

ISSN 0253-2778

# 中国科学技术大学学报

第20卷 第1期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No.1

1

1990

# 中国科学技术大学学报

第20卷 第1期 (总第67期)

## 目 录

- $S^7$  无任何 Lie 群构造 ..... 周 坚 徐森林 (1)
- 用原子的  $X_\alpha$  电荷密度计算 Van der Waals 半径 ..... 张庆伟 李俊清 (8)
- 一类非线性方程的函数级数解法 ..... 兰慧彬 汪克林 (15)
- 片状 BGO 闪烁体  $\gamma$  能谱的 Monte Carlo 模拟和实验测量  
..... 林趾荣 李 艳 宫竹芳 (27)
- 计算机作费曼图 ..... 戴青海 马文淦 刘耀阳 (32)
- 用于阿尔芬波研究的 AWH-2 射频发射机的研制 ..... 朱士尧 韩中生 邓必河 许 琰 (38)
- 基于知识的语音识别与理解 ..... 陆洋海 戴蓓菁 (43)
- 十二烷基硫酸钠和辛基酚聚氧乙烯醚混合表面活性剂水溶液体相及界面层相互作用  
研究 ..... 赵叔晔 赵剑曦 (49)
- 活性氧-过氧化氢氧化光泽精发光的研究 ..... 吕小虎 陆明刚 (56)
- APDC-MIBK 萃取流动注射-原子吸收法测定肥料中微量镉  
..... 赵化章, Lars-Göran Danielsson, Folke Ingman (61)
- 单室火灾中浮力修正的雷诺应力模型 ..... 张 辉 范维澄 (67)
- 有机液体导热系数的新推算式  
——通用相关式和醇、烷、芳香族的具体推算式 ..... 陈则韶 葛新石 (75)
- 光波导高灵敏度硫酸亚铁剂量计的研究 ..... 刘占军 吴 欣 (83)
- 磁致伸缩仪 ..... 何正明等 (89)
- 关于 M. J. D. Brand 和 G. A. Rechnity 离子选择电极标准加入迭代法的研究  
..... 王基镛 (94)
- 一种新的莫尔条纹法 ..... 谢建平 明 海 徐继泽 吴云霞 (99)
- 白眉蝮蛇蛇毒降血压组份及其性质的初步研究  
..... 王 淳 黄婉治 何思谦 覃公平 (104)
- 我校实验废水水质情况调查和评价方法研究 ..... 李龙泉等 (110)
- 机械串联系统的可靠性 ..... 熊会民 卢玉明 (116)
- 茶树体内游离氨基酸对儿茶素代谢的影响 ..... 王传友 黄雨初 (122)



# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

VOL. 20 NO.1 (Sum NO.67)

## CONTENTS

- $S^7$  Without Any Construction of Lie Group.....Zhou Jian, Xu Senlin( 1 )  
The Calculation of van der Waals Radii With the Atomic  $X_a$  Densities  
.....Zhang Qingwei, Li Junqing( 8 )  
The Method of Function Series for Solving a Kind of Nonlinear Equations  
.....Lan Huibin, Wang Kelin(15 )  
Monte Carlo Simulation for Spectrum at BGO Scintillator  
.....Lin Zhirong, Li Yian, Gong Zhufang(27 )  
Drawing Feynman Diagrams by Computer  
.....Dai Qinghai, Ma Wengan, Liu Yiaoyang(32 )  
Development of AWH-2 Radiofrequency Generator for Alfvén Wave Studies  
.....Zhu Shiyao, Han Shensheng, Deng Bihe, Xu Yan(38 )  
Speech Recognition and Understanding Based on Knowledge  
.....Lu Yanghai, Dai Beigian(43 )  
Bulk and Surface Interaction of Mixed Ionic and Nonionic Surfactant Aqueous  
Solution of Sodium Dodecyl Sulfate and Octylphenol Polyoxyethylene  
Ether.....Zhao Shuxi, Zhao Jianxi(49 )  
Study of Chemiluminescence of Lucigenin With Active Chlorine and Hydrogen  
Peroxide.....Lu Xiaohu, Lu Minggang(56 )  
Determination of Cadmium in Fertilizer by Atomic Absorption Spectrometry  
After APDC-MIBK Extraction in Continuous Flow  
.....Zhao Huazhang, Lars-Göran Danielsson, Folke Ingman(61 )  
RSM With Modifications of Buoyancy Applied to a Room Fire  
.....Zhang Hui, Fan Weicheng(67 )  
A New Formula for Predicting the Thermal Conductivity of Organic Liquid  
—A Common Correlation Formula and a Calculation Formula for  
Alcohol, Alkane and Aromatic

.....	Chen Zeshao, Ge Xinshi(75)
Study on Enhancing the Measuring Sensitivity of Ferrous Sulfate Dosimeter by OWG Technique.....	Liu Zhanjun, Wu Xin(83)
Two Magnetostriction Apparatuses.....	He Zhengming et al.(89)
Study on M. J. D. Brans and G. A. Rechnitz's Iterative Method of Double Standard Method in ISE Analysis.....	Wang Jirong (94)
A New Method of Moire .....	Xie Jianping, Ming Hai, Xu Jize, Wu Yunxia(99)
Purification and Properties of the Hypotesive Component of Agkistrodon Halys Ussuriensis Venom .....	Wang Chun, Huang Wanzhi, He Sigian, Qin Gongping(104)
Investigation on Laboratory Waste Water at out University and Methods for Evaluation.....	Li Longpuan, et al(110)
A Reliability of Mechanical Series Sestem .....	Xiong Huimin, Lu Yuming(116)
Th <sub>o</sub> Effects of Free Amino Acids on the Metabolism of Catechins in the Tea Plant.....	Wang Chuanyou, Huang Yuchu(122)

## $S^7$ Without Any Construction of Lie Group

Zhou Jian    Xu Senlin<sup>1</sup>

(Department of Mathematics)

### Abstract

In [2], R. Bott and J. Milnor proved that the sphere  $S^n$  is a parallelizable manifold if and only if  $n=1,3$  or  $7$ . In [1], J. F. Adams has proved the above result and that  $S^n$  is an  $H$ -space if and only if  $n=0,1,3$ , or  $7$ . Because a Lie group (in the sense of an analytic Lie group) must be a parallelizable manifold and an  $H$ -space, a natural question then would be whether  $S^n$  is a Lie group for  $n=0,1,3$ , or  $7$ . This paper proves that  $S^7$  is not a Lie group, and even not a topological group. Therefore,  $S^n$  is a Lie group (or a topological group) if and only if  $n=0,1,3$ .

**Key words:** Lie groups, topological groups, homotopy groups, homology groups.

It is known that an  $n$ -dimensional Lie group  $G$  is a parallelizable manifold (The left invariant vector fields  $X_1, \dots, X_n$  determined by a base  $X_1(e), \dots, X_n(e)$  of unit element  $e \in G$  are  $C^\infty$  basic vector fields of  $G$ ) and an  $H$ -space, where an  $H$ -space is a space which admits a continuous product with unit, namely a continuous mapping  $\mu: G \times G \rightarrow G$  with a point  $e \in G$  such that  $\mu(x, e) = \mu(e, x) = x$  for any  $x \in G$ . In [2], R. Bott and J. Milnor has proved that the sphere  $S^n$  is a parallelizable manifold if and only if  $n=1,3$  or  $7$ . In [1], J. F. Adams has proved that  $S^n$  is an  $H$ -space if and onld if  $n=0,1,3$  or  $7$ . One would naturally ask whether  $S^n$  is a Lie group for  $n=0,1,3$ , or  $7$ . At first we are going to prove that  $S^7$  is not a Lie group, and even not a topological group, then we will prove that  $S^n$  is a Lie group (or topological group) if

Received March 25, 1989.

<sup>1</sup> supported partially by TWAS and Chinese Science Fund.

and only if  $n=0,1$ , or  $3$ . Several examples are given of parallelizable manifolds and  $H$ -spaces.

**Example 1** It is easy to prove that  $S^1 = \{(x_1, x_2) \in R^2 | x_1^2 + x_2^2 = 1\} = \{x_1 + ix_2 \in C = R^2 | x_1^2 + x_2^2 = 1\}$  with a multiplication  $\mu$  is a Lie group. Of course it is a parallelizable manifold and an  $H$ -space, where  $C$  is the complex field and  $\mu : C \times C \rightarrow C$ ,  $\mu(x_1 + ix_2, y_1 + iy_2) = (x_1 + ix_2)(y_1 + iy_2) = (x_1y_1 - x_2y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1)$ . For any  $(x_1, x_2) \in S^1$ , set vector field  $X_{(x_1, x_2)} = (-x_2, x_1)$ , then  $X$  is a  $C^\infty$  basic vector field on  $S^1$ , therefore  $S^1$  is a parallelizable manifold.

**Example 2**  $S^3 = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \in R^4 | x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1\} = \{x_1 + ix_2 + jx_3 + kx_4 \in Q = R^4 | x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1\}$ , where a quaternion field  $Q$  is an algebra of dimension 4 over the field  $R$  of real numbers, with a base composed of 4 elements  $1, i, j, k$  whose multiplication table is given by the following formulas:

$$1 \cdot i = i \cdot 1 = i, \quad 1 \cdot j = j \cdot 1 = j, \quad 1 \cdot k = k \cdot 1 = k, \quad i^2 = j^2 = k^2 = -1, \quad i \cdot j = -j \cdot i = k, \\ i \cdot k = -k \cdot i = -j, \quad j \cdot k = -k \cdot j = i.$$

Let  $\mu : Q \times Q \rightarrow Q$ ,  $\mu(x_1 + ix_2 + jx_3 + kx_4, y_1 + iy_2 + jy_3 + ky_4) = (x_1 + ix_2 + jx_3 + kx_4) \cdot (y_1 + iy_2 + jy_3 + ky_4) = (x_1y_1 - x_2y_2 - x_3y_3 - x_4y_4) + i(x_1y_2 + x_2y_1 + x_3y_4 - x_4y_3) + j(x_1y_3 + x_3y_1 + x_4y_2 - x_2y_4) + k(x_1y_4 + x_4y_1 + x_2y_3 - x_3y_2)$ .

By simple computation, we know that  $S^3$  with multiplication  $\mu$  is a Lie group (also a parallelizable manifold and an  $H$ -space). For any  $(x_1, x_2, x_3, x_4) \in S^3$ , set vector fields  $X_{(x_1, x_2, x_3, x_4)}^1 = (-x_2, x_1, -x_4, x_3)$ ,  $X_{(x_1, x_2, x_3, x_4)}^2 = (-x_3, x_4, x_1, -x_2)$ ,  $X_{(x_1, x_2, x_3, x_4)}^3 = (-x_4, -x_3, x_2, x_1)$ , then  $\{X^1, X^2, X^3\}$  is a  $C^\infty$  basic vector field on  $S^3$ , therefore  $S^3$  is a parallelizable manifold.

**Example 3**  $S^7 = \{(x_1, \dots, x_8) \in R^8 | \sum_{l=1}^8 x_l^2 = 1\} = \{x_1 + ix_2 + jx_3 + kx_4 + ex_5 + ie \cdot x_6 + je \cdot x_7 + ke \cdot x_8 \in K = R^8 | \sum_{l=1}^8 x_l^2 = 1\}$ , where Cayley number field  $K = \{p + qe = (x_1 + ix_2 + jx_3 + kx_4) + (x_5 + i \cdot x_6 + j \cdot x_7 + k \cdot x_8)e | x_l \in R, l = 1, \dots, 8\}$  is an algebra of dimension 8 over the field  $R$  of real numbers with a base composed of 8 elements  $1, i, j, k, e, ie, je, ke$ , whose multiplication table is given by the following formulas: for any  $p, q \in Q$ , note  $\bar{q} = \overline{x_5 + ix_6 + jx_7 + kx_8} = x_5 - ix_6 - jx_7 - kx_8$ , then

$$p \cdot q = pq; \quad p \cdot e = pe; \quad p \cdot (qe) = (pq)e; \quad e \cdot q = \bar{q}e; \quad e \cdot e = -1; \quad e \cdot (qe) = -\bar{q}; \quad (pe) \cdot q = (p\bar{q})e; \quad (pe) \cdot e = -p; \quad (pe) \cdot (qe) = -\bar{q}p.$$

Let  $\mu : K \times K \rightarrow K$ ,  $\mu(p_1 + p_2e, q_1 + q_2e) = (p_1 + p_2e) \cdot (q_1 + q_2e) = (p_1q_1 - \bar{q}_2p_2) + (q_2p_1 + p_2\bar{q}_1)e$ . From  $(i \cdot j) \cdot e = ke \neq -ke = (ji) \cdot e = i \cdot (j \cdot e)$ , it follows that the above multiplication of  $K$  is not associative. Therefore,  $S^7$  is an  $H$ -space, but the multiplication of  $K$  does not give the construction of a Lie group.

For any  $(x_1, \dots, x_8) \in S^7$ , set vector fields

$$X_x^1 = (-x_2, x_1, -x_4, x_3, -x_6, x_5, x_8, -x_7),$$

$$X_x^2 = (-x_3, x_4, x_1, -x_2, -x_7, -x_8, x_5, x_6),$$

$$X_x^3 = (-x_4, -x_3, x_2, x_1, -x_8, x_7, -x_6, x_5),$$

$$X_x^4 = (-x_5, x_6, x_7, x_8, x_1, -x_2, -x_3, -x_4),$$

$$X_x^5 = (-x_6, -x_5, x_8, -x_7, x_2, x_1, x_4, -x_3),$$

$$X_x^6 = (-x_7, -x_8, -x_5, x_6, x_3, -x_4, x_1, x_2),$$

$$X_x^7 = (-x_8, x_7, -x_6, -x_5, x_4, x_3, -x_2, x_1),$$

then  $\{X^1, \dots, X^7\}$  is a  $C^\infty$  basic vector field on  $S^7$ , therefore,  $S^7$  is a parallelizable manifold.

The basic vector fields in the above three examples are given respectively by the multiplications of  $C$ ,  $Q$  and  $K$ . For example, in  $K$   $X_x^1 = ix$ ,  $X_x^2 = jx$ ,  $X_x^3 = kx$ ,  $X_x^4 = e \cdot x$ ,  $X_x^5 = (ie) \cdot x$ ,  $X_x^6 = (je) \cdot x$ ,  $X_x^7 = (ke) \cdot x$ .

To prove that  $S^7$  is not a Lie group, we need use the following 8 lemmas.

**Lemma 1** A Connected compact Lie group  $G$  is a multiplicative product of a center  $C(G)$  and a connected simple normal subgroup  $G_1, \dots, G_s$ , i.e.  $G = C(G) \cdot G_1 \cdots G_s$ , where the subgroup  $G^* = G_1 \cdots G_s$  of  $G$  is a connected semisimple normal subgroup, every  $G_i$  is non-commutative and this decomposition is unique when not counting their order.

See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p110, Theorem 2.2.7.

**Lemma 2** A connected commutative Lie group  $G$  is a topological product of a torus and an Euclid space. That is if  $G$  is a complex Lie group, then  $G$  and  $(C^m/Z^m + iZ^m) \times C^n$  are isomorphic; if  $G$  is a real Lie group, then  $G$  and  $(R^m/Z^m) \times R^n$  are isomorphic.

See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p95, Theorem 1.8.7.

**Lemma 3** Compact simple Lie groups have only the following types:

$$A_l = SU(l+1), \dim A_l = l^2 + 2l, l \geq 1;$$

$$B_l = SO(2l+1, R), \dim B_l = 2l^2 + l, l \geq 2;$$

$$C_l = Sp(l), \dim C_l = 2l^2 + l, l \geq 3;$$

$$D_l = SO(2l, R), \dim D_l = 2l^2 - l, l > 4$$

and  $G_2, F_4, E_6, E_7, E_8$ ,  $\dim G_2 = 14$ ,  $\dim F_4 = 52$ ,  $\dim E_6 = 78$ ,  $\dim E_7 = 133$ ,  $\dim E_8 = 248$ .

See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p158—162.

**Lemma 4** Let  $G$  be a connected and simply connected Lie group, then any connected normal subgroup of  $G$  is closed.

See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p97, Theorem 1.8.8.

**Lemma 5** The factor space  $G/H$  of a Lie group  $G$  about its closed subgroup  $H$  is an analytic manifold, such that the natural projection  $p: G \rightarrow G/H$  is analytic, and if  $H$  is normal, then  $G/H$  is a Lie group, which is called a factor group of  $G$  about its closed subgroup  $H$ .



See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p94, Theorem 1.8.3 and see G. Hochschild [6] p94, Corollary 2.2.

**Lemma 6** (E. Cartan) Every closed subgroup  $H$  of a Lie group  $G$  is a Lie subgroup of  $G$  and the topology of  $H$  must be the induced topology.

See Yan Zhida and Xu Yichao [11] p40, Theorem 1.4.1 and see G. Hochschild [6] p92.

**Lemma 7** Let  $p: E \rightarrow B$  be a fibre mapping,  $x_0 \in p^{-1}(b_0) = F$ ,  $b_0 \in B$ , then there exists a natural homomorphism of groups  $\partial: \pi_{n+1}(B, b_0) \rightarrow \pi_n(F, x_0)$ , such that the following sequence is exact:

$$\begin{aligned} & \rightarrow \pi_{n+1}(E, x_0) \rightarrow \pi_{n+1}(B, b_0) \rightarrow \pi_n(F, x_0) \rightarrow \pi_n(E, x_0) \rightarrow \cdots \rightarrow \pi_1(B, b_0) \rightarrow \pi_0(F, x_0) \\ & \rightarrow \pi_0(E, x_0) \rightarrow \pi_0(B, b_0), \end{aligned}$$

where  $\pi_n$  is a homotopy group,  $n=0,1,2,\dots$ .

See R. M. Switzer [10] p56.

**Lemma 8** Let  $H$  be a closed normal subgroup of the Lie group  $G$ , then the natural projection  $p: G \rightarrow G/H$  is a fibre mapping.

See N. Steenrod [9] p28—33.

Now we shall prove that  $S^7$  is not a Lie group.

**Theorem 1**  $S^7$  is not a Lie group.

**Proof** Suppose that  $S^7$  is a Lie group. Because  $S^7$  is compact and connected, from Lemma 1 we know that  $S^7 = C(S^7) \cdot G_1 \cdots G_r$ , where  $G_i$  is connected simple normal subgroup, and  $G^* = G_1 \cdots G_r$  is a connected semisimple normal subgroup. Since  $S^7$  is connected and simply connected, from Lemma 4 it follows that  $G_i$  and  $G^*$  are both closed subgroups. According to Lemma 6,  $G_i$  and  $G^*$  are Lie subgroups of  $G$ . Moreover, compactness of  $S^7$  implies compactness of closed subgroups  $G_i$  and  $G^*$ . From Lemma 3 we know that the compact simple Lie group with its dimension not greater than 7 must be  $SU(2) \cong S^3$  (See C. Chevalley [4] p17—18), therefore  $G_i \cong S^3$ .

Note that  $S = S^7/G^*$ .  $p: S^7 \rightarrow S$  is a natural projection, then  $S = p(S^7) = p(C(S^7))$  is a connected compact commutative Lie group. Hence from Lemma 2 it follows that  $S \cong R^m/Z^m = T^m = \underbrace{S^1 \times \cdots \times S^1}_m$ .

If  $S^7$  is a Lie group, then there must be the following three cases:

(1)  $G^* = \{u\}$  ( $u$  is a unit element of  $G$ ),  $S = T^7$ , then  $S^7 \cong T^7$  and by p61 in [9], p52 in [10], we obtain

$$\begin{aligned} 0 &= \pi_1(S^7) = \pi_1(T^7) = \pi_1(S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1) \cong \pi_1(S^1) \oplus \pi_1(S^1) \\ &\oplus \pi_1(S^1) \oplus \pi_1(S^1) \oplus \pi_1(S^1) \oplus \pi_1(S^1) \oplus \pi_1(S^1) = Z \oplus Z \oplus Z \oplus Z \oplus Z \oplus Z \oplus Z, \text{ a contradiction.} \end{aligned}$$

(2)  $G^* \cong S^3$ ,  $S = T^4$ , then by Lemma 7 and 8, there is an exact sequence:

$$0 = \pi_1(S^7) \rightarrow \pi_1(T^4) \rightarrow \pi_0(S^3) = 0,$$

which implies  $\pi_1(T^4) = 0$ . But  $\pi_1(T^4) = \pi_1(S^1 \times S^1 \times S^1 \times S^1) = Z \oplus Z \oplus Z \oplus Z \neq 0$ , hence here is a contradiction.

(3)  $G^* = S^3 \cdot S^3$ ,  $S = T^l (1 \leq l \leq 3)$ . By using the second coordinate we know that the dimension of  $S^3 \cdot S^3$  is 6 at least. By Lemma 7 and 8, there is an exact sequence:

$$0 = \pi_1(S^7) \rightarrow \pi_1(T^l) \rightarrow \pi_0(S^3 \cdot S^3) = 0$$

which implies  $\pi_1(T^l) = 0$ . But  $\pi_1(T^l) \neq 0$ , here is a contradiction.

**Remark 1** From J. Milnor [7] p114 we know that  $H^3(G) \neq 0$  if  $G$  is a non-abelian compact connected Lie group. (See E. Cartan, "La Topologie des Espaces Représentatives des Groupes de Lie," Paris, Hermann, 1936.)

