– 介电常数虚部（损耗）中存在具有强色散性的材料，将改善体积预测（降低 $\|\boldsymbol{\phi}^\star - \boldsymbol{\phi}^{\mathbf{t}}\|_\infty$），并通过在更多频率（$m$）下进行测量实现这一点。

本文讨论了一些简单而稳健的优化问题。还可以构建融入概率密度函数（用于编码各向同性之外的材料对称性）及其他微观结构细节的更复杂问题。连接凸优化与基于 Eshelby 的逆微观力学的这一研究领域，具有巨大的发展空间。

致谢： 作者永远感念 Kumbhakon.am Ram¯aman. i R¯ajagopal 教授在指导、支持和引领方面给予的帮助。没有他的指导，这项工作将无法完成。第一作者感谢 Krishna Kaushik Yanamundra 和 Bhaskar Vajipeya-jula 为改进本文所提供的帮助。

参考文献

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

[2] J. C. Maxwell，《电与磁论》，第1卷，克拉伦登出版社，1873年 .

[3] J. A. Stratton，《电磁理论》，John Wiley & Sons，2007年。

[4] J. Eshelby，椭球夹杂弹性场的确定及相关问题，《伦敦皇家学会会刊》A辑：数学与物理科学 241（1226）（1957）376–396。网址 http://www.jstor.org/stable/100095

[5] T. Mura，《固体缺陷微观力学》，Springer Science & Business Media，Dordrecht，2013年。

[6] J.Qu、M. Cherkaoui，《固体微观力学基础》，第735卷，Wiley 在线图书馆，2006年。arXiv:https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/9780470117835。网址：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/9780470117835

[7] S. Torquato 等，《随机非均质材料：微观结构与宏观性质》，第16卷，Springer，2002年。

[8]Y. Benveniste，关于多相复合材料的有效热导率，Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP 37 (5) (1986) 696–713。

[9] Z. Hashin，复合材料分析——综述，《应用力学杂志》50(3) (1983) 481–505。doi:10.1115/1.3167081。网址：https://doi.org/10.1115/1.3167081

[10]A. N. Norris，《多相复合材料 Mori-Tanaka 有效介质近似的考察》，《应用力学杂志》56 (1) (1989) 83–88。arXiv:https://asmedigitalcollection.asme.org/appliedmechanics/article-pdf/56/1/83/5460696/83_1.pdf, doi:10.1115/1.3176070。网址 https://doi.org/10.1115/1.3176070

[11] J. G. Berryman, P. A. Berge, 《估算多相复合材料弹性性质的两种显式方案评析》, 《材料力学》22 (2) (1996) 149–164。doi:https://doi.org/10.1016/0167-6636(95)00035-6。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167663695000356[12] Z. Hashin, S. Shtrikman, 《多相材料弹性行为理论的变分方法》, 《固体力学与物理学杂志》11 (2) (1963) 127–140。 doi:https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509663900607[13] W. Ogierman, 《不连续增强复合材料组成相弹性性质的反演识别》, 《材料》11 (11) (2018) 2332。[14] D. ˛Lyd˙zba, A. R´o˙za´nski, D. Stefaniuk, 《等效微结构问题：数学表述与数值解》, 《国际工程科学杂志》123 (2018) 20–35。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2017.11.007。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020722517318980[15] D. ˛Lyd˙zba, A. R´o˙za´nski, I. Sevostianov, D. Stefaniuk, 《细观力学中的等效微观结构原理及其与替换关系的联系：热导率问题》, 《国际工程科学杂志》144 (2019) 103126。[16] I. Sevostianov, M. Kachanov, 《对于形状各异的夹杂物混合体，“平均形状”的概念是否合理？》, 《国际固体与结构杂志》49 (23-24) (2012) 3242–3254。[17] P. ˇCapek, V. Hejtm´anek, L. Brabec, A. Zik´anov´a, M. Koˇciˇr´ık, 《利用模拟退火对颗粒介质进行随机重建：改善孔隙连通性》, 《多孔介质中的传输》76 (2009) 179–198。[18] C. Manwart, R. Hilfer, 《利用蒙特卡罗方法重建随机介质》, 《物理评论E》59 (1999) 5596–5599。 doi:10.1103/PhysRevE.59.5596。网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.59.5596[19] M. D. Rintoul, S. Torquato, 《分散体系结构的重建》, 《胶体与界面科学杂志》186 (2) (1997) 467–476。[20] A. R ´O ˙ZA ´NSKI, D. ˛LYD ˙ZBA, 《从微观结构数字图像到代表性体积单元的尺寸：B4C/Al复合材料》, 《岩土工程与力学研究》33 (1) (2011) 55–68。[21] M. Talukdar, O. Torsaeter, 《利用模拟退火技术从二维背散射电子显微图像重建白垩孔隙网络》, 《石油科学与工程杂志》33 (4) (2002) 265–282。[22] M. Talukdar, O. Torsaeter, M. Ioannidis, 《根据二维图像对颗粒介质进行随机重建》, 《胶体与界面科学杂志》248 (2) (2002) 419–428。[23] C. L. Yeong, S. Torquato, 《随机介质的重建》, 《物理评论E》57 (1) (1998) 495。[24] M. Kachanov, I. Sevostianov, 《微观结构和有效性质的定量表征》, 《国际固体与结构杂志》42 (2) (2005) 309–336。[25] G. W. Milton, L. H. Nguyen, 《两相二维弹性体体积分数及复合材料中（应力，应变）对的界限》, Comptes Rendus M´ecanique 340 (4-5) (2012) 193–204。[26] H. Kang, G. W. Milton, 《利用平移法根据边界测量确定三维物体中两种材料体积分数的界限》, SIAM《应用数学杂志》73 (1) (2013) 475–492。

[27] A. E. Thaler, G. W. Milton，根据复电导率测量确定物体中夹杂物体积的界限，arXiv 预印本 arXiv:1306.6608（2013）。[28] A. Cherkaev，结构优化的变分方法，第 140 卷，Springer Science & Business Media，2012。[29] A. Domahidi, E. Chu, S. Boyd，ECOS：一种用于嵌入式系统的二阶锥规划求解器，载于：2013 年欧洲控制会议（ECC），2013 年，第 3071–3076 页。 doi:10.23919/ECC.2013.6669541。[30] P. Debye，《极性分子》，The Chemical Catalog Company, Inc.，纽约 89（1929）。[31] K. S. Cole, R. H. Cole，电介质中的色散与吸收 I：交流特性，《化学物理学杂志》9（4）（1941）341–351。[32] R. Hill, A. Jonscher，凝聚态物质的介电行为及其多体解释，《当代物理学》24（1）（1983）75–110。