

主纤维丛结构下材料电阻的动态控制属性建模与材料筛选反演机制

- 作者: GaoZheng
- 日期: 2025-05-19
- 版本: v1.0.0

一、系统定义

1. 状态空间与属性映射

设材料状态空间为:

$$\mathcal{S} = \{\sigma_i \mid i \in I\}$$

每个状态 σ_i 对应一个属性向量嵌入:

$$P(\sigma_i) = (p_1(\sigma_i), p_2(\sigma_i), \dots, p_d(\sigma_i)) \in \mathbb{R}^d$$

2. 微分动力量子定义 (压强)

对任意跃迁 $\sigma_i \rightarrow \sigma_j$, 定义微分动力量子为:

$$\mu(\sigma_i, \sigma_j; w) := w \cdot (P(\sigma_j) - P(\sigma_i))$$

其中 $w \in \mathbb{R}^d$ 是可调压强权重向量。

3. 路径定义与路径积分逻辑压强

令路径为:

$$\gamma = (\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_n)$$

其路径压强逻辑积分为:

$$L(\gamma; w) := \sum_{k=0}^{n-1} \tanh(\mu(\sigma_k, \sigma_{k+1}; w))$$

4. 路径电阻定义

路径上的等效电阻函数定义为：

$$R(\gamma; w) := \sum_{k=0}^{n-1} \left[\frac{1}{|\mu(\sigma_k, \sigma_{k+1}; w)| + \varepsilon} \right]$$

其中 $\varepsilon > 0$ 为非零正则项，防止局部跃迁能为零。

二、材料的动态控制属性定义

1. 最小电阻路径定义

设材料状态网络的允许跳跃拓扑为 $T \subset \mathcal{S} \times \mathcal{S}$ ，定义：

$$\gamma^*(\sigma_0; w) := \arg \min_{\gamma \in \Gamma_{\sigma_0}} R(\gamma; w)$$

其中 Γ_{σ_0} 是从初态 σ_0 出发的所有路径集合，满足每步 $(\sigma_k, \sigma_{k+1}) \in T$ 。

2. 动态控制电导属性

定义材料的动态控制性电导为：

$$\sigma_{\text{dyn}}(\sigma_0; w) := \frac{1}{R(\gamma^*(\sigma_0; w); w)}$$

3. 电阻偏差反馈修正机制

设实际系统在时间 t 处路径为 γ_t ，电阻为：

$$R_t := R(\gamma_t; w_t)$$

若 $|R_t - R(\gamma^*; w_t)| > \delta_R$, 则触发局部压强修正:

$$w_{t+1} := w_t + \eta \cdot \nabla_w L(\gamma_t; w_t)$$

并重新计算 γ^* 满足最小电阻条件。

三、材料结构反演（寻找最优构成）

1. 给定目标:

$$\sigma_{\text{dyn}}^{\text{target}} > \lambda$$

目标为寻找满足:

$$\exists P : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad \text{使得} \quad \frac{1}{R(\gamma^*(\sigma_0; w))} > \lambda$$

2. 反演求解结构域:

定义属性空间中一类候选属性构型为:

$$\mathcal{P}_\lambda := \left\{ P \mid \exists \gamma, R(\gamma; w) < \frac{1}{\lambda}, \gamma = \arg \min R(\cdot; w) \right\}$$

对任意 $P \in \mathcal{P}_\lambda$, 均可视为潜在室温超导或超流材料构型。

3. 材料构成演化过程:

在材料的构成参数空间（如元素比例、晶格结构、缺陷分布等）中定义属性映射族:

$$P = P(x_1, x_2, \dots, x_m)$$

求解参数族 $\vec{x} \in \mathbb{R}^m$, 使得:

$$P(\vec{x}) \in \mathcal{P}_\lambda$$

即为最优材料合成路径的控制解。

四、系统整合方程

材料的动态控制属性函数为：

$$\sigma_{\text{dyn}}(\sigma_0; w) := \max_{\gamma \in \Gamma_{\sigma_0}} \left\{ \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{|\mu(\sigma_k, \sigma_{k+1}; w)| + \varepsilon} \right)^{-1} \right\}$$

电阻最优路径演化方程为：

$$\frac{dw}{dt} = \eta \cdot \nabla_w L(\gamma_t; w) \quad \text{iff} \quad |R_t - R(\gamma^*)| > \delta_R$$

材料反向设计问题为：

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^m} [R(\gamma^*(P(\vec{x})); w)] \quad \text{s.t.} \quad P(\vec{x}) \in \mathcal{P}_\lambda$$

许可声明 (License)

Copyright (C) 2025 GaoZheng

本文档采用[知识共享-署名-非商业性使用-禁止演绎 4.0 国际许可协议 \(CC BY-NC-ND 4.0\)](#)进行许可。