By using such results, one can prove that  $S^7$  is not a Lie group. In fact, assume that  $S^7$  is a Lie group. Then if  $S^7$  is a non-abelian compact connected Lie group, we have  $H^3(S^7) \neq 0$ , this contradicts with  $H^3(S^7) = 0$  (See R. Bott and Loring W. Tu [3] p5 and p36); if  $S^7$  is an abelian compact connected Lie group, from Lemma 2 it would follow that  $S^7 = T^7$ . According to (1) in the proof of Theorem 1, however we obtained a contradiction again.

**Theorem 2**  $S^n$  is a Lie group if and only if  $n = 0, 1, 3$ .

**Proof** ( $\Rightarrow$ ) Obviously,  $S^0 = \{u, -u\}$  is considered as a 0-dimensional Lie group. By Example 1 and 2,  $S^1$  and  $S^3$  are also Lie groups.

( $\Leftarrow$ ) If  $S^n$  is a Lie group for  $n \geq 1$ , then  $S^n$  is a parallelizable manifold, from [1] and [2] it follows that  $n = 1, 3$  or  $7$ . But Theorem 1 tells us that  $S^7$  is not a Lie group, therefore  $n = 1, 3$ .

**Theorem 3**  $S^n$  is a topological group if and only if  $n = 0, 1, 3$ .

**Proof** ( $\Leftarrow$ ) Since  $S^n$  is a Lie group, it is a topological group for  $n = 0, 1, 3$ .

( $\Rightarrow$ ) Suppose that the manifold  $S^n$  is a topological group for  $n \geq 1$ . From A. M. Gleason [5], D. Montgomery and L. Zippin [8], we know that  $S^n$  is a Lie group. According to Theorem 2,  $n = 1, 3$ .

**Remark 2** Because  $\pi_1(RP^n) = Z_2 \neq 0$ ,  $RP^n$  is not simply connected, where  $RP^n$  is an  $n$ -dimensional real projective space. Therefore, we can not use Lemma 4 to prove that  $RP^n$  is not a Lie group.

From R. Bott and Loring W. Tu [3] p78 it follows that  $H^3(RP^n) = 0$ . With the similar procedures as adopted in proving Remark 1, we can obtain that  $RP^n$  is not a Lie group. Therefore, it is easy to prove that  $RP^n$  is a Lie group if and only if  $n = 0, 1, 3$  and  $RP^n$  is a topological group if and only if  $n = 0, 1, 3$ .

#### Acknowledgements

The authors would like to thank Professor Abdus Salam, International

Atomic Energy Agency and UNESCO for his hospitality at the International Centre for Theoretical Physics, Trieste. The authors also wish to express their sincere gratitude to Professors J. Eells and A. Verjovsky for their interest and encouragement.

#### References

- [ 1 ] Adams J F, On the Non-existence of Elements of Hopf Invariant One, *Ann. of Math.*, **72** (1960), 20—104.
- [ 2 ] Bott R and Milnor J, On the Parallelizability of the Spheres, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **64**(1958), 87—89.
- [ 3 ] Bott R and Tu Loring W, *Differential Forms in Algebraic Topology*, Springer-Verlag N. Y. Inc., 1982.
- [ 4 ] Chevalley C, *Theory of Lie Groups*, Princeton, N. J., Princeton University Press, 1946.
- [ 5 ] Gleason A M, Groups Without Small Subgroups, *Ann. of Math.*, **56** (1952), 193—212.
- [ 6 ] Hochschild G, *The Structure of Lie Groups*, Holden-Day, Inc. San Francisco, London, Amsterdam, 1965.
- [ 7 ] Milnor J, *Morse Theory*, Princeton, N. J., Princeton University Press, 1963.
- [ 8 ] Montgomery D and Zippin L, Small Subgroups of Finite-Dimensional Groups, *Ann. of Math.*, **56**(1952), 213—241.
- [ 9 ] Steenrod N, *The Topology of Fibre Bundles*, Princeton, N. J., Princeton University Press, 1951.
- [10] Switzer R M, *Algebraic Topology-Homotopy and Homology*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, N. Y., 1975.
- [11] Yan Zhida and Xu Yichao, *Lie Group and Lie Algebra*, High Educational Press (China), 1985.

# $S^7$ 无 Lie 群构造

周坚 徐森林

(数学系)

## 摘 要

在[2]中, R. Bott 和 J. Milnor 证明了球面  $S^n$  是可平行流形的充要条件为  $n=1,3$  或  $7$ 。在[1]中, J. F. Adams 证明了上述结果和  $S^n$  是  $H$ -空间的充要条件为  $n=0,1,3$  或  $7$ 。因为 Lie 群 (我们指的是解析 Lie 群) 必须是可平行流形和  $H$ -空间, 因此人们自然要问对于  $n=0,1,3$  或  $7$ ,  $S^n$  是 Lie 群吗? 本文证明了  $S^7$  不是 Lie 群, 甚至也不是拓扑群。于是,  $S^n$  是 Lie 群 (或拓扑群) 的充要条件为  $n=0,1,3$ 。

**关键词:** Lie 群, 拓扑群, 同伦群, 同调群。

# 用原子的 $X_\alpha$ 电荷密度计算 van der Waals 半径

张庆伟 李俊清

(近代化学系)

## 摘 要

利用原子的  $X_\alpha$  电荷密度, 在采用 Norman 规则选取原子球半径基础上, 根据对大量分子中各原子 Norman 半径的计算, 提出一条确定原子在不同分子环境下 van der Waals 半径的简单经验公式。用此公式计算了 18 个常用原子在 81 个分子中的 van der Waals 半径, 并对其物理意义进行了讨论。

**关键词:**  $X_\alpha$  电荷密度, 原子的 Norman 半径, van der Waals 半径

## 1 引言

对原子大小尺寸的描述, 人们通常采用半径这个概念, 化学上一般分为: 金属原子半径、共价半径、离子半径、van der Waals 半径。<sup>[1]</sup> 本文重点讨论后两种半径。最早, 1926年, Goldschmidt 由晶体的结构数据推出了氟离子  $F^-$  和氧离子  $O^{2-}$  的离子半径, 分别为  $1.33 \text{ \AA}$  和  $1.34 \text{ \AA}$ , 并以这两个半径为基准, 确定八十多种离子的半径值<sup>[2,3]</sup>。1927年, Pauling 考虑到离子的半径与离子核外电子的排布情况和核对电子的作用大小有关, 从有效核电荷和屏蔽参数推引出一套离子半径<sup>[2,4]</sup>。迄今, 提出推算离子半径的方法很多, 而较新的却是 1968 年 Landé 由电子密度图获得的离子半径<sup>[3,5]</sup>。对于 van der Waals 半径的计算, 其方法也相当多, 有从 van der Waals 方程  $(P + \frac{n^2 a}{V^2})(V - nb) = nRT$  中  $a$ 、 $b$  参数求得的, 而一般是用 X 射线测晶体中两相邻分子相互“接触”的两个同种原子的距离, 取其一半称为 van der Waals 半径, Pauling 曾用这种方法得到一套 van der Waals 半径<sup>[2,6]</sup>。目前, 最新的方法是 1963 年 Bondi 提出的<sup>[7]</sup>, 他把 van der Waals 半径从非金属元素扩展到部分金属元素。上述各种方法求得的 van der Waals 半径不依赖于分子的特定环境。而实际上, van der Waals 半径应与分子环境有关。本文利用了原子的  $X_\alpha$  电荷密度<sup>[8]</sup>, 根据对八十一个不同分子中各原子 Norman 半径<sup>[9,10]</sup>的计算, 并考虑了分子环境和价电子的具体情况, 总结出一条简便计算 van der Waals 半径的经验公式。并用此公式计算了 18 个常用原子在 81

1989年5月30日收到。



个分子中的 van der Waals 半径。

## 2 方法

本文采用了多重散射 X<sub>α</sub> 方法中的 muffin-tin 模型<sup>[6]</sup>, 用 Norman 规则<sup>[9,10]</sup> 计算了 81 个分子中原子的 Norman 半径, 即把这些分子中各原子的 X<sub>α</sub> 电荷密度叠加成分子的电荷密度, 然后以各原子核为中心作球, 使球内所包围的电子数刚好等于该原子的原子序数, 由此

表 1 18 种元素的平均 Norman 半径 (Å)

H	B	C	N	O	F
0.829	1.15	1.03	0.96	1.00	1.07
		Si	P	S	Cl
		1.36	1.38	1.43	1.48
		Ge	As	Se	Br
		1.38	1.51	1.58	1.68
		Sn	Sb	Te	I
		1.63	1.72	1.77	1.90

表 2 A. Bondi 的三套 van der Waals 半径 (Å)<sup>[7]</sup>

					H	He
$r_b$					1.06	—
$\lambda_B/2$					1.67	1.24
$\bar{r}_w$					1.20	1.40
	B	C	N	O	F	Ne
$r_b$	1.65	1.53	1.46	1.42	1.40	—
$\lambda_B/2$	2.13	1.82	1.61	1.66	1.47	1.32
$\bar{r}_w$	—	1.70	1.55	1.52	1.47	1.54
	Al	Si	P	S	Cl	Ar
$r_b$	—	1.93	1.86	1.80	1.75	—
$\lambda_B/2$	2.51	2.15	1.87	1.91	1.70	1.55
$\bar{r}_w$	—	2.10	1.80	1.80	1.75	1.88
	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
$r_b$	—	1.98	1.94	1.90	1.87	—
$\lambda_B/2$	2.51	2.19	1.96	1.97	1.79	1.64
$\bar{r}_w$	—	—	1.85	1.90	1.85	2.02
	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
$r_b$	—	2.16	2.12	2.08	2.04	2.05
$\lambda_B/2$	2.55	2.27	2.09	2.05	1.90	1.76
$\bar{r}_w$	—	—	—	2.06	1.98	2.16

得到的球半径就是 Norman 半径。我们在计算不同分子中各原子的 Norman 半径过程中，发现尽管任何特定原子所处的分子环境不同，但该原子的 Norman 半径总在某个特定值上下波动，其波动范围一般随分子中各原子吸引、排斥作用不同而变化。对这些不同的 Norman 半径值进行了平均，得到了各种元素的平均 Norman 半径值（见表 1）。以各种不同元素的平均 Norman 半径  $R_N$  为横坐标，以 Bondi 求出的 van der Waals 半径  $r_v$ （见表 2 中的  $r_v$ ）为纵坐标作图（图 1）结果表明：对同一族元素，其 van der Waals 半径与 Norman 半径

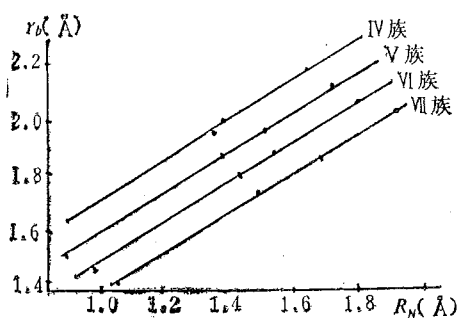


图 1 van der Waals 半径与 Norman 半径的关系图

有相当好的线性关系，并且各族的直线斜率几乎相等，相邻各族的直线间距也近似相同。由此，我们利用元素最外层价电子数这个参数，并根据图中直线和斜率的截距，提出一条简便计算 van der Waals 半径的经验公式

$$R_v = 0.78R_N + 0.095(8 - n) + 0.48 \quad (1)$$

其中， $R_v$  是 van der Waals 半径 (Å)； $R_N$  是未经减缩的 Norman 半径 (Å)； $n$  是原子最外层的价电子数，对于氢 H 原子，式中的  $(8 - n)$  变为  $(2 - n)$ 。

### 3 计算结果

已知分子的构型、键长、键角，则可确定分子中各原子的位置，由此可算出各原子的 Norman 半径，再代入 (1) 式便可求出各原子的 van der Waals 半径。本文计算了 81 个分子中各原子的 Norman 半径，并算出相应的 van der Waals 半径值。结果见表 3。

表 3\*\* 原子在不同分子环境下的 van der Waals 半径及其平均值

元素	化合物 van der Waals 半径 (Å)				平均值
H	H <sub>2</sub> (1.29)	HF (1.07)*	HCl (1.18)	HBr (1.21)	1.23
	HI (1.26)	H <sub>2</sub> O (1.10)	H <sub>2</sub> S (1.22)	H <sub>2</sub> Se (1.25)	
	H <sub>2</sub> Te (1.30)	NH <sub>3</sub> (1.13)	PH <sub>3</sub> (1.26)	AsH <sub>3</sub> (1.28)	
	SbH <sub>3</sub> (1.31)	CH <sub>4</sub> (1.19)	SiH <sub>4</sub> (1.31)	GeH <sub>4</sub> (1.32)	
	SnH <sub>4</sub> (1.32)	CH <sub>3</sub> Cl (1.19)	CH <sub>3</sub> I (1.20)	GeHCl <sub>3</sub> (1.31)	
	CH <sub>3</sub> OH <sup>a</sup> (1.19 <sup>a</sup> , 1.09 <sup>b</sup> )		CH <sub>3</sub> SH <sup>b</sup> (1.19 <sup>a</sup> , 1.21 <sup>b</sup> )		
	B <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (1.26, 1.22)				
F	F <sub>2</sub> (1.39)	HF (1.44)	OF <sub>2</sub> (1.39)	BF (1.39)	1.41
	BF <sub>3</sub> (1.39)	NOF (1.43)	N <sub>2</sub> F <sub>2</sub> (1.40)	NF <sub>3</sub> (1.37)	
	PF <sub>3</sub> (1.39)	AsF <sub>3</sub> (1.43)	SiF <sub>4</sub> (1.42)	GeF <sub>4</sub> (1.43)	
	SeF <sub>4</sub> (1.43)				
	GeClF <sub>3</sub> (1.43)				

元素	化合物 van der Waals 半径 (Å)				平均值
Cl	Cl <sub>2</sub> (1.71)	HCl (1.78)	OCl <sub>2</sub> (1.66)	BCl (1.73)	1.73
	BCl <sub>3</sub> (1.72)	ClO <sub>2</sub> (1.50)	NOCl (1.78)	CCl <sub>4</sub> (1.70)	
	SiCl <sub>4</sub> (1.76)	GeCl <sub>4</sub> (1.75)	SnCl <sub>4</sub> (1.80)	SCl <sub>3</sub> (1.72)	
	S <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (1.72)	SCl <sub>2</sub> (1.72)	SeCl <sub>2</sub> (1.76)	TeCl <sub>2</sub> (1.78)	
	AsCl <sub>3</sub> (1.77)	PCl <sub>3</sub> (1.75)	GeHCl <sub>3</sub> (1.75)	GeClF <sub>3</sub> (1.75)	
	CH <sub>3</sub> Cl (1.70)	SbCl <sub>3</sub> (1.80)			
Br	Br <sub>2</sub> (1.86)	HBr (1.90)	BBr (1.85)	BBr <sub>3</sub> (1.84)	1.88
	NOBr (1.91)	AsBr <sub>3</sub> (1.89)	TeBr <sub>2</sub> (1.91)	PBr <sub>3</sub> (1.86)	
	SiBr <sub>4</sub> (1.88)	SbBr <sub>3</sub> (1.92)	GeBr <sub>4</sub> (1.90)	SnBr <sub>4</sub> (1.91)	
I	I <sub>2</sub> (2.05)	HI (2.09)	AsI <sub>3</sub> (2.07)	SiI <sub>4</sub> (2.06)	2.06
	SbI <sub>3</sub> (2.07)	CH <sub>3</sub> I (2.00)	SnI <sub>4</sub> (2.07)		
O	O <sub>2</sub> (1.42)	CO (1.43)	CO <sub>2</sub> (1.44)	NO <sub>2</sub> (1.43)	1.45
	OF <sub>2</sub> (1.45)	OCl <sub>2</sub> (1.48)	BO (1.49)	ClO <sub>2</sub> (1.48)	
	NOF (1.41)*	NOCl (1.41)	NOBr (1.42)	H <sub>2</sub> O (1.49)	
	CH <sub>3</sub> OH (1.46)				
S	S <sub>2</sub> (1.81)	H <sub>2</sub> S (1.82)	S <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (1.77)	SCl <sub>3</sub> (1.70)	1.77
	SCl <sub>2</sub> (1.76)	CH <sub>3</sub> SH (1.78)			
Se	Se <sub>2</sub> (1.93)	H <sub>2</sub> Se (1.91)	SeCl <sub>2</sub> (1.86)		1.90
Te	H <sub>2</sub> Te (2.09)	TeBr <sub>2</sub> (2.06)	TeCl <sub>2</sub> (2.01)		2.05
N	N <sub>2</sub> (1.52)	NO <sub>2</sub> (1.47)	NOF (1.49)*	NOCl (1.51)	1.52
	NOBr (1.51)	N <sub>2</sub> F <sub>2</sub> (1.53)	NH <sub>3</sub> (1.57)	NF <sub>3</sub> (1.56)	
P	P <sub>4</sub> (1.92)	PH <sub>3</sub> (1.90)	PBr <sub>3</sub> (1.87)	PCl <sub>3</sub> (1.84)	1.84
	PF <sub>3</sub> (1.69)*				
As	As <sub>4</sub> (2.02)	AsH <sub>3</sub> (1.97)	AsI <sub>3</sub> (2.00)	AsBr <sub>3</sub> (1.96)	1.95
	AsCl <sub>3</sub> (1.92)	AsF <sub>3</sub> (1.80)*			
Sb	SbI <sub>3</sub> (2.12)	SbBr <sub>3</sub> (2.10)	SbCl <sub>3</sub> (2.07)	SbH <sub>3</sub> (2.12)	2.10
C	CO (1.63)	CO <sub>2</sub> (1.56)	CCl <sub>4</sub> (1.67)	CH <sub>3</sub> Cl (1.68)	1.66
	CH <sub>3</sub> I (1.71)	CH <sub>3</sub> SH (1.69)	CH <sub>3</sub> OH (1.66)	CH <sub>4</sub> (1.69)	
Si	SiI <sub>4</sub> (2.00)	SiBr <sub>4</sub> (1.94)	SiCl <sub>4</sub> (1.91)	SiF <sub>4</sub> (1.77)*	1.91
	SiH <sub>4</sub> (1.99)				

元 素	化合物 van der Waals 半径 (Å)					平 均 值
Ge	GeHCl <sub>3</sub> (1.95)	GeClF <sub>3</sub> (1.86)*	GeH <sub>4</sub> (2.05)	GeF <sub>4</sub> (1.84)*		1.94
	GeCl <sub>4</sub> (1.94)	GeBr <sub>4</sub> (2.00)				
Sn	SnH <sub>4</sub> (2.16)	SnCl <sub>4</sub> (2.11)	SnBr <sub>4</sub> (2.12)	SnI <sub>4</sub> (2.15)		2.14
B	B <sub>2</sub> (2.03)	BO (1.77)	BBr (1.99)	BC (1.95)		1.83
	BF (1.79)	BBr <sub>3</sub> (1.84)	BCl <sub>3</sub> (1.80)	BF <sub>3</sub> (1.68)*		
	B <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (1.63)					

\* 对含有F的分子, 其它原子的van der Waals半径与其平均值的负偏差最大。

\*\* 本文所需的分子构型键长键角主要参考Handbook of Chemistry and Physics, 66th ed., 1985-1986, CRC Press.

各分子中原子的 Norman 半径均在 M-140 型计算机上进行计算, 程序见参考文献 [9] 第六章。

为了把本文的平均 van der Waals 半径与其它 van der Waals 半径作比较, 表 4 列出了 Pauling 的 van der Waals 半径。

表 4 Pauling 的 van der Waals 半径 (Å)

H	N	O	F	Ne
1.20	1.5	1.40	1.35	1.59
	P	S	Cl	Ar
	1.9	1.85	1.80	1.91
	As	Se	Br	Kr
	2.0	2.00	1.95	2.01
	Sb	Te	I	Xe
	2.2	2.20	2.15	2.20

## 4 讨论

### 4.1 公式的物理意义

$$R_v = 0.78R_N + 0.095(8 - n) + 0.48$$

公式前一项称排斥项, 它含有 Norman 半径。由表 1 可知, 在周期表中, 从左向右或从上到下, Norman 半径有增加趋势。而实际上, 在同一周期中, 由左向右原子半径是逐渐减少的。对此, 我们可认为这里的 Norman 半径仅代表排斥作用, 即由于原子核外电子增加, 电子之间的互相排斥作用增加, 使原子半径倾向增大。公式第二项称吸引项, 它表示核外每增加一个电子, 核中增加一个正电荷, 正电核场加强, 倾向于使原子半径缩小。对于氢原子, 由于最外电子层饱和时电子数为 2, 故公式第二项中  $(8 - n)$  要改变为  $(2 - n)$ 。对于非过渡元素、周期表中相邻元素的原子半径减少平均幅度为  $\sim 0.1 \text{ \AA}^{[3]}$ , 这正好与公式第二项的系数 0.095 吻合。公式第三项为常数项, 或称平衡项。

离子的半径与 van der Waals 半径数值上很接近<sup>[1]</sup>。故此公式可估计各种非金属元素的离子半径。另外, Pauling 曾指出, 原子的 van der Waals 半径一般比该原子的单键共价原子半径大  $0.8\text{\AA}$  左右<sup>[2]</sup>, 因此, 若把公式中的常数项改为  $-0.32$ , 则可估算原子以单键结合时的半径, 称原子共价半径。

#### 4.2 含氟化合物中各元素 van der Waals 半径的特点

从表 3 中可看到, 对含有氟原子的分子, 分子中各原子的 van der Waals 半径与其平均值的负偏差最大。作者认为, 这主要是由于 F 的电负性最大, 因而对其它原子的电子吸引作用较大, 与 F 原子相近的原子成键作用强, 电子云密度大, 故由 Norman 规则划出的 Norman 半径较小, 从而由公式计算得到的 van der Waals 半径一般偏小。

同种原子在不同的分子环境中, 其 van der Waals 半径应该不同。本文所提出的计算方法, 可计算在不同分子环境中的各原子 van der Waals 半径。

刘卫、刘志杰和刘凡镇老师对本工作给予很大帮助, 特在此表示诚挚的感谢!

#### 参 考 文 献

- [1] 潘道皓、赵成大、郑载兴, 物质结构, 人民教育出版社, 1982年。
- [2] Pauling L, *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed., Cornell University Press, 1960.
- [3] 《无机化学》编写组, 《无机化学》上册, 人民教育出版社, 1978年。
- [4] 冯慈珍、陈鉴、杨宏孝、董松琦《无机化学教学参考书 2》, 高等教育出版社, 1985年。
- [5] Lagowski J J, *Modern Inorganic Chemistry*, Marcel Dekker Inc., 1973.
- [6] 唐有祺: 结晶化学, 北京高等教育出版社, 1958.
- [7] Bondi A. *J. Phys. Chem.*, **68** (1964), 441.
- [8] 李俊清, 量子化学中的  $X_\alpha$  方法及其应用, 安徽科学技术出版社, 1984年。
- [9] Norman J G Jr, *Mol. Phys.*, **31** (1976), 1191.
- [10] Norman J G Jr., *J. Chem. Phys.*, **61** (1974), 4630.



# The Calculation of van der Waals Radii With the Atomic $X_{\alpha}$ Densities

Zhang Qingwei Li Junqing

*(Department of Modern Chemistry)*

## Abstract

This paper presents an empirical formula of calculating van der Waals radii of atoms which is based on Norman's radii of atoms in MS- $X_{\alpha}$  method. The van der Waals radii of the 18 atoms in 81 molecules in common use have been calculated by using the formula and the results have been discussed.

**Key words,** atomic  $X_{\alpha}$  densities, atomic Norman radii, van der Waals radii.

# 一类非线性方程的函数级数解法

兰慧彬

汪克林

(基础物理中心)

## 摘 要

本文首次用双曲正割和双曲正切的函数幂级数表示一类非线性方程的特定解,在参数受到某些限制时,这种函数级数解可以被截断为只有几项的形式——截断解。我们既给出了高重(七重) KdV 方程和一些其他具非线性背景势作用的非线性方程的函数级数解,又给出了相应的截断解。

**关键词:** 函数级数解, 截断解, 数学物理。

## 1 序言

非线性现象的研究是目前各个科学领域都十分关心的问题、物理、化学、生物以及工程技术,甚至社会的经济问题等都存在着大量的、重要的非线性问题。因此如何求解非线性方程就成为首要的问题。反散射方法<sup>[1]</sup>是一种比较系统的方法。但由于该方法只适用于可积系统。而实际的物理系统往往是不可积的,故限制其运用。Hirota双线性化方法<sup>[2]</sup>,虽然能解决很多问题,但仍有时求不出严格的显示解<sup>[2]</sup>。所以求解的问题仍常常依赖于经验和尝试,没有一种直接的方法。

在本文里,我们试图用一种比较系统的方法求解某一类非线性方程。这类解都是行波形式的类孤子解。作为这种解法的基本精神是假设要求的解能被展成双曲正切和双曲正割的函数幂级数。由于方程的限定形式我们能完全定出该函数幂级数的系数,这一般由非线性的递推公式给出,虽然我们一般不能证明这样给出的函数级数解一定收敛,但从具体例子,我们相信这样的解就是方程的精确解。特别地,通过对方程参数的适当限制,我们能得到严格的截断解,这正是物理上所需要的。

在第一节里,我们用一个简单的非线性方程显示我们的方法,在其后的几节里我们将用第一节的方法给出一些方程的函数级数解及截断解,最后做一简单的讨论。

## 2.1 函数级数方法

对于如下的非线性方程

$$\frac{du}{dx} = C - Cu^2 \quad (1)$$

我们可假设其有限光滑解为如下形式

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \operatorname{th}^n \mu x \quad (2)$$

这里  $a_n$  为函数幂级数系数,  $\mu$  为一实参数.

将 (2) 代入 (1), 使得方程两边关于函数  $\operatorname{th} \mu x$  相同幂前的系数相等, 我们可有

$$a_{n+1} = [c\delta_{0n} + \mu(n-1)a_{n-1} - CF(a, n)] / [(n+1)\mu] \quad (3)$$

这里

$$F(a, n) = 2a_0 a_n \delta_1 + \sum_{i+j=n} a_i a_j$$

$$\delta_1 = \begin{cases} \frac{1}{2} & n=0 \\ 1 & n \neq 0 \end{cases}$$

另一方面, 对方程 (1) 直接积分, 我们将有

$$u = (b_0 e^{2cx} - 1) / (b_0 e^{2cx} + 1) \quad (4)$$

可以证明, 当做如下的参数变换时

$$\mu = C, \quad a_0 = (b_0 - 1) / (b_0 + 1)$$

解 (4) 就是解 (2), 即非线性方程 (1) 的某种解可以用形如 (2) 式形式的函数级数解严格表示出来. 当然对于 (1) 式这样可以直接积分求解的非线性方程来说, 这样做显得过于复杂. 但是对于不能直接积分的方程式方程组<sup>[3, 4]</sup>, 用此方法我们将得到形如 (2) 式的函数级数解. 在一定精度范围内做为原方程的近似解 (当取函数级数解的项数为有限时), 更重要地, 我们通过对方程加一些参数限制, 我们将能得到物理上感兴趣的严格截断解. 这正是下面几节里要做的.

## 2.2 高重 (七重) KdV 方程的函数级数解及截断解

在这一节里我们将上面的方法用于高重 KdV 方程, 对于如下的七重 KdV 方程.

$$u_t + uu_x + \varepsilon_1 u_x^{(3)} + \varepsilon_2 u_x^{(5)} + \varepsilon_3 u_x^{(7)} = 0 \quad (5)$$

我们求 (5) 的如下形式解

$$u = u(x - \lambda t) = u(\xi) \quad (6)$$

将 (6) 代入 (5), 我们将有

$$-\lambda u + \frac{u^2}{2} + \varepsilon_1 u_\xi^{(2)} + \varepsilon_2 u_\xi^{(4)} + \varepsilon_3 u_\xi^{(6)} + C_0 = 0 \quad (7)$$

这里  $C_0$  为积分常数

我们将求 (7) 式的能表示成如下形式的函数幂级数解

$$u = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \operatorname{sech}^i \mu \xi \quad (8)$$

将 (8) 式代入 (7) 式, 使得函数  $\operatorname{sech} \mu \xi$  的不同幂次前的系数为 0, 我们将有

$$a_n = \left\{ C_0 \delta_{0n} - \frac{1}{2} F(a, n) - G_3(n) a_{n-2} - G_2(n) a_{n-4} - G_1(n) a_{n-6} \right\} \{G_4(n)\}^{-1} \quad (9)$$

$$G_1(n) \equiv \varepsilon_3 \mu^6 \{ -(n-6)(n-7)(n-8)(n-9)(n-10)(n-11) \\ - 30(n-6)(n-7)(n-8)(n-9)(n-10) - 300(n-6)(n-7)(n-8)(n-9) \\ - 1200(n-6)(n-7)(n-8) - 1800(n-6)(n-7) - 720(n-6) \}$$

$$G_2(n) \equiv \varepsilon_3 \mu^6 [3(n-4)(n-5)(n-6)(n-7)(n-8)(n-9) \\ + 75(n-4)(n-5)(n-6)(n-7)(n-8) + 620(n-4)(n-5)(n-6)(n-7) \\ + 2040(n-4)(n-5)(n-6) + 2520(n-4)(n-5) + 840(n-4)] \\ + \varepsilon_2 \mu^4 [(n-4)(n-5)(n-6)(n-7) + 12(n-4)(n-5)(n-6) + 36(n-4) \\ (n-5) + 24(n-4)]$$

$$G_3(n) = \varepsilon_3 \mu^6 [-3(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)(n-6)(n-7) \\ - 60(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)(n-6) - 385(n-2)(n-3)(n-4)(n-5) \\ - 945(n-2)(n-3)(n-4) - 826(n-2)(n-3) - 182(n-2)] + \varepsilon_2 \mu^4 \\ [-2(n-2)(n-3)(n-4)(n-5) - 18(n-2)(n-3)(n-4) - 40(n-2)(n-3) \\ - 20(n-2)] - \varepsilon_1 \mu^2 [(n-2)(n-3) - 2(n-2)]$$

$$G_4(n) = \varepsilon_3 \mu^6 [n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)(n-5) + 15n \\ (n-1)(n-2)(n-3)(n-4) + 65n(n-1)(n-2)(n-3) + 90n(n-1) \\ (n-2) + 31n(n-1) + n] + \varepsilon_2 \mu^4 [n(n-1)(n-2)(n-3) + 6n \\ (n-1)(n-2) + 7n(n-1) + n] + \varepsilon_1 \mu^2 n^2 - \lambda + \delta_1 a_0$$

观察 (8) 和 (7) 式, 要想有  $i = M$  ( $M$  待定) 的截断解, 方程中非线性项  $u^2/2$  与最高导数项  $\varepsilon_3 u^{(6)}$  给出的关于函数  $\operatorname{sech} \mu \xi$  的最高幂次应相等。由于  $\operatorname{sech} \mu \xi$  的二次导数相当于增加二次幂, 我们可有

$$2M = M + 6 \quad (10)$$

从 (10) 我们知, 截断解在  $i = 6$  处, 于是由条件

$$a_i = 0, \quad i \geq 7. \quad (11)$$

我们有参数方程 (为简单, 已令  $a_1 = a_3 = a_5 = 0$ )

$$64\varepsilon_3 \mu^6 + 16\varepsilon_2 \mu^4 + 4\mu^2 \varepsilon_1 + a_0 - \lambda = 0 \quad (12)$$

$$G_4(4) a_4 = -\frac{1}{2} a_2^2 - G_3(4) a_2 \quad (13)$$

$$G_4(6) a_6 = -a_2 a_4 - a_2 G_2(6) \quad (14)$$

$$G_3(8) a_6 = -\frac{1}{2} a_4^2 - a_2 a_6 - G_1(8) a_2 - a_2 G_2(8) \quad (15)$$

$$G_2(10) a_6 = -a_4 a_6 - G_1(10) a_4 \quad (16)$$

$$G_1(12) a_6 = -\frac{1}{2} a_6^2 \quad (17)$$

由 (12) ~ (17) 式, 我们可求得

$$a_0 = 665280 \varepsilon_3 \mu^6 \equiv \delta \varepsilon_3 \mu^6 \quad (18)$$

$$a_4 = -665280 \varepsilon_3 \mu^6 + 3326.4 \varepsilon_2 \mu^4 \equiv \nu \varepsilon_3 \mu^6 + \omega \varepsilon_2 \mu^4 \quad (19)$$

$$a_2 = -\frac{1}{660240} \{-665280 \times 88032 \varepsilon_3 \mu^6 - 5241874176 \varepsilon_2 \mu^4 \\ + 8326644.48 \varepsilon_2^2 \mu^2 / \varepsilon_3 - 27941760 \varepsilon_1 \mu^2\} \\ = \alpha \varepsilon_3 \mu^6 + \beta \varepsilon_2 \mu^4 + \gamma \varepsilon_2^2 \mu^2 / \varepsilon_3 + d \varepsilon_1 \mu^2 \quad (20)$$

而限制  $\mu, \lambda, a_0$  的方程为:

$$\lambda - a_0 = 64 \varepsilon_3 \mu^6 + 16 \varepsilon_2 \mu^4 + 4 \mu^2 \varepsilon_1 \quad (21)$$

$$A_1 \varepsilon_3^2 \mu^6 + A_2 \varepsilon_2 \varepsilon_3 \mu^4 + \mu^2 (A_3 \varepsilon_2^2 + A_4 \varepsilon_1 \varepsilon_3) + A_5 \varepsilon_1 \varepsilon_2 + A_6 \frac{\varepsilon_2^2}{\varepsilon_3} = 0 \quad (22)$$

$$B_1 \varepsilon_2^2 \mu^6 + B_2 \varepsilon_2 \varepsilon_3 \mu^6 + \mu^4 (\varepsilon_2^2 B_3 + \varepsilon_1 \varepsilon_3 B_4) + \mu^2 (\varepsilon_1 \varepsilon_2 B_5 + \varepsilon_2^3 B_6 / \varepsilon_3) \\ + B_7 \varepsilon_2^2 \varepsilon_1 / \varepsilon_3 + B_8 \varepsilon_1^2 + B_9 \varepsilon_1^2 / \varepsilon_3^2 = 0 \quad (23)$$

这里  $A_1 \sim A_6$  和  $B_1 \sim B_9$  为数字因子, 定义为

$$A_1 = 4126.5 \times 89152 \times 665280 - 658560 \times 366037056$$

$$A_2 = 65856 \times 327617136 + 190413216 \times 3326.4 + 120 \times 366037056 + 9573480 \times 665280$$

$$A_3 = 520415.28 \times 65856 - 3206.4 \times 327617136 + 4126.5 \times 3459456$$

$$A_4 = 6720 \times 2794176 + 214578 \times 665280$$

$$A_5 = 665280 \times 4126.5 - 27941760 \times 3206.4$$

$$A_6 = 32064 \times 52041.528$$

$$B_1 = 1251790848 \times 4126.5^2$$

$$B_2 = 162434764.8 \times 4126.5^2 + 86688 \times 32761713.6 \times 4126.5$$

$$B_3 = -8668.8 \times 520415.28 \times 4126.5 - 798336 \times 4126.5^2 + 15885678 \times 3276171.36$$

$$B_4 = -8515584 \times 4126.5^2 + 86688 \times 2794176 \times 4126.5$$

$$B_5 = -322653.36 \times 520415.28$$

$$B_6 = -39916.8 \times 4126.5^2 + 3226533.36 \times 279417.6 - 4126.5 \times 196570281.6$$

$$B_7 = -2769417 \times 52041.528$$

$$B_8 = -68547.528 \times 2794176$$

$$B_9 = 26020.764 \times 52041.528$$

这样, 我们用函数级数解法求得了形如 (8) 和 (9) 式的函数级数解和如下的严格截断解:

$$u = a_0 + a_2 \operatorname{sech}^2 \mu (x - \lambda t) + a_4 \operatorname{sech}^4 \mu (x - \lambda t) + a_6 \operatorname{sech}^6 \mu (x - \lambda t) \quad (24)$$

这里  $a_0, a_4, a_6$  由 (18) ~ (20) 给出, 而  $\mu, \lambda$  和  $a_0$  由 (21) ~ (23) 隐含给出

### 2.3 推广的Burge-KdV方程的函数级数解及截断解

在这节中, 我们将考虑文[2]中处理过的推广的Burge-KdV方程

$$u_t + \alpha u u_x + \beta u_{x x} + \delta u_x^{(3)} + \gamma u_x^{(4)} = 0 \quad (25)$$

在文[2]中, 虽然用双线性化方法将其写成了三线性形式, 但无法求得显示的解,



同前方法, 我们求能展成如下形式的函数级数解

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t h^n \mu(x - \lambda t) \quad (26)$$

我们将有

$$\begin{aligned} a_{n+3} = & \langle C_0 \delta_{n_0} + \lambda a_n - \frac{\alpha}{2} F(a, n) - a_{n+2} \{ \delta \mu^2 (n+2)(n+1) \} + a_{n+1} \{ \gamma \mu^3 [3(n+1) \\ & (n-1)n + 6(n+1)n + 2(n+1)] - \beta \mu (n+1) \} + 2n^2 \delta \mu a_n - a_{n-1} \{ \gamma \mu^3 \\ & [3(n-1)(n-2)(n-3) + 12(n-1)(n-2) + 8(n-1)] - \beta \mu (n-1) \} \\ & + a_{n-3} \{ \gamma \mu^3 [(n-3)(n-4)(n-5) + 6(n-3)(n-4) + 6(n-3)] \} \\ & - a_{n-2} \{ \delta \mu^2 (n-2)(n-1) \} \rangle \cdot \langle \gamma \mu^3 (n+3)(n+2)(n+1) \rangle^{-1} \end{aligned} \quad (27)$$

同时, 我们可由 (25) 和 (26) 式知, 截断解发生在  $n=3$  处, 因此由条件

$$a_i = 0, \quad i \geq 4 \quad (28)$$

我们可有参数方程组

$$a_3 \gamma \mu^3 60 - \frac{\alpha}{2} a_3^2 = C_0 \quad (\text{积分常数}) \quad (29)$$

$$a_2 \gamma \mu^3 24 - 12 \delta \mu^2 a_3 - \alpha a_3 a_2 = 0 \quad (30)$$

$$-a_3 (114 \gamma \mu^3 - 3 \beta \mu) + 6 \gamma \mu^3 a_1 - 6 \delta \mu^2 a_2 - \frac{\alpha}{2} (2 a_3 a_1 + a_2^2) = 0 \quad (31)$$

$$18 \delta \mu^2 a_3 - 2 \delta \mu^2 a_1 - a_2 \{ 40 \gamma \mu^3 - 2 \beta \mu \} - \frac{\alpha}{2} (2 a_1 a_2 + 2 a_0 a_3) + \lambda a_3 = 0 \quad (32)$$

$$a_3 (60 \gamma \mu^3 - 3 \beta \mu) + 8 \delta \mu^2 a_2 - 8 \gamma \mu^3 a_1 + \beta \mu a_1 - \frac{\alpha}{2} (a_1^2 + 2 a_0 a_3) + \lambda a_2 = 0 \quad (33)$$

$$-6 \delta \mu^2 a_3 + (16 \gamma \mu^3 - 2 \beta \mu) a_2 + 2 \delta \mu^2 a_1 - \alpha a_0 a_1 + \lambda a_1 = 0 \quad (34)$$

$$6 \gamma \mu^3 a_3 + 2 \delta \mu^2 a_2 - (2 \gamma \mu^3 - \beta \mu) a_1 + \frac{\alpha}{2} a_0^2 - \lambda a_0 = 0 \quad (35)$$

当  $C_0 = 0$  时, 从 (29) ~ (35) 式, 我们解得

$$Y \equiv (30 \times 114 \delta \mu^2 \beta \gamma - 960 \times 114 \delta \gamma^2 \mu^4) \cdot (120 \times 114 \gamma^2 \mu^2 - 360 \beta \gamma + 22.5 \delta^2)^{-1} \quad (36)$$

$$a_3 = 120 \gamma \mu^3 / \alpha \quad (36)$$

$$a_2 = -15 \delta \mu^2 / \alpha \quad (37)$$

$$a_1 = (120 \times 114 \gamma \mu^3 - 360 \beta \mu + 22.5 \delta^2 \mu / \gamma) / (-114 \alpha) \quad (38)$$

$$\lambda = \alpha a_0 - 2 \delta \mu^2 Y \quad (39)$$

$$a_0 = \langle 2 \delta \mu^2 - Y \pm \{ (2 \delta \mu^2 - Y)^2 - 2 [720 \gamma^2 \mu^6 - 30 \delta^2 \mu^4 + \frac{1}{114} (2 \gamma \mu^3 - \beta \mu) \rangle$$

$$(120 \times 114 \gamma \mu^3 - 360 \beta \mu + 22.5 \delta^2 \mu / \gamma) \}^{\frac{1}{2}} \rangle \cdot 2 / \alpha \quad (40)$$

$$\mu^2 = (3780 \beta^2 \gamma^2 - 1113.75 \delta^2 \beta \gamma + 54.84375 \delta^4) / [114 \cdot (1800 \beta \gamma^3 - 112.5 \gamma^2 \delta^2)] \quad (41)$$

而  $\delta, \beta$  和  $\gamma$  则满足如下的自洽方程

$$A_1 \delta^{12} + B_1 \beta \gamma \delta^{10} + C_1 \gamma^2 \delta^{10} + D_1 \gamma^4 \delta^8 + E_1 \gamma^2 \beta^2 \delta^8 + F_1 \beta \gamma^3 \delta^8 + G_1 \beta^3 \gamma^3 \delta^6$$

$$\begin{aligned}
 &+ H_1 \beta^3 \gamma^5 \delta^6 + I_1 \beta^2 \gamma^4 \delta^6 + J_1 \beta^4 \gamma^4 \delta^4 + K_1 \beta^2 \gamma^6 \delta^4 + L_1 \beta^3 \gamma^5 \delta^4 + M_1 \beta^4 \gamma^6 \delta^2 \\
 &+ N_1 \beta^3 \gamma^7 \delta^2 + P_1 \beta^5 \gamma^7 + Q_1 \beta^4 \gamma^8 = 0
 \end{aligned} \tag{42}$$

这里  $A_1 \sim Q_1$  为数值因子, 定义如下

$$\begin{aligned}
 A_1 &= -I \cdot M \cdot B + Q \cdot M^2, \quad B_1 = 2 \cdot Q \cdot L \cdot M + I \cdot (M \cdot A - L \cdot B) \\
 C_1 &= S \cdot M^2 - J, \quad D_1 = -P \cdot M^2 + I \cdot M \cdot B \\
 E_1 &= Q \cdot (L^2 + 2 \cdot K \cdot M) + I \cdot (L \cdot A - K \cdot B) \\
 F_1 &= -B^2 \cdot E + J \cdot (M \cdot A - L \cdot B) - G \cdot M \cdot B + N \cdot M^2 + 2 \cdot L \cdot S \cdot M \\
 G_1 &= I \cdot K \cdot A + 2 \cdot Q \cdot K \cdot L, \quad H_1 = H \cdot (M \cdot A - L \cdot B) - 2P \cdot L \cdot M \\
 I_1 &= B^2 \cdot D + 2 \cdot A \cdot B \cdot E + G \cdot (M \cdot A - L \cdot B) + J \cdot (L \cdot A - K \cdot B) - F \cdot M \cdot B \\
 &\quad + 2 \cdot N \cdot L \cdot M + S \cdot (L^2 + 2 \cdot K \cdot M) \\
 J_1 &= QK^2, \quad K_1 = H \cdot (L \cdot A - K \cdot B) - P \cdot (L^2 + 2 \cdot K \cdot M) \\
 L_1 &= 2 \cdot S \cdot K \cdot L + N(L^2 + 2 \cdot K \cdot M) + J \cdot K \cdot A + G \cdot (L \cdot A - K \cdot B) \\
 &\quad + F(M \cdot A - L \cdot B) - A^2 \cdot E + B^2 \cdot C - 2A \cdot B \cdot D \\
 M_1 &= A^2 \cdot D - 2 \cdot A \cdot B \cdot C + F \cdot (L \cdot A - K \cdot B) + G \cdot K \cdot A + 2 \cdot K \cdot L \cdot N + S \cdot K^2 \\
 N_1 &= H \cdot K \cdot A - 2 \cdot P \cdot K \cdot L, \quad P_1 = A^2 \cdot C + F \cdot A \cdot K + N \cdot K^2 \\
 Q_1 &= -P \cdot K^2
 \end{aligned}$$

而  $A \sim S$  定义为

$$\begin{aligned}
 A &= 1800, \quad B = 112.5, \quad C = \frac{-360 \times 23760}{114^2} \\
 D &= \frac{2527200}{114^2}, \quad E = \frac{215662.5}{114^2}, \quad F = \frac{-2332800}{114} \\
 G &= 907200, \quad H = -21600, \quad I = \frac{22.5^3}{2 \times 114^2} \\
 J &= \frac{22.5 \times 12780}{114}, \quad K = \frac{3780}{114}, \quad L = \frac{-1113.75}{114} \\
 M &= \frac{54.84375}{114}, \quad N = 2073600, \quad P = 13132800 \\
 Q &= \frac{60 \times 22.5^2}{114}, \quad S = 1379700
 \end{aligned}$$

因此, 当我们选择积分常数  $C_0$  为 0 时, 我们有如下形式的严格截断解

$$u = a_0 + a_1 \text{th}^\mu(x - \lambda t) + a_2 \text{th}^{2\mu}(x - \lambda t) + a_3 \text{th}^{3\mu}(x - \lambda t) \tag{43}$$

当  $C_0 \neq 0$  时, 由方程 (25) 可知, 此时有解

$$u = a_0 + C_1 + a_1 \text{th}^\mu(x - \lambda_0 t) + a_2 \text{th}^{2\mu}(x - \lambda_0 t) + a_3 \text{th}^{3\mu}(x - \lambda_0 t) \tag{44}$$

这里  $\lambda_0 = \lambda - \alpha C_1^2$

而  $C_1$  满足

$$\alpha C_1^2 - 2\lambda C_1 + 2C_0 = 0$$

此时,  $\mu, a_1, a_2, a_3$  和  $a_0$  仍满足 (36) ~ (38) 和 (40) ~ (41) 式, 但 (39) 式要变为

$$\lambda = \alpha C_1^2 + \alpha a_1 - 2\delta \mu^2 Y \tag{45}$$

## 2.4. 推广的 $\varphi^4$ 方程的函数级数解及截断解

在这节中, 我们讨论具有阻尼和外力作用下的  $\varphi^4$  方程

$$\varphi_{,t} - C_0^2 \varphi_{,xx} + K_2 \varphi - K_4 \varphi^3 + \alpha \varphi_{,t} = F_0 \quad (46)$$

仿上同样程序, 我们将有如下形式的函数级数解

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \operatorname{th}^n \mu(x - \lambda t) \quad (47)$$

其中

$$a_{n+2} = \{a_n [3\delta_2 K_4 a_0^2 - K_2 + 2n^2 (\lambda^2 - C_0^2) \mu^2] + \lambda \alpha \mu (n+1) a_{n+1} - \lambda \alpha \mu (n-1) a_{n-1} - (\lambda^2 - C_0^2) (n-2)(n-1) a_{n-2} + K_4 F_1(a, n) + \delta_{0,n} F_0\} \cdot \{(\lambda^2 - C_0^2) \mu^2 \cdot (n+2)(n+1)\}^{-1} \quad (48)$$

而

$$\delta_2 = \begin{cases} \frac{1}{3} & n=0 \\ 1 & n \neq 0 \end{cases} \quad (48)$$

$$F_1(a, n) = \sum_{\substack{i+j+k=0 \\ i, j, k < n}} a_i \cdot a_j \cdot a_k \quad (50)$$

同时, 我们还有如下形式的截断解

$$u = a_0 + a_1 \operatorname{th} \mu(x - \lambda t) \quad (51)$$

其中

$$a_1 = \pm [(K_2 a_0 - K_4 a_0^3 - F_0) / (3K_4 a_0)]^{1/2} \quad (52)$$

$$\mu = \pm \frac{1}{C_0} \left\{ \frac{9K_4^2 a_0^2 a_1^2}{\alpha^2} - \frac{K_4 a_1^2}{2} \right\}^{1/2} \quad (53)$$

$$\lambda = \pm \left\{ C_0^2 + \frac{K_2 - 3K_4 a_0^2}{2\mu^2} \right\}^{1/2} \quad (54)$$

而  $a_0$  由方程

$$a_0^3 - \frac{1}{4} \frac{K_2}{K_4} a_0 - \frac{F_0}{8K_4} = 0 \quad (55)$$

所限制

由 (52) ~ (55) 我们知解 (51) 存在条件为

$$\begin{cases} \alpha^2 \leq 18K_4 a_0^2 \\ F_0 \leq \frac{2\sqrt{3}}{9} \sqrt{\frac{K_2^3}{K_4}} \end{cases} \quad (56)$$

## 2.5 有背景作用的非线性原子链方程的函数级数解及截断解

这节中我们考虑两种背景势作用下的非线性原子链<sup>[5]</sup>.

$$5A. \text{ 方程 } y_{,t} = C_0^2 y_{,xx} + P_0 y_x y_{,xx} + q_0 y_x^2 y_{,xx} + h y_{,xxxx} - \sum_{i=0}^7 \epsilon_i y^i \quad (57)$$

此时, 我们有级数解:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \text{th}^n \mu(x - \lambda t) \quad (58)$$

其中  $a_n$  由如下递推公式给出

$$\begin{aligned} a_{n+4} = & \langle -2\mu^2(\lambda^2 - C_0^2)[na_n - a_{n-2}(n-2)] - P_0\mu^3[F_2[n+3] - 3F_2[n+1] \\ & + 3F_2[n-1] - F_2[n-3]] + 2\mu^3P_0[F_3[n+1] - 2F_3[n-1] + F_3[n-3]] \\ & + q_0\mu^4[F_4[n+4] - 4F_4[n+2] + 6F_4[n] - 4F_4[n-2] + F_4[n-4]] - \\ & - 2q_0\mu[F_5[n+2] - 3F_5[n] + 3F_5[n-2] - F_5[n-4]] + h\mu^4[-4a_{n+2} \\ & \cdot (n+2)(n+1)n(n-1) + 6a_n(n-1)n(n-2)(n-3) - 4a_{n-2}(n-2)(n-3) \\ & \cdot (n-4)(n-5) + a_{n-4}(n-4)(n-5)(n-6)(n-7)] - h\mu^4 \cdot 12[a_{n+2}(n+2) \\ & \cdot (n+1)n - 3a_n n(n-1)(n-2) + 3a_{n-2}(n-2)(n-3)(n-4) - a_{n-4}(n-4) \\ & \cdot (n-5)(n-6)] + h\mu^4[36(n-4)(n-5)a_{n-4} - 80a_{n-2}(n-2)(n-3) \\ & + 52a_n n(n-1) - 8a_{n+2}(n+2)(n+1)] + \mu^4[16na_n - 40(n-2)a_{n-2} \\ & + 24(n-4)a_{n-4}] + \varepsilon_0\delta_0 n + \varepsilon_1 a_n + \varepsilon_2 F(a, n) + \varepsilon_3 F_1(a, n) + \varepsilon_4 F_6[n] \\ & + \varepsilon_5 F_7[n] + \varepsilon_6 F_8[n] + \varepsilon_7 F_9[n] \rangle \langle -h\mu^4(n+4)(n+3)(n+2)(n+1) \rangle^{-1} \end{aligned}$$

这里  $F_2[n] \sim F_9[n]$  定义如下

$$F_2[n] = \sum_{i+j=n} i(j^2 - j)a_i a_j$$

$$F_3[n] = \sum_{i+j=n} i a_i j a_j$$

$$F_4[n] = \sum_{i+j+k=n} i j (k^2 - k) a_i a_j a_k$$

$$F_5[n] = \sum_{i+j+k=i} i j k a_i a_j a_k$$

$$F_6[n] = \sum_{i+j+k+l=n} a_i a_j a_k a_l$$

$$F_7[n] = \sum_{i+j+k+l+m=n} a_i a_j a_k a_l a_m$$

$$F_8[n] = \sum_{i_1+i_2+\dots+i_6=n} a_{i_1} a_{i_2} a_{i_3} a_{i_4} a_{i_5} a_{i_6}$$

$$F_9[n] = \sum_{i_1+i_2+\dots+i_7=n} a_{i_1} a_{i_2} a_{i_3} a_{i_4} a_{i_5} a_{i_6} a_{i_7}$$

同时我们还有如下形式的截断解

$$y = a_1 \text{th} \mu(x - \lambda t) \quad \text{即 } (x - \lambda t) \quad (60)$$

其中

$$a_1 = \pm \left( \frac{2q_0}{\varepsilon_7} \right)^{\frac{1}{4}} \mu \equiv \pm \delta \mu \quad (61)$$

$$\mu = \pm \sqrt{\frac{24h \mp 2p_0 \delta - \varepsilon \delta^4}{6q_0 \delta^2}} \quad (62)$$

$$\lambda = \pm \left[ C_0^2 \pm 2P_0 \delta \mu^2 - 20h\mu^2 + 3q_0^2 \mu^4 \delta^2 - \frac{\varepsilon_3 \delta_2}{2} \right]^{1/2} \quad (63)$$

关于  $\varepsilon_1 \sim \varepsilon_7$  (已令  $\varepsilon_2 = \varepsilon_4 = \varepsilon_6 = 0$ ) 的自洽方程

$$\mp 2P_0 \delta \mu^4 - 4\delta^2 \mu^6 q_0 + 24h\mu^4 + \mu^2 \varepsilon_3 \delta^2 + \varepsilon_1 = 0 \quad (64)$$

$$5B. \text{ 方程: } y_{,t} = C_0^2 y_{,x} + P_0 y_{,x} y_{,x} + q_0 y_{,x}^2 y_{,x} + h y_{,x,x,x} - \sum_{i=0}^5 \varepsilon_i y^i \quad (65)$$

此时, 我们可有形如 (58) ~ (59) 的函数级数解。不过  $\varepsilon_6 = \varepsilon_7 = 0$ 。另外我们可求得 (66) 式的如下截断解

$$y = a_0 + a_2 \text{th}^2 \mu(x - \lambda t) \quad (67)$$

$$\text{其中 } a_0 = -\frac{P_0}{2q_0}$$

$$\mu = \pm \left[ \pm \frac{\varepsilon_5 P_0}{32q_0^2} \left( \frac{24q_0}{\varepsilon_5} \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

$$a_2 = \mp \mu^2 \left( \frac{24q_0}{\varepsilon_5} \right)^{1/2} \equiv \mp \mu^2 \delta_0$$

$$\lambda = \pm \left[ c_0^2 + P_0 a_0 + q_0 a_2^2 - \left( 48a_2^2 \mu^2 q_0 + 240\mu^2 h \pm \frac{3a_0 \varepsilon_3}{\delta_0} \pm \frac{10a_0^3 \varepsilon_5}{\delta_0} \right) / 6 \right]^{1/2}$$

而  $\varepsilon_1, \varepsilon_3$  与  $\varepsilon_5$  ( $\varepsilon_2 = \varepsilon_4 = 0$ ) 有关系

$$\varepsilon_3 = \left[ \frac{5h}{q_0} - \frac{P_0^2}{q_0^2} \right] \varepsilon_5$$

$$\varepsilon_1 = \left[ -\frac{24192 P_0^4}{32768 q_0^4} - \frac{138 P_0^2 h}{32 q_0^3} \pm \frac{2P_0 \delta_3}{q_0 \delta_0} \pm \frac{P_0^3}{6\delta_0 q_0^3} - \frac{3P_0^2 \delta_3}{4q_0^2} - \frac{5P_0^4}{q_0^4} \right] \varepsilon_5$$

$$\frac{\varepsilon_5^{3/2} \cdot 18\sqrt{6} P_0^5}{32^3 P_0^{15/2}} \pm \frac{64h P_0^3 24^{3/2}}{32^3 \delta_0 q_0^{9/2}} \varepsilon_5^{1/2} \pm \frac{24 P_0^2}{32^2 q_0^3} \left( -\frac{\varepsilon_5 P_0}{2q_0 \delta} - \frac{10\varepsilon_3 P_0^3}{24\delta_0^2 q_0^3} \right) - \frac{\delta_4 P_0}{2q_0}$$

$$- \frac{\varepsilon_3 P_0^3}{8q_0^3} - \frac{P_0^5}{32q_0^5} = 0$$

其中

$$\varepsilon_0 = (24q_0/\varepsilon_5)^{1/2}$$

$$\varepsilon_3 = 5h/q_0 - P_0^2/(4q_0^2)$$

$$\delta_4 = \left[ -\frac{24192 P_0^4}{32768 q_0^4} - \frac{138 P_0^2 h}{32 q_0^3} \pm \frac{2P_0 \delta_3}{q_0 \delta_0} \pm \frac{P_0^3}{6\delta_0 q_0^3} - \frac{3P_0^2 \delta_3}{4q_0^2} - \frac{5P_0^4}{q_0^4} \right]$$

## 2.6 修正的KdV方程的函数级数解及截断解

这一节我们讨论如下的有背景作用的修正的 KdV 方程:

$$u_t + \alpha u^2 u_x + \gamma u_{,x,x} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 u + \varepsilon_2 u^2 + \varepsilon_3 u^3 \quad (68)$$

仿上, 我们将有函数级数解

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \text{th}^n \mu(x - vt) \quad (69)$$

其中  $a_n$  由如下递推公式给出:

$$\begin{aligned}
a_{n+3} = & \langle -V\mu(n+1)a_{n+1} + V\mu(n-1)a_n + \frac{\alpha\mu}{3}[(n+1)F_1(a, n+1)a_{n+1} \\
& - (n-1)F_1(a, n-1)a_{n-1}] + \gamma\mu^3[-3(n+1)n(n-1)a_{n+1} + 3(n-1) \\
& (n-2)(n-3)a_{n-1} - (n-3)(n-4)(n-5)a_{n-3}] - 6\gamma\mu^3[(n+1)na_{n+1} \\
& - 2a_{n-1}(n-1)(n-2) + a_{n-3}(n-3)(n-4)] + \gamma\mu^3[-2(n+1)a_{n+1} \\
& + 8(n-1)a_{n-1} - 6(n-3)a_{n-3}] - [\varepsilon_0 + \varepsilon_1 a_n + \varepsilon_2 F(a, n) \\
& + \varepsilon_3 F_1(a, n)] \cdot \langle -\gamma\mu^3(n+3)(n+2)(n+1) \rangle^{-1}
\end{aligned} \quad (70)$$

同时我们有截断解

$$u = a_0 + a_1 \operatorname{th} \mu(x - Vt) \quad (71)$$

其中

$$\begin{aligned}
a_0 &= \pm \frac{\varepsilon_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}} \\
\mu &= \pm \left( \frac{-\varepsilon_1 \alpha}{6\gamma \varepsilon_3} - \frac{3\varepsilon_3^2}{4\alpha^2} \mp \frac{\varepsilon_2}{\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \right)^{1/2} \\
a_1 &= \pm \mu \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}} \\
V &= \alpha a_0^2 - \frac{9\varepsilon_3^2 \gamma}{\alpha} + \frac{7\varepsilon_1 \alpha}{3\varepsilon_3} + \frac{21\gamma \varepsilon_3^2}{2\alpha^2} \pm \varepsilon_2 \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}}
\end{aligned}$$

而  $\varepsilon_0 \sim \varepsilon_3, \gamma, \alpha$  由如下参数方程限制

$$\begin{aligned}
& \pm \frac{\varepsilon_2}{\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \left[ -\frac{9\varepsilon_3^2 \gamma}{\alpha} + \frac{8\varepsilon_1 \alpha}{3\varepsilon_3} + \frac{12\varepsilon_3^2 \gamma}{\alpha^2} \pm \varepsilon_2 \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}} \pm \frac{2\gamma \varepsilon_2}{\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \right] \\
& \pm \frac{\varepsilon_1 \alpha}{6\gamma \varepsilon_3} \left( \varepsilon_2 \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}} + \frac{2\gamma \varepsilon_2}{\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \right) \pm \frac{3\varepsilon_3^2}{4\alpha^2} \left( \varepsilon_2 \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}} + \frac{2\gamma \varepsilon_2}{\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \right) \\
& - \frac{3\varepsilon_3 \varepsilon_1}{2} + \frac{4\varepsilon_1^2 \alpha}{9\varepsilon_3^2 \gamma} + \frac{4\varepsilon_1 \varepsilon_3}{\alpha} - \frac{27\varepsilon_3^4 \gamma}{4\alpha^3} + \frac{9\gamma \varepsilon_3^4}{\alpha^4} - \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_3}{2\alpha} - \frac{3\varepsilon_3^4 \gamma}{4\alpha^4} \\
& = \mp \varepsilon_0 \sqrt{\frac{\alpha}{6\gamma}} \mp \frac{\varepsilon_2 \varepsilon_3^2}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha}}
\end{aligned} \quad (72)$$

当  $\varepsilon_2 = \varepsilon_0 = 0$  时, (72) 可简化为

$$-54\varepsilon_1 \varepsilon_3^2 \gamma \alpha^4 + 16\varepsilon_1^2 \alpha^5 + 126\varepsilon_1 \gamma \alpha^3 \varepsilon_3^3 - 243\alpha \gamma^2 \gamma^2 \varepsilon_3^6 + 297\varepsilon_3^3 \gamma^2 = 0 \quad (72')$$

## 2.7 具外力作用的 Burge-KdV 方程的函数级数解及截断解

这节中我们讨论具外力的 Burge-KdV 方程

$$u_t + \alpha u u_x + \beta u_{xxx} + \gamma u_{xx} = \varepsilon_0 \quad (73)$$

同上, 我们可求得函数级数解

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \operatorname{th}^n \mu(x - vt) \quad (74)$$

这里  $a_n$  由如下递推公式给出

$$\begin{aligned}
a_{n+3} = & \langle -v\mu[(n+1)a_{n+1} - (n-1)a_{n-1}] + \frac{\alpha\mu}{2}[(n+1)a_{n+1}F(a, n+1) - (n-1)a_{n-1}F(a, \\
& n-1)] + \beta\mu^3[-3(n+1)n(n-1)a_{n+1} + 3(n-1)(n-2)(n-3)a_{n-1} - (n-3)(n-4)(n-5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & a_{n-3} - 6\beta\mu^3[(n+1)na_{n+1} - 2(n-1)(n-2)a_{n-1} + (n-3)(n-4)a_{n-3}] + \beta\mu^3[-2(n+1) \\ & a_{n+1} + 8(n-1)a_{n-1} - 6(n-3)a_{n-3}] + \gamma\mu^2[(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2n(n-1)a_n + (n-2)(n-3) \\ & a_{n-2}] - 2\mu^2\gamma[na_n - (n-2)a_{n-2}] - \varepsilon_0 \rangle \langle -\beta\mu^3(n+3)(n+2)(n+1) \rangle^{-1} \end{aligned} \quad (75)$$

同时, 我们有截断解

$$u = a_0 + a_1 + hu(x-vt) + a_2 \text{th}^2 \mu(x-vt) \quad (76)$$

这里  $a_0$  任意, 而其它参数由下面定义

$$\mu = \pm \left\{ \left( \frac{\gamma^2 \alpha}{5\beta} - \frac{6\alpha^2 \gamma^2}{25\beta} \right) \left( 36\beta - \frac{40}{\alpha} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{aligned} a_1 &= 12\gamma\mu/5, & a_2 &= -12\beta\mu^2/\alpha \\ \beta &= (2880\alpha - 2400)(2130\alpha^2 - 1385\alpha - 325)^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \left( \frac{72\alpha^2 \gamma^3}{125\beta} - \frac{12\alpha\gamma^3}{25\beta} \right) \left( \frac{\gamma^2 \alpha}{5\beta} - \frac{6\alpha^2 \gamma^2}{25\beta} \right) \left( 36\beta - \frac{40}{\alpha} \right)^{-1} \\ &+ \left( \frac{72\beta\gamma}{5} - \frac{12\beta\gamma}{\alpha} \right) \left( \frac{\gamma^2 \alpha}{5\beta} - \frac{6\gamma^2 \alpha^2}{25\beta} \right)^2 \left( 36\beta - \frac{40}{\alpha} \right)^{-2} \end{aligned}$$

$$V = \alpha a_0 + \alpha a_1^2 / (2a_2) - \alpha a_2 - 20\beta\mu^2 - a_1\gamma\mu/a_2$$

## 2.8 具背景作用的 Burge 方程的函数级数解及截断解

在最后一节里, 我们考虑具非线性背景作用的 Burge 方程

$$u_t + \alpha uu_x + \beta u_{xx} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 u + \varepsilon_2 u^2 + \varepsilon_3 u^3 \quad (77)$$

我们将有函数级数解

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \text{th}^n \mu(x-Vt) \quad (78)$$

其中  $a_n$  由递推公式

$$\begin{aligned} a_{n+2} &= \langle -V\mu[(n+1)a_{n+1} - (n-1)a_{n-1}] + \frac{\mu\alpha}{2}[(n+1)a_{n+1}F(a, n+1) \\ &- (n-1)a_{n-1}F(a, n-1)] + \beta\mu^2[-2n(n-1)a_n + (n-2)(n-3)a_{n-2}] \\ &- 2\mu^2\beta[na_n - (n-2)a_{n-2}] - \varepsilon_0\delta_{0n} - \varepsilon_1 a_n - \varepsilon_2 F(a, n) - \varepsilon_3 F_1(a, n) \rangle \\ &\langle -\beta\mu^2(n+2)(n+1) \rangle^{-1} \end{aligned} \quad (79)$$

给出, 另外, 我们还能求得如下的截断解

$$u = a_0 + a_1 \text{th} \mu(x-Vt)$$

其中

$$a_1 = \frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 8\beta\varepsilon_3}}{2\varepsilon_3} \mu \equiv \delta_s \mu$$

$$V = (\alpha a_0 a_1 \mu + \varepsilon_2 a_1^2 + 3a_0 a_1^2 \varepsilon_3) / (a_1 \mu)$$

而  $a_0, \mu$  由下两式联合给出

$$\begin{aligned} a_0 &= [-2\varepsilon_2 + \sqrt{4\varepsilon_2^2 + 12\varepsilon_3(\alpha\mu a_1 - 2\beta\mu^2 - \varepsilon_1)}] / (6\varepsilon_3) \\ &- \varepsilon_2 a_1^2 - 3a_0 a_1^2 \varepsilon_3 = \varepsilon_1 a_0 + \varepsilon_2 a_0^2 + \varepsilon_3 a_0^3 + \varepsilon_0 \end{aligned}$$

## 讨 论

从上面我们可看出, 对于某些类型的方程, 总能求出能展成函数幂级数的有限形式解和严格截断解, 实际上对于这些类型的方程组, 上面方法同样适用<sup>[4]</sup>, 只不过函数幂级数递推公式将变成行列式形式.

我们希望这里求出的函数级数解及严格截断解对实际物理系统的研究有所帮助和便利. 作者感谢编辑和审稿者的有益建议.

## 参 考 文 献

- [1] Cardner C S, Greene J M, Kruskal M D and Miura R M, *Comm. Pure. and Appl. Math.*, **27** (1974), 97—133.
- [2] Nozaki K, *J. Phys. Soc. Japan.* **56** (1987) 3052—3054.
- [3] Lan Huibin and Wang Kelin, *Phys. Lett.* **A138** (1989), 61.
- [4] Lan Huibin and Wang Kelin, On the Envelope Upper-hybrid Wave, To be published in *Phys. Lett. A*, 1989.
- [5] Flytzanis N, Pnevmatikos St, Remoissenet M, *J. Phys C. Solid State Physics*, **18** (1985), 4603—4629.
- [6] Pnevmatikos St, *Phys. Lett., A* **122** (1987), 249—252.

# The Method of Function Series for Solving a Kind of Nonlinear Equations

Lan Huibin      Wang Kelin

(Centre for Fundamental Physics)

## Abstract

This paper states that, for the first time, the power series of hyperbolic tangent and hyperbolic secant has been used to represent a specified solution for a kind of nonlinear equation. Under some constraints of the parameters, this function series solution can be terminated into a form containing only a few terms terminating solution. The paper provides not only the function series solutions for the highth (7th) KdV equation and some other nonlinear equations with nonlinear substrate potential interaction, but also the related terminating solutions.

**Key words**, solution of function series, terminating solution, mathematical Physics



# 片状 BGO 闪烁体 $\gamma$ 能谱的 Monte Carlo 模拟和实验测量

林趾荣 李艳 官竹芳

(近代物理系)

## 摘 要

用 Monte Carlo 方法模拟  $^{137}\text{Cs}$  的 0.661 MeV 的  $\gamma$  射线在片状 BGO 闪烁体 ( $21.5 \times 21.5 \times 5 \text{mm}^3$  和  $22.5 \times 22.5 \times 1 \text{mm}^3$ ) 中的能谱, 并与实验测量能谱作了比较, 对康普顿散射的连续谱进行了讨论。

关键词: Monte Carlo, BGO, 闪烁体

## 1 程序设计的基本考虑

光子在 BGO 晶体中的行为是一系列随机事体的综合。对  $^{137}\text{Cs}$  的 0.661 MeV 的  $\gamma$  光子来说, 在 BGO 中可能发生的物理过程是光电效应、康普顿散射和瑞利散射。前两种过程会使  $\gamma$  射线的能量沉积在 BGO 晶体中, 瑞利散射只是改变光子的运动方向而无能量损失。这三种效应的总截面, 微分截面有大量的实验数据和理论公式<sup>[1-2]</sup>。因此可以用 MC 方法模拟  $\gamma$  射线在 BGO 中的能谱。其具体步骤如下

(1) 确定入射光子的能量, 进入晶体的位置和方向。(2) 由相应光子能量下三种过程的总截面抽样射程  $R$ , 确定入射光子下次作用的位置。(3) 判断作用的位置是否在晶体内。(4) 由三种效应的截面比抽样确定在该作用点上可能的作用类型。如果是光电效应则记录光电子能量作为光子在晶体中的能量沉积。若发生康普顿效应则由康普顿散射的微分截面公式 (Klein Nishina 公式) 用舍取法抽样散射光子的方向。反冲电子的能量则作为该次作用中光子在晶体中的能量沉积而被记录下来。散射光子的行为则可重复步骤 (2) 继续跟踪。若发生瑞利散射则认为光子和原子发生弹性碰撞, 光子不损失能量只改变方向。可根据瑞利散射的微分截面抽样散射光子的方向, 然后继续跟踪。(5) 如果跟踪光子跑出晶体或最终在晶体内被吸收, 于是跟踪就停止。(6) 对某一定量的能量沉积来说, 产生的荧光强度是

服从高斯分布的。我们可从实验确定的能量分辨率，把各沉积能量道上得到的事例计数按高斯分布展开得到与实验可以比较的模拟能谱。

## 2 三种效应的截面和微分截面

光电效应截面：根据 BGO 的分子式  $\text{Bi}_4\text{Ge}_2\text{O}_{12}$  考虑到 Bi 的原子序数很大 ( $z=83$ )，在计算光电吸收系数时，光子被 Bi 吸收占总数的 98% 左右。为计算简便起见，在考虑 BGO 对光子的吸收时仅考虑 Bi 的光吸收贡献。根据 Bi 原子对 0.01MeV—0.8MeV 的光子的光电吸收实验值用最小二乘法拟合，得到的光电效应截面公式为

$$\sigma = 2^{5/2} z^{4.9} \left( \frac{1}{137} \right)^4 \times 0.6651 \times \left( \frac{mC^2}{E} \right)^r$$

其中  $E$  为光子的能量， $z$  为 Bi 的原子序数， $mC^2$  为电子的静止质量， $r$  为与  $E$  有关的常数：

当  $E=0.003-0.015(\text{MeV})$  时， $r=2.0455-17.35 \cdot E$ ，

当  $E=0.015-0.08(\text{MeV})$  时， $r=2.2141-5.6 \cdot E$ ，

当  $E=0.08-0.8(\text{MeV})$  时， $r=2.63023-0.48512 \cdot E$ 。

这些系数由最小二乘法拟合而得，误差在 1% 之内。

康普顿散射：一个光子和一个原子的康普顿散射截面为：

$$\sigma = z^* 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[ \frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\}$$

其中  $z^*$  为有效原子序数，根据实验数值用最小二乘法拟合结果如下

对 Bi  $z^* = 34.4972 + 307.8165E - 317.725E^2$

对 Ge  $z^* = 12.28 + 112.0335E - 118.82E^2$

对 O  $z^* = 4.297 + 22.89E - 24.9E^2$

其中  $\alpha = E/mC^2$ ， $r_e$  为电子经典半径。

康普顿散射的微分截面公式为

$$d\sigma/d\Omega = \frac{r_e^2}{2} \{ 1 + \cos^2\theta + \alpha^2 (1 - \cos^2\theta)^2 / [1 + \alpha(1 - \cos\theta)] \} \times 1 / [1 + \alpha(1 - \cos\theta)]^2$$

瑞利散射：瑞利散射截面可以从实验值用样条插值求得。它的微分截面公式为<sup>[3]</sup>

$$d\sigma/d\Omega = \frac{r_e^2}{2} (1 - \cos^2\theta) [F(x, z)]^2$$

其中  $F(x, z)$  为原子的形状因子，可以从文献<sup>[4]</sup>中查到。

式中  $z$  为原子序数， $x = \frac{\sin\theta/2}{\lambda(A)}$ ， $\theta$  为散射光子与入射光子之间的夹角。

## 3 跟踪光子的方向与作用点位置的变换

跟踪光子的方向若以极角  $\theta$  和方位角  $\phi$  表示，散射角  $\theta'$  和  $\phi'$  是对于沿光子方向的运动坐标系而言的。当射程为  $R$  时，下次碰撞点的位置在光子方向的运动坐标系中为

$$x' = R \sin\theta' \cos\phi', \quad y' = R \sin\theta' \sin\phi', \quad z' = R \cos\theta'$$

而相对于固定坐标系的  $x, y, z$ , 有如下变换关系

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi & \sin\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi & \cos\phi & \sin\theta\sin\phi \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

这是因为沿光子运动方向的  $z'$  轴在固定坐标系中的方向中  $\theta, \phi$ 。这相当于作两次转动变换先绕  $z$  轴转动  $\phi$  角, 再绕  $y$  轴转动  $\theta$  角, 把  $z$  轴改变到  $z'$  方向。如果把初始光子的方向记为  $\theta_i, \phi_i$ , 散射  $\theta', \phi'$  后散射光子的方向记为  $\theta_f, \phi_f$ 。则有

$$\cos\theta_f = -\sin\theta' \cos\phi' \sin\theta_i + \cos\theta'$$

$$\sin\phi_f = Hz / \sqrt{Hz^2 + HM^2}$$

$$\cos\phi_f = HM / \sqrt{Hz^2 + HM^2}$$

其中  $H_z = \sin\theta' \cos\phi' \cos\theta_i \sin\phi_i + \sin\theta' \sin\phi' \cos\phi_i + \cos\theta' \sin\theta_i \sin\phi_i$

$HM = \sin\theta' \cos\phi' \cos\theta_i \cos\phi_i - \sin\theta' \sin\phi' \sin\phi_i + \cos\theta' \sin\theta_i \cos\phi_i$

由此可以得到经  $\theta', \phi'$  散射后下次跟踪光子的方向。如果  $\theta' = 0$ , 则光子方向不变  $\theta_f = \theta_i, \phi_f = \phi_i$ 。知道了作用点的位置, 就可以判断光子是否跑出晶体, 知道了散射光子的方向就可继续跟踪下次作用点。

#### 4 高斯展开

跟踪光子与原子作用在晶体中沉积的能量会产生荧光。考虑到荧光产生和收集中的统计涨落以及光电管产生光电子的涨落现象。为使 MC 模拟结果能与实验进行比较, 必须将每个能量沉积道上的事例计数按此道上的能量分辨率高斯分布地展开, 最后将每道上的高斯分布值叠加在一起形成光滑的可与实验比较的模拟能谱。

方法是: 由实验能谱可以得到全能峰的能量分辨率, 记为  $\eta$ 。我们把  $\eta$  作为最大沉积能量  $E_{\max} = 0.661 \text{ MeV}$ , 对应 MC 中能量沉积道数为  $M_{\max}$  上的能量分辨率。于是对能量为  $E$ ,  $M$  道的能量分辨率可得为

$$\eta(E) = \eta \sqrt{\frac{E_{\max}}{E}} = \eta \sqrt{\frac{M_{\max}}{M}} = \eta(M)$$

对应的高斯宽度  $\sigma(M) = \eta \sqrt{MM_{\max}} / 2.354$

这样第  $M$  能量沉积道上的事例计数分散在  $K$  道上的值为

$$N(KM) = N(M) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(M)} \exp\left[-\frac{(K-M)^2}{2\sigma^2(M)}\right]$$

式中  $N(M)$  是第  $M$  能量沉积道上由 MC 方法得到的对应能量沉积为  $E$  的事例计数。

最后我们得到模拟能谱中第  $K$  道的计数

$$N(K) = \sum_{M=1}^{M_{\max}} N(KM)$$

#### 5 模拟谱与实验谱的比较

用 BGO 作闪烁体的闪烁计数器测得  $^{137}\text{Cs}$  的  $0.661 \text{ MeV}$  的  $\gamma$  射线的能谱如图 1 所示。

测试条件为：BGO 样品的尺寸为  $21.5 \times 21.5 \times 5 \text{mm}^3$ ， $58 \mu\text{Ci}$  的  $^{137}\text{Cs}$  点源放出的  $\gamma$  射线经准直器准直后射到晶体上。准直器的直径为 6mm，长度为 60mm，点源到晶体表面的距离为 70mm。

根据上述条件用 Monte Carlo 方法得到的模拟能谱显示于图 2。

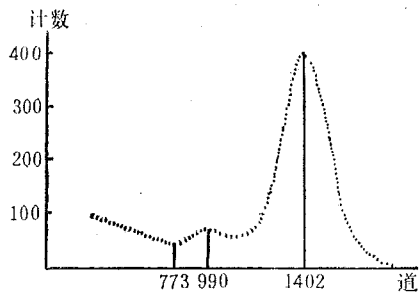


图 1 实验能谱

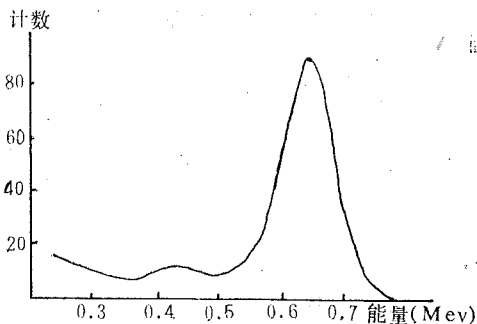


图 2 模拟能谱

比较两图可以看到：两个谱的形状是一致的。在康普顿散射连续谱区域实验谱 990 道与模拟谱 0.43 MeV 都有一个小峰，称为康普顿峰。两谱峰的位置在 10% 之内相一致。两谱的峰谷之比间的差异，特别是低能段实验谱中明显存在反散射峰和铅的  $k_{\alpha}$  射线峰可以看成是实验本底所致。康普顿峰的出现与 R.S. Moore 和 F.T. Avignone III<sup>[5]</sup> 的工作相一致的。

康普顿峰的出现与 BGO 的性质有关。BGO 晶体平均原子序数高，对  $\gamma$  射线的吸收系数大，而康普顿连续谱受多次散射迭加效应的影响它的形状对于 BGO 晶体的几何形状、准直器的质量以及  $\gamma$  光子的入射方向是极为灵敏的。仔细分析康普顿峰后发现，康普顿峰左边的谷（实验谱与模拟谱中分别对应 773 道和 0.37 MeV）对应于  $\gamma$  射线散射到  $90^\circ$  方向的能区。由于晶体比较薄，第一次散射到  $90^\circ$  方向的  $\gamma$  光子再次作用的可能性大，于是  $90^\circ$  散射光子的能量可能再全部沉积在晶体中，迭加到全能峰上。因而相应于  $90^\circ$  方向的康普顿散射的事例计数大大减少，变成谷。很明显，康普顿峰与准直器及  $\gamma$  光子的入射方向有关。实验和模拟都表明，当  $\gamma$  射线不经准直器而直接射到晶体上，没有上述明显的迭加效应，因此在康普顿连续谱上不呈现康普顿峰，或者说原来的谷被填满了。据此我们预计，如果准直器  $\gamma$  束射到更薄的晶体上，能谱中的康普顿峰将更加明显。实验和模拟都证实了这一点。图 3 图 4 是利用尺寸为  $22.5 \times 22.5 \times 1 \text{mm}^3$  的 BGO 晶体，在和以前相同的实验条件下得到的实验谱和模拟谱。

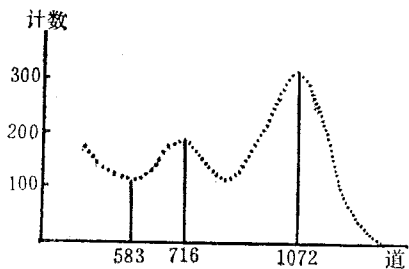


图 3 薄晶体实验能谱

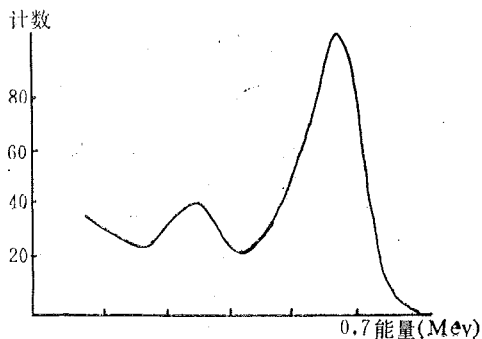


图 4 薄晶体模拟能谱

总之,我们的工作说明了BGO晶体对 $\gamma$ 射线吸收系数大, $\gamma$ 连续谱的形状受晶体的几何尺寸及外界实验条件的影响很大。这为我们最终解释在长四棱锥BGO晶体光输出性能研究中发现的“双峰”现象<sup>[6]</sup>提供了依据,“双峰”问题可望得得介决。

我们感谢陈宏芳,汪兆民同志与我们的有益讨论。

### 参 考 文 献

- [1] 刘运祖,衰变纲图,原子能出版社,1982,454—439
- [2] 梅镇岳,原子核物理学,科学出版社,1961,25—33
- [3] Levinger J S, *Phys. Rev.*, **87** (1975), 656—662
- [4] Hubbell J, *Phys. Chem. Ref. Data*, **4** (1975) No. 3, 477—494
- [5] Moore R S, *Nacl. Instr. and Meth.*, **A242** (1985) 134—136
- [6] 宫竹芳等,高能物理和核物理, **10** (1986), 104

## Monte Carlo Simulation for Spectrum at BGO Scinfillator

Lin Zhirong Li Yan Gong Zhufang

(*Departmente of Modern Physics*)

### Abstract

Monte Carlo method was used to simulate the spectrum of  $^{137}\text{Cs}$  0.661 MeV  $\gamma$  rays in the thin BGO scintillator and the simulated spectrum was compared with experimental spectrum. The continual parts for Compton Scattering in the spectrum is discussed.

**Key words:** Monte Carlo, BGO, Scintillator

# 计算机作费曼图\*

戴青海 马文淦 刘耀阳

(近代物理系)

## 摘 要

利用 FORTRAN 语言和 REDUCE 语言发展了一种用计算机作费曼图的方法。介绍了用于选择有贡献拉氏量的程序 FEYNMAN 和可以作泛函变分的 REDUCE 程序 REDUFEM。

**关键词:** 费曼图, REDUCE 语言, 标准模型, 泛函变分。

## 1 简介

对粒子物理中的一个高能反应,如果能作出其费曼图,则可以按费曼规则写出其  $S$  矩阵。弱电标准模型成功地描述了弱电过程,对标准模型的进一步检验却还有赖于更高能量的实验。与此相应,要求理论上计算至高圈费曼图。费曼图的解析表示可以如下进行计算

$$G(y_1, y_2, \dots, y_m) = \frac{1}{i^m} \frac{\delta^m}{\delta J_1(y_1) \delta J_2(y_2) \dots \delta J_m(y_m)} W[J] \Big|_{J=0} \quad (1.1)$$

其中  $J_i(y_i)$  是与外腿对应的外场,  $W[J]$  为格林函数生成泛函。

$$W[J] = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{i^n}{\hbar^n} \int d^4x_1 d^4x_2 \dots d^4x_n \mathcal{L}_I(x_1) \mathcal{L}_I(x_2) \dots \mathcal{L}_I(x_n) \right\} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{\hbar}{2i} \int d^4x d^4y \sum_{i=1}^k J_i(x) \Delta_i^{\hbar}(x, y) J_i(y) \right\} \quad (1.2)$$

其中  $\Delta_i^{\hbar}(x, y)$  表示第  $i$  种场的传播子。  $\mathcal{L}_I(x_i)$  是相互作用拉氏量, 其中的场量已用相应的外场变分代替。

格林函数的计算就是按普朗克常数  $\hbar$  的幂次将 (1.2) 展开, 这实际上按照费曼图的圈数在进行展开。

1988年10月11日收到。

\* 国家自然科学基金资助。

众所周知, 进行这样的微扰论计算是异常烦琐的。例如, 弱电标准模型中的相互作用拉氏量有近百项, 如果取 (1.2) 中  $n=4$  的项, 则有近  $10^4$  项 (当然大多数项可能无贡献), 且每项中有十几个对指数上的函数进行泛函变分运算。计算的复杂程度是可想而知的 (尤其是对高圈图)。

我们发展了一套方法, 可以用计算机来完成这个过程。本文的第二节中, 我们给出了判断形如 (1.3) 的拉氏量对所讨论过程是否有贡献的条件

$$\left[ L_i^1 \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J_i(x_1)} \right) \right]^{k_1} \cdot \left[ L_i^2 \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J_i(x_2)} \right) \right]^{k_2} \cdots \left[ L_i^N \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J_i(x_N)} \right) \right]^{k_N} \quad (1.3)$$

按照所给出的条件, 我们发展了一个 FORTRAN 程序——FEYNMAN, 利用它可以选出对某一过程有贡献的拉氏量乘积 (1.3)。这个程序将在第三节中介绍。在第四节中, 我们将介绍一个 REDUCE 程序——REDUFEM, 利用它可以进行泛函变分运算, 从而得到所要求的费曼图。

## 2 有贡献拉氏量乘积应满足的条件

我们首先解释一下“场配对”的含义并说明一下后面常用的几个符号。

场配对: 所有的场可以分为实场和复场 (旋量场归入复场类)。这两类场在 (1.2) 式中的指数上分别以下列形式出现

$$J(x) \Delta_F(x, y) J(y) \\ \bar{\eta}(x) S_F(x, y) \eta(y)$$

$J(x)$  表示实场的外场,  $\eta(x)$  和  $\bar{\eta}(x)$  表示复场及其共轭场的外场。场配对是指实场与其自身配对, 复场与其共轭场配对。

$ER(i)$ : 外线中第  $i$  种实场的个数。

$EC(i)$ : 外线中第  $i$  种复场的个数。

$\overline{EC}(i)$ : 外线中第  $i$  种复场的共轭场个数。

$FR(i, j)$ : 第  $j$  个拉氏量中第  $i$  种实场的个数。

$FC(i, j)$ : 第  $j$  个拉氏量中第  $i$  种复场的个数。

$\overline{FC}(i, j)$ : 第  $j$  个拉氏量中第  $i$  种复场的共轭场个数。

$B(j)$ : 第  $j$  个拉氏量中所有场的个数。

显然

$$B(j) = \sum_i FR(i, j) + \sum_i (FC(i, j) + \overline{FC}(i, j)) \quad (2.1)$$

若一个费曼图有  $m$  条外线  $\left( m = \sum_i ER(i) + \sum_i (EC(i) + \overline{EC}(i)) \right)$ ,  $n$  个顶点,  $I$  条内线,

则由拓扑关系知此图的圈数为

$$L = I - n + 1 \quad (2.2)$$

另一方面, 由 (1.1) 和 (1.2) 可以看到: 每条传播子带有一个  $\hbar$  因子, 每个顶点带有一个  $\hbar^{-1}$  因子。于是, 这样一个费曼图所带  $\hbar$  因子的幂次为  $m + I - n$ , 由 (2.2) 知

$$m + I - n = m + L - 1 \quad (2.3)$$

有贡献拉氏量乘积的形式如 (1.3)，显然应有如下的关系成立：

$$\text{条件 1} \quad \sum_{i=1}^N k_i = n \quad (2.4)$$

从 (1.2) 看到，如果要得到一个传播子，则应对两个配对的外场作变分，即每个外场变分对应  $\hbar$  的幂次为  $\frac{1}{2}$ 。显然第  $i$  个拉氏量换成对外场的变分之后得到的  $\hbar$  的幂次为  $\frac{1}{2}B(i)$ 。

从 (1.1) 和 (1.2) 可以看出，第  $n$  次展开项的  $\hbar$  幂次为

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N k_i B(i) + \frac{1}{2}m - n \quad (2.5)$$

上式应等于 (2.3)，从而得到

$$\text{条件 2} \quad R \equiv \sum_{i=1}^N k_i B(i) = m + 2L + 2n - 2 \quad (2.6)$$

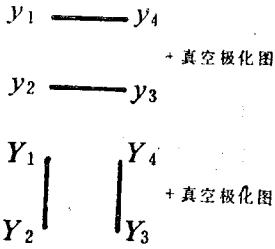


图 1 两种平庸的费曼图

对于外线的场，拉氏量乘积 (1.3) 中必须有与之配对的场，否则将出现平庸的图形。例如 Bhabha 散射，外线是两条电子线和两条正电子线，如果 (1.3) 中没有与之配对的场变分，则必然出现如下的平庸图 (图 1(a) 或图 1(b))。

由此，我们得到有贡献拉氏量乘积 (1.3) 必须满足的第三个条件：

$$\text{条件 3} \quad \sum_{i=1}^N FR(i, j)k_i \geq ER(i) \quad (2.7)$$

$$\sum_{i=1}^N FC(i, j)k_i \geq EC(i) \quad (2.8)$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{FC}(i, j)k_i \geq \overline{EC}(i) \quad (2.9)$$

由 (1.1) 看到，当作完所有的变分之后，要令所有的外场为零。如果 (1.3) 中某一种外场和外线的外场一起不能两两配对时，变分之后必有一个如下形式的因子

$$\bar{j}(x)\Delta_F(x, y) \text{ 或 } \Delta_F(x, y)j(y)$$

令外场为 0 时，这个因子的存在必使这一项为 0，因此这样的项无贡献。将这种情形用数学公式表述为

$$\text{条件 4} \quad ER(i) + \sum_{j=1}^N FR(i, j)k_j = 2I, \quad I = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

$$EC(i) + \sum_{j=1}^N FC(i, j)k_j = \overline{EC}(i) + \sum_{j=1}^N \overline{FC}(i, j)k_j \quad (2.11)$$

最后，第五个条件是去掉只能提供分立图的拉氏量乘积，我们用一个例子来说明。请看如下的拉氏量乘积

$$L_1^1(x_1)L_1^1(x_2)L_1^2(x_3) \quad (2.12)$$



这里

$$L_1^{\dagger}(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_{\mu} \psi(x) A^{\mu}(x) \quad (2.13)$$

$$L_2^{\dagger}(x) = W_{\mu}^{+}(x) W^{-\mu}(x) \phi^{+}(x) \phi^{-}(x) \quad (2.14)$$

如果我们讨论的是 Bhabha 散射的单圈图，显然它们满足以上的四个条件。但它只能给出一个零圈散射图加一个真空极化图。因此，这类情形应排除，这项选择由一个子程序 SEL 来完成。

### 3 FORTRAN 程序 FEYNMAN 介绍

得到了第二节中的选择条件之后，我们编出相应的选择程序——FEYNMAN。在这个程序中，我们考虑了 76 个相互作用的拉氏量<sup>[3]</sup>，它们选自考虑了一代轻子的弱电标准模型中的各种耦合。程序的大致框图如图 2

FEYNMAN 按如下步骤运行。程序开始之后，按  $I_2$  格式读入外线中各种场的个数，其顺序为  $\Psi, \bar{\psi}, \nu_e, \bar{\nu}_e, A_{\mu}, Z_{\mu}, W_{\mu}^{+}, W_{\mu}^{-}, H$ ，然后读入所求图的圈数及展开的幂次  $n$ ，执行完毕即打印出结果。例如，如要求  $n=2$  时对 Bhabha 散射有贡献的零圈图，则须读入如下一组数：

2 2 0 0 0 0 0 0 0 2

运行后：给出四种可能的拉氏量乘积为

$$\begin{aligned} & \bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi A^{\mu} \cdot \bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi A^{\mu} \\ & \bar{\psi} \psi H \cdot \bar{\psi} \psi H \\ & \bar{\psi} \psi \phi^0 \cdot \bar{\psi} \psi \phi^0 \\ & \bar{\psi} \gamma_{\mu} (a + b \gamma_5) \psi Z^{\mu} \cdot \bar{\psi} \gamma_{\mu} (a + b \gamma_5) \psi Z^{\mu} \end{aligned}$$

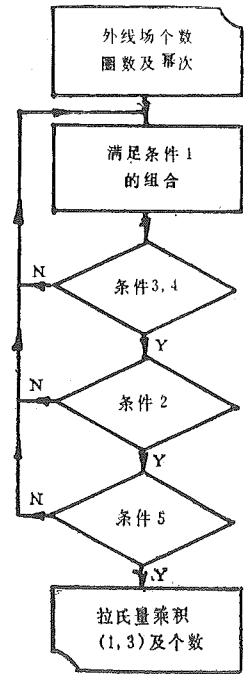


图 2 FEYNMAN 的大致框图

### 4 REDUCE 程序 REDUFEM 介绍

利用 FEYNMAN 得到有贡献的拉氏量乘积之后，剩下的泛函变分由 REDUCE<sup>[3]</sup> 程序 REDUFEM 来完成。

以求电磁作用 Bhabha 散射单圈图为例来说明如何用 REDUCE 语言进行“泛函变分”所要求的式子如下（已略去了所有的常数）

$$\begin{aligned} G(y_1, y_2, y_3, y_4) &= \frac{\delta^4}{\delta \eta(y_1) \delta \bar{\eta}(y_2) \delta \eta(y_3) \delta \bar{\eta}(y_4)} \int d^4 x_1 d^4 x_2 d^4 x_3 d^4 x_4 \\ & \cdot \frac{\delta^8}{\delta \eta(x_1) \delta \bar{\eta}(x_1) \cdots \delta \eta(x_4) \delta \bar{\eta}(x_4)} \cdot \frac{\delta^4}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \delta J(x_3) \delta J(x_4)} \\ & \cdot \exp \left\{ \int d^4 x d^4 y (\bar{\eta}(x) S_F(x, y) \eta(y) + J(x) \Delta_F(x, y) J(y)) \right\} \Bigg|_{\substack{J=0 \\ \eta=0}} \end{aligned} \quad (4.1)$$

由于每个  $\gamma$  矩阵和场的分量标记都是与对应的坐标  $x_i$  或  $y_i$  联系在一起的，因此除坐标之外其它的标记场已略去。又由于我们直接求坐标空间中的费曼图，因此  $\int d^4 x_i$  也可以略去。中

国科大计算中心的 DPS8 上没有 REDUCE 积分包, 我们定义一个算符 1NT 来代替 (4.1)

中指数上的积分  $\int d^4x d^4y$ . 1NT 算符具有如下的性质:

$$1NT(0) = 0 \quad (4.2)$$

$$1NT(S_F(x, y)) = S_F(x, y) \quad (4.3)$$

$$1NT(\Delta_F(x, y)) = \Delta_F(x, y) \quad (4.4)$$

并且, 我们作如下的变分定义:

$$\frac{\delta \bar{\eta}(x)}{\delta \bar{\eta}(y)} = DF(\bar{\eta}(x), \bar{\eta}(y)) = DAT(x, y) \quad (4.5)$$

$$\frac{\delta \eta(x)}{\delta \eta(y)} = DF(\eta(x), \eta(y)) = DAT(x, y) \quad (4.6)$$

$$\frac{\delta I(x)}{\delta J(y)} = DF(J(x), J(y)) = DAT(x, y) \quad (4.7)$$

$$DF(1NT(u), v) = 1NT(DF(u, v)) \quad (4.8)$$

其它的都为 0, 上面引进的算符 DAT 具有如下的性质:

$$DAT(x, y) = DAT(y, x) \quad (4.9)$$

$$DAT(x, y) S_F(y, z) = S_F(x, z) \quad (4.10)$$

$$DAT(x, y) S_F(z, y) = S_F(z, x) \quad (4.11)$$

$$DAT(x, y) \Delta_F(y, z) = \Delta_F(x, z) \quad (4.12)$$

$$DAT(x, y) \Delta_F(z, y) = \Delta_F(z, x) \quad (4.13)$$

进行了上面所述的定义之后, 即可完成 (4.1) 的运算, 所得结果就是费曼图的解析表示.

上面计算得到的结果中包含了许多分立图. 经过 FEYNMAN 的挑选之后, 所有的图其圈数、内线和顶点都是一定的. 现在变分运算后得到的分立图实际上是固定圈数, 内线和顶点下的子图. 因此, 去掉这些子图就去掉了分立图. 通过加进适当的判断, REDUFEM 成功地去掉了分立图. 对 Bhabha 散射电磁单圈图, 运行之后共得到 120 个连通图, 但非同构的图只有 18 个, 这个结果是正确的.

## 5 结束语

事实上, 同构图的数目应大于 120 个. 我们在 REDUFEM 中根据经验加进了一条限制之后才使其减为 120 个. 我们至今也没有找到一个普适的准则去排除同构图. 另外, 费米场的外场应为 Grassmann 数, 它们是非对易的, 非对易性将给费曼图带来相对的正负号. 为了简化运算, 我们将其看成是可对易的, 因此, 图的相对符号只能用其它方法去判断. 即使如此, REDUFEM 也是比较费机时的, 只要用 REDUCE 语言, 这几乎是无法克服的.

除了粒子物理领域之外, 在凝聚态, 固体物理等学科中也需要作费曼图, 我们发展的这套方法亦可推广用于这些领域.

本文作者感谢张子平老师和叶竞波同学的有益讨论和帮助.

## 参 考 文 献

- [1] 戴元本, 相互作用的规范理论, 科学出版社, 1987年。
- [2] 汪容, 量子规范理论, 科学普及出版社, 1987年。
- [3] Passarino G, Veltman M, *Nucl. Phys.*, **B160** (1979), 151—207.
- [4] Hearn A G, 张淑誉编译, REDUCE 用户手册, 1984年。

## Drawing Feynman Diagrams by Computer

Dai Qinghai Ma Wengan Liu Yiaoyang

*(Department of Modern Physics)*

### Abstract

We developed a method which can be used to draw Feynman diagrams. The program FEYNMAN can select the Lagrangian combination which has contribution to a given process and the program REDUFEM can perform functional variation.

**Key words:** Feynman diagram, REDUCE language, standard model, functional variation.

# 用于阿尔芬波研究的AWH-2 射频发射机的研制

朱士尧 韩申生 邓必河 许 琰

(近代物理系)

## 摘 要

研制了一台用于托卡马克等离子体中阿尔芬波研究的AWH-2射频发射机。针对负载等离子体参数随时间变化的特点,着重解决了频率稳定性问题,并采用输出变压器和T型LC网络相结合的方法较好地解决了发射机与天线的阻抗匹配问题。

**关键词:** 射频源, 阿尔芬波加热。

为了在KT-5B托卡马克上进行Alfven波的实验研究,我们研制了一台AWH-2射频发射机。由于作为负载的等离子体的参数是随时间而变化的,因此对于射频源的频率稳定性提出较高的要求。该机采用四个Fu-7电子管组成并联推挽的调板调栅式单极振荡输出电路。这种电路的特点是频率稳定性好,可保证当耦合于负载天线的板极回路解谐时,整个电路仍具有高度的稳定性。这时决定振荡频率的是栅极回路。同时,这种电路对其基频来说是电感三点式振荡电路,但是由于电路的对称性,避免了一般电感电路谐波大的缺点。对于高次谐波来说,两个回路均是容性的,不能起振。由于采用并联推挽电路,电路的输出功率为单管应用时的四倍。

## 1 电路概述

AWH-2射频发射机的电路如图1所示,图中 $L_a, C_a$ 和 $L_g, C_g$ 分别构成板极和栅极回路; $C_{a-g}$ 为反馈电容; $R_{g2}, C_{g2}$ 为帘栅极偏压电阻和接地电容; $R_{gk}, C_{gk}$ 为自给栅偏压回路。采用自给栅偏压电路的优点是易于起振,利于稳定振幅。为防止产生间歇振荡, $R_{gk}, C_{gk}$ 不能太大;而旁路电容 $C_{gk}$ 又不能太小,故必须使 $C_{gk}$ 满足

1988年12月24日收到。

\*本项目得到国家教委博士点基金的资助。

$$\frac{\bar{R}_{gk}}{10} \geq \frac{1}{\omega C_{gk}} \geq \frac{\bar{R}_{gk}}{50}$$

$R_{gk}$  则由电子管的工作状态决定。可变电容  $C_g$  是栅极补偿电容。调节它可使振荡回路相角为零，这就可使振荡器的工作效率接近放大器的情况。同时，相角为零也是稳频条件。所以，调节  $C_g'$  可达到提高工作效率和稳频的目的。 $L_g'$  是一电感量较大的加磁芯的线圈，它对直流是通路，而对高频来说相当于开路。因此它使振荡信号通过  $C_g'$  得到相角补偿，而  $R_{gk}$ 、 $C_{gk}$  上产生的直流偏压又能通过它加到电子管的第一栅极上。

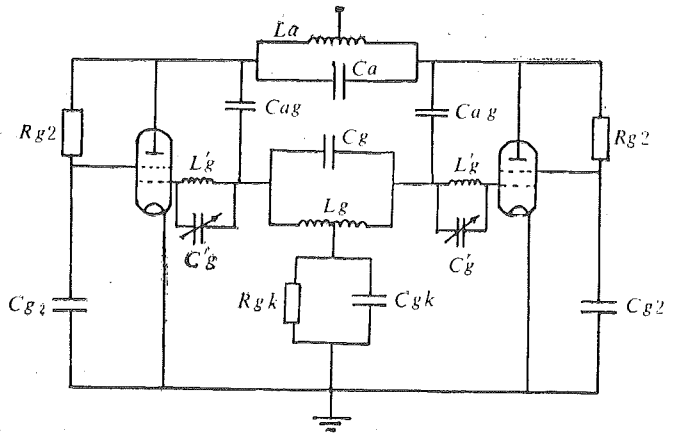


图 1 电路图

能量信号由板极通过互感耦合输出。图 1 中的  $L_a$  是输出变压器的初级电感。这样的好处是电路简单。但由于负载回路（天线）具有电抗分量，而且天线的辐射电阻（ $\sim 100\text{m}\Omega$ ）远小于电子管的谐振阻抗（ $R \sim 1\text{k}\Omega$ ），所以，阻抗匹配是输出变压器不能单独完成的，必须在变压器次级与天线之间加一负载匹配电路。这一电路在振荡器与天线之间起着重要的桥梁作用，后面将对此作详细的分析。

### 频率特性

首先研究有能量输出时此电路的频率特性。调节匹配电路，可以使输出变压器的次级阻抗在初级等效为一纯电阻，即电抗分量为零。这时板极回路可视为  $R_a$ 、 $L_a$ 、 $C_a$  三者的并联。对工作频率，还可等效为一电感  $L$  与一电阻  $R$  的串联（图 2， $r_a$  为负载回路的等效电阻）。同样，对工作频率，栅极回路等效为一电感  $L_g'$ ，而  $L_g'$  与反馈电容  $C_{ag}$  则等效为一电容  $C$ （图 3，图 4），因而整个谐振回路可等效为一个  $LC$  并联谐振回路（图 5）。图中

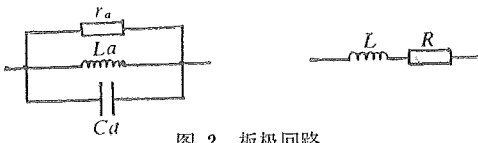


图 2 板极回路

$$R = \frac{\omega^2 L_a^2}{r_a^2 (1 - \omega^2 L_a C_a)^2 + \omega^2 L_a^2} r_a \quad (1)$$



图 3 栅极回路

$$L = \frac{r_a^2 (1 - \omega^2 L_a C_a)}{r_a^2 (1 - \omega^2 L_a C_a)^2 + \omega^2 L_a^2} L_a \quad (2)$$

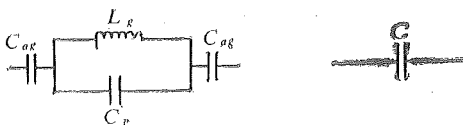


图 4 栅极回路与反馈电容

$$C = \frac{1 - \omega^2 L_g C_g}{2 - 2\omega^2 L_g C_g - \omega^2 L_g C_{ag}} C_{ag} \quad (3)$$

$$L = \frac{L_g}{1 - \omega^2 L_g C_g} \quad (4)$$

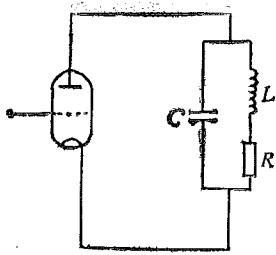


图 5 等效谐振回路

反馈系数 
$$K = \frac{\omega L'_g}{1/\omega c} = \frac{\omega^2}{2\omega_f^2 - \omega^2} \quad (5)$$

谐振频率 
$$\omega = \frac{1}{\sqrt{Lc}} \sqrt{1 - \frac{1}{Q^2}} \quad (6)$$

品质因数 
$$Q = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C}} \quad (7)$$

谐振阻抗 
$$R_{\dots} = \frac{L}{RC} = r_s \quad (8)$$

式 (5) 中,  $\omega_f^2 = \frac{1}{L'_g C_{a_g}}$ , 将 (1) - (3) 式及 (7) 式代入 (6) 式, 可以得到

$$\omega^4 L_a L_g (C_{a_g} C_g + 2C_a C_g + C_a C_{a_g}) - \omega^2 (2L_a C_a + 2L_g C_g + L_a C_{a_g} + L_g C_{a_g}) + 2 = 0$$

此式表征了电路的频率特性。此式表明, 谐振频率与  $r_s$  无关即与负载无关。这一特性对 Alfvén 波加热实验来说是非常重要的。

实验中, 首先取  $L_a = 40 \mu\text{H}$ ,  $L_g = 520 \mu\text{H}$ ,  $C_g = 390 \text{PF}$ , 测量不同  $C_a$  值时的振荡频率, 与理论计算结果进行了比较, 两者符合得很好 (见表 1)。改变不同的参数, 发现实测频率与理论值均符合得很好。

表 1

$C_a$ (PF)	$f_{\text{测}}$ (MHz)	$f_{\text{理}}$ (MHz)
47	2.94	3.14
390	1.25	1.25
$4 \times 390$	0.615	0.613
$8 \times 390$	0.51	0.45

### 3 电路参数与电子管的工作状态

电子管工作状态, 对电路参数的选取, 对其稳定性、效率及电子管工作寿命都有很大影响。电子管工作状态的计算, 可采用图解法和解析法。我们采用解析法, 选取  $E_a = 550 \text{V}$ ,  $P_o = 33 \text{W}$ , 阳流通角  $\theta = 60^\circ$ , 阳压利用系数  $\xi = 0.85$ ,  $U_{am} = 120 \text{V}$ ,  $E_g = -100 \text{V}$ , 计算表明最佳阳极负载  $R$  为  $3.3 \text{k}\Omega$ , 反馈系数  $K$  为 0.26, 栅偏电阻  $R_{gk}$  为  $11 \text{k}\Omega$ 。其中  $R_{\dots}$  和  $K$  两个重要的参数, 当它们分别与 (8)、(5) 式中的  $R_{\dots}$ 、 $K$  值相等时, 振荡器的效率最高。因此, 必须选取合适的外部电路参数, 使 (8) 式 (5) 式分别与由电子管决定的  $R_{\dots}$ 、 $K$  值相等。在 AWH-2 射频发射机中, 选取的参数是  $L_a = 200 \mu\text{H}$ ,  $C_a = 200 \text{PF}$ ,  $L_g = 6 \mu\text{H}$ ,  $C_g = 500 \text{PF}$ ,  $C_{a_g} = 490 \text{PF}$ 。由此求出频率  $f$  为  $1.579 \text{MHz}$ ,  $K$  为 0.26。这是较为理想的一组参数, 而  $R_{\dots} = r_s$  与负载有关, 这留待后面讨论。由于电容和电感元件值存在误差, 故实际振荡频率  $f = 1.687 \text{MHz}$ , 误差 7%, 这是合理的。

#### 4 板极输出回路及负载匹配回路

板极输出回路的关键是输出变压器(见图6)。图中,  $L_1$ 、 $L_2$  分别为输出变压器的初级、次级线圈的自感,  $M$  为它们之间的互感。次级调谐时负载回路在初级的反映阻抗是一纯电阻  $r'$ , 当  $r' \ll \omega L_1$  时, 图6变为图2的形式, 则有  $r_a = \omega^2 L_1^2 / r$

因此  $r_a = (L_1^2 / M^2) r$

(10)

前面说过, 为使电子管工作于临界状态, 必须满足(8)式。所以发射机的输出阻抗  $r$  为

$$r = (M/L_1)^2 R_{00} \quad (11)$$

$$\text{或 } M = L_1 (r/R_{00})^{1/2} \quad (12)$$

因此, 根据(12)式可以通过调节互感实现负载匹配。但考虑到能量传输效率与耦合系数有关, 而且在 AWH-2 射频发射机中, 为使输出电压降低, 次级线圈匝数很少,  $L_2 = 0.2 \mu\text{H}$ ,  $M = 1.33 \mu\text{H}$ , 调节起来很困难。所以采用了图7所示的匹配电路来实现跟天线负载匹配。

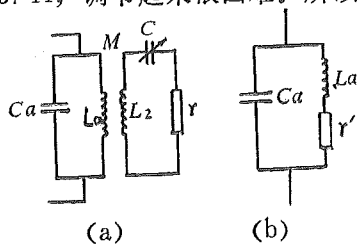


图6 板极输出回路及初级等效电路

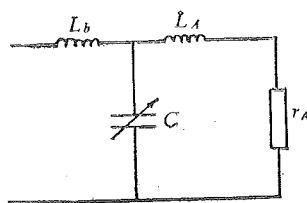


图7 负载匹配电路

图7中,  $L_A$ 、 $r_A$  为天线的电感、电阻,  $L_b$ 、 $C$  为匹配电感和电容 ( $L_b$  中包含了输出变压器的次级电感  $L_2$ )。调节可变电容  $C$ , 使回路的输入阻抗为一纯电阻  $r_i$ , 且  $r_i$  等于发射机输出阻抗  $r$ , 实现了跟阻抗为  $100 \text{ m}\Omega$  的天线负载匹配。匹配时有

$$r_i = r = \frac{X_c^2}{r_A^2 + (X_A + X_c)^2} \quad (13)$$

$$X_b = -\frac{1}{X_c} \frac{r_i}{r_A} [r_A^2 + X_A(X_A + X_c)] \quad (14)$$

式中  $X_A = \omega L_A$ ,  $X_b = \omega L_b$ ,  $X_c = 1/\omega c$ , 由(11)式得到  $r_i = r = 15 \Omega$ 。(13)式中,  $X_c$  必须满足  $X_A^2 \geq r_A(r_i - r_A)$ , 因  $r_A$  很小, 所以, 这一条件容易满足。

#### 5 性能调试

①输出功率 测量输出功率时, 用的是图6a所示的电路,  $r$  是  $15 \Omega$  的无感电阻。测量结果输出功率  $P_o > 77 \text{ W}$ 。

②动态特性 用示波器测量了  $u_a \sim u_e$  曲线, 即动态特性曲线。它反映了发射机的工作状态。一般的特性曲线如图8。若交叉点的数目为  $n$ , 则发射机中存在不可忽略的  $n+1$  次谐波。曲线所包围的面积越大, 则发射机失谐越严重, 效率越低。AWH-2 的动态特性见图9。由图可见没有交叉点, 说明不存在高次谐波。可通过调谐补偿电容  $C_e'$ , 使之近似为一直线, 以提高工作效率。

③寄生振荡的消除 由于电子管的并联应用, 容易产生超高频寄生振荡(主要为

50MHz)，它会抑制工作频率的起振。为此，在并联电子管的相同电极上跨接一个小电阻（16Ω），并在栅阴两极间接一个小电容（47PF），基本上消除了寄生振荡。

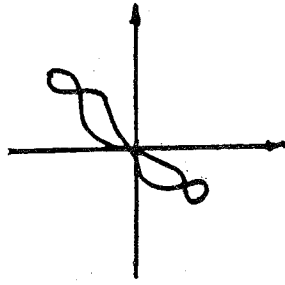


图 8 一般特性曲线

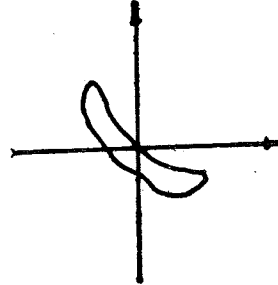


图 9 AWH-2 动态特性

总之，AWH-2 射频发射机的性能基本上达到设计要求，并为研制即将在 KT-5C 托卡马克等离子体上进行 Alfvén 波加热和电流驱动实验所需的大功率射频发射源提供了有益的经验。

## Development of AWH-2 Radiofrequency Generator for Alfvén Wave Studies

Zhu Shiyao Han Shensheng Deng Bihe Xu Yan

(Department of Modern Physics)

### Abstract

A radio frequency generator is developed for the Alfvén wave studies in tokamak plasma. This generator has quite good frequency stability, which is essential to the Alfvén wave studies because the loading plasma parameters vary with time. The matching problem is also solved properly by means of a transformer in combination with a special T type LC matching circuit.

**Key words:** Radiofrequency source, Alfvén wave heating.



# 基于知识的语音识别与理解

陆洋海 戴蓓蓓

(电子技术基础部)

## 摘 要

本文介绍一个汉语连续语音识别与理解系统 USTC—II, 在该系统中词法、句法和语义等多种知识被用来提高识别速度和精度, 增强语言理解能力。系统采用了本文提出的一种从关键词入手的句法和语义相结合的分析方法, 具有较强的辨析同音词、谐音词以及纠错功能。该系统能接受与理解几乎所有类型的单句, 并以带有标点符号的汉字形式输出句子。

**关键词:** 语音识别, 语言理解, 音节陈列, 词阵列。

## 1 引言

近年来, 关于语言理解方面课题的研究越来越引起人们的重视和兴趣。这不仅是因为让计算机听懂人的语言是智能计算机的一个重要内容, 还因为它能够帮助解决一些语音识别自身不能克服的困难。目前在连续语音识别方面存在着许多困难, 例如同音词及谐音词的辨析问题、匹配计算量等。要克服这些困难, 仅靠声学处理、信号处理及模式识别技术是不够的。语言学与心理学的研究表明, 从话者说出一句话到听者听到并理解这句话意思的过程, 虽然十分短暂, 却包含着多种复杂的因素, 既有声学的、语言学的, 又有心理的、生理的因素。这是因为语言信号本身不仅具有物理特性, 而且具有社会特性, 听者听懂这句话是要以他具有这方面的知识为基础的<sup>[1,2]</sup>。同样, 为了让计算机能听懂人的语言, 也必须使计算机具有相应的知识。我们的 USTC-II 语音识别与理解系统正是模拟了人类的这种听觉理解过程, 在它的知识源中存有声学、词法、句法、语义等多种知识。操作程序利用这些知识来提高识别速度和精度, 并把处理的中间结果存入“黑板”总数据库, 以便考虑各种竞争因素, 作出最符合实际的解释, 最后以带有标点符号的汉字形式输出句子。USTC—II 汉语语音识别与理解系统的研究是在 USTC—I 系统<sup>[3]</sup>的基础上进行的, 并作了很大改进。其改进主要在以下几个方面:

(1) USTC—I 是关于火车站问询的语音识别与理解的应答系统, 其基本句型是疑问

句。而 USTC—II 是一个通用的语音识别与理解系统，其句型从功能上看可以是陈述句、疑问句、感叹句等，从结构上看又可以是形容词谓语句、动词谓语句、动宾谓语句、动补谓语句。

(2) USTC—II 的音节表、词表都有相应的扩充，词类搭配表也更为全面。

(3) USTC—I 采用 ATN 网络，先进行句法分析，然后再对其结果进行语义分析。而 USTC—II 采用了从关键词入手的分析方法，该方法把句法分析与语义分析结合在一起进行，故具有较强的辨析同音词、谐音词及纠错功能。

(4) USTC—I 系统采用了具有反馈的流水线结构。而 USTC—II 采用“黑板”总数据库结构，各操作程序及知识源是独立的。

## 2 系统总体结构

图 1 为 USTC—II 系统的总体结构方框图。下面将详细说明其中各部分的功能。

### 2.1 准实时 LPC 分析

语音信号以 8kHz 采样后，先经过传递函数为  $H(z) = 1 - 0.95z^{-1}$  的滤波器进行预旨

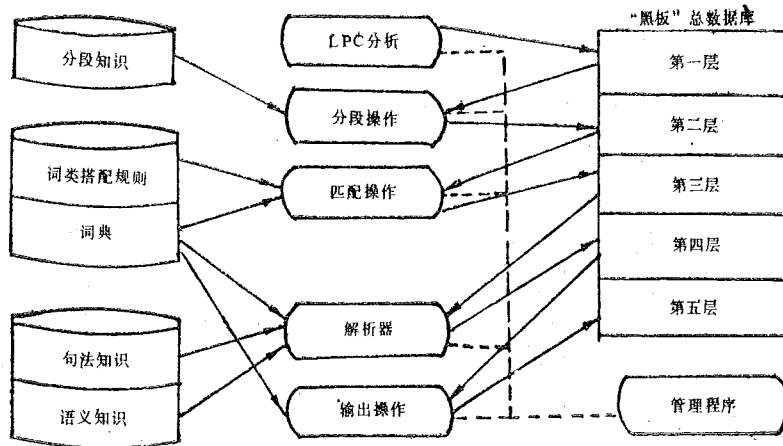


图 1 USTC-II 系统总体结构方框图

重，然后再进行 LPC 分析。LPC 分析时，每帧长  $N = 300$  个点，帧间重叠数  $L = 150$  个点，阶数  $P = 10$ 。采样及 LPC 分析在 TMS 320 信号处理板上准实时实现。

### 2.2 语音音节分段

在汉语连续语音识别中，选择词作为最小识别单元是不合适的。因为无论对于参考模板或是匹配计算量，词的数量实在太大了。在 USTC—II 中，音节被选作识别单元。这是由于音节在汉语中的地位十分特殊。有人从信息论的角度论证过汉语音节的重要性和科学性。<sup>[4]</sup> 在汉语中，大多数音节本身就是词，正常语速句子里的每个音节都发得较充分、较清楚，这就使我们有可能通过某些手段把一个汉语连续语音句子分段成若干个音节组成的音节串。根据我们所做的大量实验表明，在中速发音的汉语连续语音中的两个音节的连接处存在以下特

征:

- (1) 在两个音节的连接处, 短时能量一般有一个低谷。
- (2) 在两个音节连接处, LPC 参数的变化有一个峰起。
- (3) 一个音节的帧长变化有一定的范围 (这个范围与采样率等均有关系)。

USTC—II 系统的分段操作利用了分段知识源中关于短时能量、LPC 参数的变化率、音节帧长三种知识来确定两个相邻音节间的连接点。

### 2.3 词法约束的匹配

在汉语中大约有 1300 个不同的音节, 其中有许多发音相近的音节。如果直接和所有的模板相匹配, 不但匹配的计算量很大, 而且所产生的音节阵列 (syllable-lattice) 也很大。因为那些发音相近的音节匹配得分很接近, 然而这些音节不一定都符合词法, 必须要用词法知识对该音节阵列进行处理, 以去掉那些不能正确组词的音节, 从而组成一个词阵列 (Word-lattice)。假如把词法分析与音节匹配结合在一起, 利用词法知识约束候选匹配音节, 则不但可以大大减少匹配计算量, 而且可以去掉那些不符合词法的相近音节。USTC—II 系统采用了这种词法约束的匹配方式, 在该系统的词法知识源中存有两种不同的知识, 其一是一套词类搭配规则。在汉语中, 词一般可分为十大类, 它们是名词、动词、形容词、介词等。这十大类词间存在一定的搭配关系, 例如搭配在副词后面的必定是动词或形容词; 搭配在形容词后面的必定是名词或助词; 语气词一般位于句末, 无可搭配的词类等。系统的知识源中存储的词类搭配表是从汉语教材中归纳出来的<sup>[5,6]</sup>。词法知识源中的另一种知识是一部词典, 它提供一个词的词类、由哪些音节组成等信息。

匹配操作利用词法知识源中的两种知识对匹配的候选者进行约束。这种约束分为两级: 第一级按照词类搭配规则约束候选者的词类, 第二级依靠词典约束候选音节。采用上述两级约束后, 不但匹配的计算量大大减少, 而且使识别正确率有所提高。表 1 是两种匹配效果的比较, 其中识别正确率是按词阵列中第一候选者所对应的音节计算的。

表 1 词法约束的匹配与一般的匹配的比较

	音节的平均识别时间	音节的识别正确率
词法约束的匹配	4 秒	92%
一般的匹配	20 秒	85%

词类约束的匹配越过了产生音节阵列这个中间过程, 从而直接产生了一个词阵列, 该阵列由一些符合词法的同音词、谐音词所组成。例如“李白是伟大的诗人”这个句子, 如果在词匹配阶段没有误识, 那么词法约束的匹配得到的词阵列应该是

李白 是 伟大 的 诗人  
诗 得 是  
地

至于究竟应选取阵列中的哪些词作为最终的识别结果, 则由句法、语义分析来完成。

### 2.4 句法、语义分析

人们在理解一个句子时, 并非按先语法分析后语义分析这个顺序进行的, 而是将两种分析揉和在一起进行的。此外, 句子中的各个词对于理解句子的权重也是不相同的。被修饰的

中心词，如名词和动词，对于理解句子起着关键的作用。如果这些词被误识，则很难正确地理解整个句子。而修饰中心词的副词、助词等在句子中则不那么关键，若这些词被误识，仍有可能理解句子的基本意思。虽然经典的句法分析方法如 ATN 句法网络分析方法对于分析句子能否被句法规则接受确实很有效<sup>[7]</sup>，但是当词识别阶段出现了误识而不能被接受时，则很难根据句子的上下文关系修正这些被误识的词。而不幸的是在语音识别中误识是不可避免的，因此，纠错能力对于语言理解尤为重要。本文提出的从关键词入手的分析方法就是模拟了人类的理解方式，把句法分析和语义分析结合起来，在某些非关键词被误识的情况下，仍有可能理解句子的基本意思，同时尽力修正那些被误识的词。在从关键词入手、句法和语义相结合的分析方法中，句法规则采用了上下文无关的文法，而语义规则是上下文有关的，使系统能够更好地利用上下文关系去理解句子并修正句子。

为了寻找关键词，我们根据汉语语法教材中单句的生成规则推导出四种基本的句子结构<sup>[2]</sup>。（符号说明及生成规则见附录）

- (1)  $Zu + (Zua) + Xc + (Pu)$  形容词谓语句
- (2)  $Zu + (Zua) + Dc$  动词谓语句
- (3)  $Zu + (Zua) + Dc + Bu$  动宾谓语句
- (4)  $Zu + (Zua) + Dc + (Pu)$  动补谓语句

由上可以看出动词（有时是形容词）在句子中起着非同一般的作用，它们一般是关键词。然而当句子中出现一个以上的动词时，则需要更深一层的知识来确定哪个是主要关键词，因为并不是任何动词都可以以动词结构作宾语的。事实上，要把句法分析进行得比较透彻，必须考虑比词类更小的次类。由于同一类词的语法功能并不完全相同，故大类下面还可以分成若干个次类。例如动词还可分为助动词、不及物动词、及物动词、以及可以带词结构的动词；代词可分为人称代词、指示代词、疑问代词等等。词法知识源中的词典除了装有词所对应的词类、音节序列的内容外，还有关于词的次类以及词所对应的文字等内容，其中文字是为汉字输出作准备的。句法知识源中除了一般的句子生成规则外，也还有关于词的次类的句法知识。系统中的解析器利用这些知识确定主要关键词，然后从关键词入手向左右分析，确定句子的基本结构。为了语义理解及修正误识的词，系统还有一个语义知识源，存有一些语义规则，如：动词“是”要求主语、宾语、具有相同的属性；某些动词对施体或受体的限制等等。解析器在进行主语、宾语、状语、补语等句子成分分析时，把语义规则、同音字辨析规则结合进去，进行同音词、谐音词的辨析，并在不改变句子的基本结构和意思的基础上修正误识的词。若出现关键词误识等系统无法修正的错误时，解析器把错误信息传递到“黑板”总数据库，然后在管理程序控制下向用户询问或重新处理。若句子被接受或修改成功，系统再分析它的功能类型。一个句子从功能上可分为陈述句、疑问句、感叹句等，它们具有各自的特征，系统通过核实这些特征来确定句子的功能类型。最后，系统根据句子的功能类型和词典中各个词所对应的汉字输出带有标点符号的汉字句子。

### 3 系统性能

整个系统在微机上模拟实现，该微机系统由 IBM PC—XT 及 TMS 320 高速信号处理开发板构成。采样和 LPC 分析用 TMS320 汇编语言实现，其余部分用 FORTRAN-77 语

言实现,用8088汇编语言连接这两部分。目前系统已初步调试完毕,某些细节尚在调试完善中。表2是USTC-II语音识别与理解系统的初步性能。

表2 系统基本性能

说话者	特定人,近距离说话
说话环境	计算机房,中等质量话筒
语速要求	中等语速
词汇量	100个音节,300个词
语言限制	自然语言,单句
实验数据	50个语音句子,平均每句十个音节
正确率	5%的音节错误,9%的句子错误

参 考 文 献

- [1] Roth F H, *Trands in Speech Recognition*, Prentice-Hsll Inc. Englewood cliffs, N. J, 1980, p206—233.
- [2] 李兆同、徐思益,《语言学导论》,新疆人民出版社,1981年。
- [3] 汪晓东、戴蓓倩,Chinese Speech Understanding System, ICPR-88,ROME, pp.1088
- [4] 易克初、胡征,“论汉语语言系统的科学性”,CCSP-88,西安, p197.
- [5] 朱德熙,《语法讲义》,商务印书馆,1982年。
- [6] 上海师范大学中文系汉语教研室,《语法》,上海教育出版社,1982年(第二版)。
- [7] Woods W A Transition Network Crammars for Natural Language Analysis, CACM 13, 1970, pp. 591-606.

附 符号说明及句子生成规则

一、符号说明

Mc 名词	Fu 副词	Zu 主语	Md 名词短语	J 句子
Dc 动词	Jc 介词	Wu 谓语	Dd 动词短语	( ) 表示可有可无
Xc 形容词	Lc 连词	Bu 宾语	Xd 形容词短语	[ ] 表示任选一项
Dac 代词	Zc 助词	Pu 补语	Jcj 介词结构	
Sic 数量词	Yc 语气词	Zua 状语	Dbj 动宾结构	

二、句子生成规则(一条生成规则相当于几条产生式)

$$(1) J \longrightarrow Zu + Wu + (Yc)$$

$$(3) Pu \longrightarrow 得 + (Fc) + Xc$$

$$(2) Wu \longrightarrow \left[ \begin{array}{l} (Zua) + Dd \\ (Zua) + Xd \end{array} \right]$$

$$(4) Zua \longrightarrow \left[ \begin{array}{l} Xc + 地 \\ Fc + (Xc) \\ Jcj \end{array} \right]$$

- |                      |                                 |
|----------------------|---------------------------------|
| (5) Dd → [ Dc + Bu ] | (9) Md → [ (Mc) + (的) + Mc ]    |
| (6) Xd → Xc + (Pu)   | (10) Dbj → Dc + Bu              |
| (7) Zu → [ Md ]      | (11) Jcj → Jc + (Xc) + (的) + Mc |
| (8) Bu → [ Dbj ]     |                                 |

## Speech Recognition and Understanding Based on Knowledge

Lu Yanghai                      Dai Beiqian

*(Department of Electronics Engineering)*

### Abstract

This paper describes a continuous-speech recognition and understanding system for Chinese (called USTC-2). In the USTC-2 system, knowledge of morphology, syntax and semantics are applied, to greater extent, to raise the speed and the accuracy of recognition and to improve the system's ability to understand spoken Chinese. An analytical method starting with KEYWORDS is proposed and adopted in the USTC-2 system. This method combines syntactical and semantic analyses and equips the system with a strong capacity to discriminate homonyms and to correct errors. This system can accept and understand nearly all kinds of simple Chinese sentences, and is able to output the sentences in the form of Chinese characters and punctuations as well.

**Key words:** speech recognition, language understanding, syllable-lattice, word-lattice

# 十二烷基硫酸钠和辛基酚聚氧乙烯醚 混合表面活性剂水溶液体相及界面层 相互作用研究

赵叔晞 赵剑曦

(中国科学技术大学) (福建农学院)

## 摘 要

本文由十二烷基硫酸钠 (SDS) 和辛基酚聚氧乙烯醚 ( $C_8PhE_9$ ) 混合表面活性剂水溶液的  $\gamma-\lg C$  曲线, 按 Rubingh 非理想溶液理论计算得到混合胶团内两种分子的相互作用常数  $\beta^M = -1.21$ , 属于弱相互作用, 且混合胶团是以活性较高的非离子表面活性剂为主组成。还根据 Rosen 理论计算了水溶液——空气界面单分子层内两者相互作用参数。结果  $\alpha = 0.9$  时,  $\beta = 1.15$ 。和  $C_8PhE_9$  浓度固定为  $5 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  的  $\gamma-\lg C_{SD}$  实验相比, 上述结果可能描述了表面竞争吸附过程。

**关键词:** 混合胶团, 相互作用参数, 竞争吸附。

## 1 引言

混合表面活性剂溶液的性能经常优于单一表面活性剂, 因而可以通过复配得到性能优越的产品。研究两种表面活性剂分子间的相互作用, 可为深入了解混合体系的某些行为提供有用的信息。例如, 我们曾用十二烷基硫酸钠 (简称 SDS, 下同) 和辛基酚聚氧乙烯醚 (简称  $C_8PhE_9$ , 下同) 相互作用参数  $\beta$ , 半定量地解释了上述混合表面活性剂水溶液的电导行为, 得到和实验相一致的结果, 表明以非理想溶液理论为基础, 可以得到相互作用的定量表征, 是研究表面活性剂混合体系性质的一个基础参数<sup>[1]</sup>。本文以 Rubingh<sup>[2]</sup>、Rosen<sup>[3-5]</sup> 理论为依据, 报道用表面张力法测定计算阴离子表面活性剂 SDS 和非离子表面活性剂  $C_8PhE_9$  两种分子在混合胶团和水溶液——空气界面单分子层的相互作用参数  $\beta^M$  及  $\beta$ , 并用该参数

讨论了混合胶团与界面单分子层的一些行为。

## 2 实验

### 2.1 试剂

SDS 用化学纯试剂, 先由乙醚抽提以除去残留醇, 再由无水乙醇抽提后重结晶, 烘干。纯化后的 SDS 样品经红外光谱鉴定, 与标准谱图具有相同的吸收峰; 其水溶液的表面张力与溶液浓度对数曲线在 cmc 处无极小值。纯化后的样品保存于干燥器中备用。

$C_{12}PhE_9$  是日本进口试剂, 标明纯度大于 99%, 使用前不再进行纯化。经测定, 其水溶液的表面张力  $\gamma$  与浓度对数曲线在 cmc 处亦无极小值。

水是以高锰酸钾处理过的二次蒸馏水。

### 2.2 实验方法

采用滴体积法测定各种溶液表面张力随浓度的变化。滴体积法在文献[6]的基础上略加改进。当用洗耳球经乳胶管控制液滴时, 由于存在橡胶的弹性力, 使液滴比较难以控制。我们分别用注射器和铜管代替之, 使液滴的控制更为精确。实验时, 为得到接近平衡的表面张力数值, 可先挤出约占总液滴体积 90% 的液滴, 悬挂 1 分钟左右, 再让液滴慢慢落下, 并取四次测量结果的平均值。所用计算公式为

$$\gamma = \frac{V\rho g}{R} F$$

式中,  $V$  为液滴体积 ( $cm^3$ );  $\rho$  为液体的密度 ( $g \cdot cm^{-3}$ );  $g$  为重力加速度常数;  $R$  为滴头半径 ( $cm$ );  $F$  为校正因子。

配制的溶液须静置数日后使用, 以消除泡沫的影响。所有实验都是在  $25 \pm 0.1^\circ C$  的恒温水槽中进行。

## 3 结果和讨论

### 3.1 混合溶液的 $r-lgc$ 曲线和表面活性

纯 SDS (组分 1)、纯  $C_{12}PhE_9$  (组分 2) 以及 1 和 2 两种溶质比例分别为 1:9 至 9:1 的等比混合水溶液的表面张力  $r$  与总浓度对数  $lgC_{1,2}$  的实验结果如图 1 一簇曲线所示。由图 1 可知, SDS 和  $C_{12}PhE_9$  无论以何种比例混合, 混合水溶液的临界胶团浓度  $C_{1,2}^M$  及其相应的 cmc 处的表面张力  $\gamma_{cmc}$  都依次处于纯 SDS 和纯  $C_{12}PhE_9$  的相应值之间, 结果如表 1 所示。

表 1 SDS、 $C_{12}PhE_9$  混合溶液的  $C_{1,2}^M$  及  $\gamma_{cmc}$

$C_{SDS}:C_{C_{12}PhE_9}$	0:1	1:9	1:4	2:3	3:2	4:1	9:1	1:0
$C_{1,2}^M \times 10^4 (mol \cdot L^{-1})$	5.00	5.43	5.95	7.42	10.00	16.00	24.00	80.00
$\gamma_{cmc} \times 10^3 (N \cdot m^{-1})$	31.0	32.0	32.6	34.2	35.0	35.0	35.5	37.7

临界胶团浓度  $C_{1,2}^M$  及相应的  $\gamma_{cmc}$  是衡量表面活性剂表面活性强弱两个基本参数。一些研究表明, 如果混合表面活性剂分子间存在强相互吸引 (例如由正、负离子混合表面



活性剂水溶液), 则由于表面吸附增加, 表面活性大大提高, 混合溶液的临界胶团浓度及其  $\gamma_{cmc}$  都比单一表面活性剂小<sup>[7-9]</sup>。因而由表 1 所示 SDS 和  $C_8PhE_9$  混合体系的实验结果, 可粗略判断 SDS 和  $C_8PhE_9$  分子之间仅存在弱相互作用。

### 3.2 混合胶团内两种分子的相互作用参数的计算

按照 Rubingh<sup>[2]</sup> 非理想溶液理论处理二元混合表面活性剂溶液的办法, 混合胶团内 SDS 和  $C_8PhE_9$  两种表面活性剂分子的相互作用参数  $\beta^M$  可以通过测定不同比例的混合表面活性剂水溶液的临界胶团浓度  $C_{12}^M$  以及两种纯表面活性剂水溶液的临界胶团浓度  $C_1^M$ 、 $C_2^M$  通过理论计算求出, 计算步骤如下。

首先, 由临界胶团浓度参数按下式计算二元混合胶团中第一种表面活性剂的摩尔分数  $x_1^{M10}$

$$\frac{x_1^M \ln(C_{12}^M \cdot \alpha / C_1^M \cdot x_1^M)}{(1-x_1^M)^2 \ln[C_{12}^M (1-\alpha) / C_2^M \cdot (1-x_1^M)]} = 1 \quad (1)$$

式中  $\alpha$  是第一种表面活性剂在总表面活性剂中的摩尔分数, 是在制备溶液时可由人为控制的一个量。求出  $x_1^M$  后, 可用下式进一步计算混合胶团中两种表面活性剂的相互作用参数  $\beta^M$  和活度系数  $f_1$ 、 $f_2$ <sup>[10]</sup>。

$$\beta^M = \ln(C_{12}^M \alpha / C_1^M x_1^M) / (1-x_1^M)^2 \quad (2)$$

$$f_1^M = \exp \beta^M (1-x_1^M)^2 \quad (3)$$

$$f_2^M = \exp \beta^M x_1^{M2} \quad (4)$$

这样就可以从表 (1) 的实验结果, 用试探法按 (1) 式求出不同  $\alpha$  值时的  $x_1^M$ 、 $\beta^M$  及  $f_1^M$ 、 $f_2^M$ , 计算结果列于表 2。

表 2 SDS、 $C_8PhE_9$  混合溶液的  $\alpha$ 、 $C_{12}^M$ 、 $x_1^M$ 、 $\beta^M$ 、 $f_1^M$ 、 $f_2^M$  值

$C_{SDS} : C_{C_8PhE_9}$	$\alpha$	$C_{12}^M \times 10^4 (\text{mol} \cdot \text{L}^{-1})$	$x_1^M$	$\beta^M$	$f_1^M$	$f_2^M$
0:1	0.0	5.00				
1:9	0.1	5.43	0.022	-1.23	0.308	0.999
1:4	0.2	5.95	0.046	-1.23	0.326	0.997
2:3	0.4	7.42	0.099	-1.21	0.374	0.988
3:2	0.6	10.00	0.171	-1.20	0.438	0.966
4:1	0.8	16.00	0.292	-1.20	0.548	0.903
9:1	0.9	24.00	0.411	-1.21	0.657	0.815
1:0	1.0	80.00				

$r \times 10^3$   
( $N \cdot m^{-1}$ )

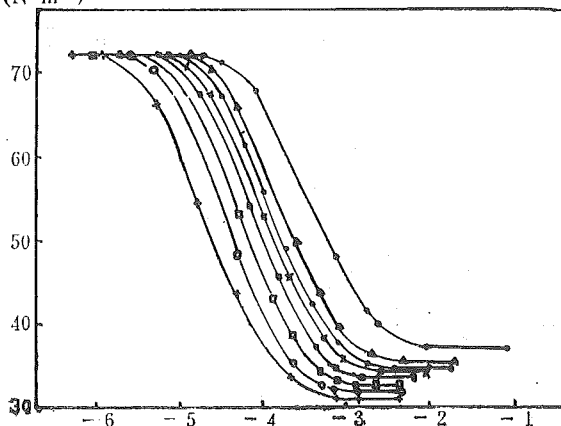


图 1 SDS、 $C_8PhE_9$  及等比混合溶液的  $\gamma$ - $\lg C$  曲线

- pure:SDS
- SDS: $C_8PhE_9 = 4:1$
- SDS: $C_8PhE_9 = 2:3$
- SDS: $C_8PhE_9 = 1:1$
- △ SDS: $C_8PhE_9 = 9:1$
- × SDS: $C_8PhE_9 = 3:2$
- SDS: $C_8PhE_9 = 1:4$
- + pure  $C_8PhE_9$

结果表明, SDS、 $C_8$ PhE, 混合胶团中两种表面活性剂的相互作用参数平均值为  $-1.21$ 。我们曾计算过由十二烷基硫酸钠和溴化正辛基三甲基铵构成的正负离子混合胶团间的  $\beta^M$  平均值为  $-15.27$ , 说明了正负离子间的强相互吸引作用<sup>[12]</sup>。比较两者的  $\beta^M$  值, 可以看出阴离子表面活性剂十二烷基硫酸钠和非离子表面活性剂辛基酚聚氧乙烯醚混合胶团分子间的相互作用属于弱相互吸引, 和表面张力实验的直观结果相一致, 但给出了明确的量的概念。

### 3.3 关于混合胶团及溶液体相的某些行为

从表 1 的数值可知, 非离子表面活性剂  $C_8$ PhE, 具有更低的临界胶团浓度和更小的  $\gamma_{cmc}$

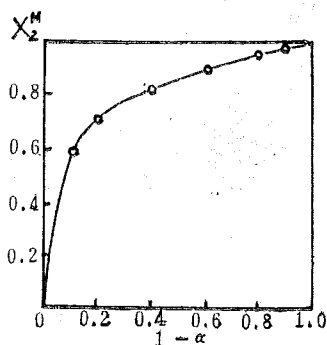


图 2  $x_2^M \sim 1 - \alpha$  曲线

值, 因而比 SDS 有更高的表面活性。而表 2 的计算结果说明, 混合胶团中非离子表面活性剂所占的比例  $x_2 = 1 - x_1$  总是比  $C_8$ PhE, 在溶质中所占比例  $(1 - \alpha)$  来得大。而且当  $1 - \alpha$  大于 0.1 时,  $x_2^M$  的值都已超过 0.5。这说明, 在相当大的浓度范围内, 混合胶团是以活性较高的非离子表面活性剂为主组成的, 而阴离子表面活性剂则是被结合于其中。

$C_8$ PhE, 在溶质及胶团中所占比例的关系如图 2 所示。

图 2 的结果表明, 虽然进入胶团的非离子表面活性剂比例  $x_2^M$  随着  $1 - \alpha$  值的增加而增加, 但当  $1 - \alpha$  值在 0.1~0.9 之间时, 尽管  $C_8$ PhE, 在溶质中的比例增加了 9 倍, 然而它在

胶团中所占的比例仅增加了 1.66 倍, 说明了混合胶团的结构对溶质比例具有较好的稳定性。这种以非离子表面活性剂为主的混合胶团大大降低了对反离子的束缚, 致使溶液对反离子的敏感性降低, 改善了在离子介质中的使用特性, 这点已为 SDS、 $C_8$ PhE, 混合溶液电导行为的研究结果所证实<sup>[11]</sup>。

SDS 与  $C_8$ PhE, 混合体系虽存在弱相互作用, 但按 Rosen 等人提出的标准<sup>[4]</sup>, 该体系还不足以形成协同效应 (Synergism), 因为该混合体系的  $\beta^M$  值仅为  $-1.21$ , 其绝对值小于相应的  $|\ln(C_1^M/C_1^0)| = 2.77$ 。

Turro<sup>[10]</sup>等曾研究十二烷基硫酸钠和壬基酚聚氧乙烯醚 ( $C_9H_{17} - \langle \bigcirc \rangle - O - (CH_2CH_2O)_{10}H$ , 简称  $C_9$ PhE<sub>10</sub>) 之间的相互作用, 计算出其  $\beta^M = -3.4$ , 因而其相互吸引比本文报道的体系强。比较  $C_9$ PhE<sub>10</sub> 和  $C_8$ PhE, ( $C_8H_{17} - \langle \bigcirc \rangle - O - (CH_2CH_2O)_9H$ )<sup>[11]</sup>这两种表面活性剂分子结构, 前者憎水基的直链烷基碳原子数较后者多一个, 但亲水基也较后者多一个氧乙基。上述结果, 可能意味着  $C_9$ PhE<sub>10</sub> 憎水基中烷基碳原子数少是影响和 SDS 分子相互吸引较弱的主要原因。

### 3.4 界面混合单分子层中两种表面活性剂分子间相互作用参数计算

加入非离子表面活性剂对界面性质的影响, 可以用界面混合单分子层中两种表面活性剂分子间相互作用参数  $\beta$  来进行讨论。Rosen<sup>[4]</sup>等人将 Rubingh 对二元混合胶团的处理办法推广到水溶液——空气界面, 得到一组与 (1)~(4) 相似的公式:

$$\frac{x_1^2 \ln(C_1/C_1^0 x_1)}{(1-x_1)^2 \ln[C_2/C_2^0 (1-x_1)]} = 1 \quad (5)$$

$$\beta = \frac{\ln(C_1/C_1^0 x_1)}{(1-x_1)^2} \quad (6)$$

$$f_1 = \exp\beta(1-x_1)^2 \quad (7)$$

$$f_2 = \exp\beta x_1^2 \quad (8)$$

式中,  $x_1$  为表面活性剂 1 在界面混合单分子层上的摩尔分数;  $C_1^0$ 、 $C_2^0$  为产生一给定表面张力  $\gamma$  时纯表面活性剂 1 和 2 在溶液相的摩尔浓度;  $C_1$ 、 $C_2$  为产生同一表面张力时, 混合表面活性剂中组分 1、2 在溶液相的摩尔浓度。符号  $\beta$ 、 $f_1$ 、 $f_2$  意义同前, 但均指得是溶液—空气界面混合单分子层的性质, 故不用上标  $M$  (指胶团mice)。这样, 从图 1 的表面张力实验曲线可求出指定某  $\gamma$  值时的浓度值, 进而计算出  $x_1$ 、 $\beta$ 、 $f_1$ 、 $f_2$  等参数。

试探结果表明,  $\alpha$  值处于 0.1~0.8 之间时, 无论表面张力指定于什么值, 方程 (5) 均无解。当  $\alpha=0.9$  时, 即体系中表面活性较高的组分  $C_0\text{PhE}$  含量较低时, 方程有解。表面张力分别降至 0.060、0.050、0.040  $\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$  的计算结果列于表 3。

表 3  $\alpha=0.9$  时, 不同  $\gamma$  的混合单分子层相互作用计算结果

$\gamma \times 10^3 (\text{N}\cdot\text{m}^{-1})$	$C_{\text{总}} \times 10^4$	$C_1^0 \times 10^4$	$C_2^0 \times 10^4 (\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	$x_1$	$\beta$	$f_1$	$f_2$
60	0.794	1.995	0.095	0.1929	1.24	2.24	1.05
50	2.089	5.623	0.240	0.1506	1.11	2.23	1.03
40	7.943	30.200	0.871	0.0974	1.09	2.43	1.01

### 3.5 界面层行为的初步讨论

我们在文献[12]曾计算阴离子表面活性剂 SDS 和正离子表面活性剂溴化正辛基三甲基铵混合体系在界面层的相互作用参数  $\beta$ , 其值约为 -15.15 ( $\gamma=0.050\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$  时), 和胶团的  $\beta^M \doteq -15.27$  相近, 说明正负离子在界面层也存在类似于胶团内的强相互作用。而本文报导的弱相互作用体系的结果与前者形成明显的差别, 对此我们初步讨论如下。

从数学角度看, 无解的原因是  $C_2/C_2^0 > 1$ , 就是说当表面张力降到某一数值时, 混合体系组分 2 的浓度比单一组分 2 的浓度还大, 此时比由组分 2 组成的单一体系多出的活性剂分子 (其数量与  $C_2 - C_2^0$  成正比) 可能不会留在界面层 (否则表面张力值更低), 而和混合体系中组分 1 分子留在溶液内 (未达到临界胶团浓度)。换言之, 当解不出  $x_1$  时是否表明了界面层由单一的活性较高的表面活性剂分子所占满。而只有当此活性较高的表面活性剂含量比较低时 (本例  $1-\alpha=0.1$ ), (5) 式才有解, 计算得到的  $x_1$  指示了界面混合单分子层组分 1 的摩尔分数, 表明表面活性较低的组分, 只有在含量较大时, 才能“挤”进界面层。计算的  $\beta$  为正值, 说明两种分子间的吸引力低于同种分子, 因而表现出正偏差, 所得活度数值大于 1。此时, 挤进界面层的 SDS 分子, 受到来自  $C_0\text{PhE}$  分子层的“排斥”。计算结果还表明, 随着界面吸附量增加, 表面张力数值的下降, SDS 在界面层的比例也趋于下降。这样, 对弱相互作用体系按 Rosen 理论计算的表面层相互作用, 给我们描述了一幅竞争吸附的图象。

在 SDS 溶液中添加浓度固定的  $C_0$  PhE 组分, 混合体系的表面张力  $\gamma$  随 SDS 浓度  $\lg C_{SDS}$  的实验曲线, 定性地支持了上述解释.  $C_0$  PhE 浓度为  $5 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  时的结果如图 3 所示. 这一浓度正是  $C_0$  PhE 的临界胶团浓度, 因此未加进 SDS 时, 界面层已为  $C_0$  PhE 分子所占满. 当加入的 SDS 浓度小于  $3.5 \times 10^{-4} \text{ M}$  时, 对混合溶液的表面张力几乎没有什

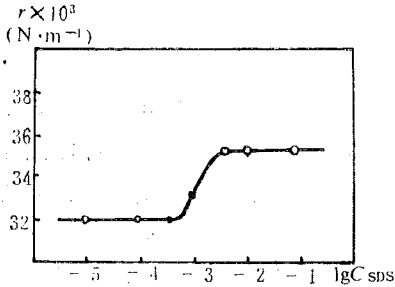


图 3  $\gamma \sim \lg C_{SDS}$  曲线 ( $C_0 = 5 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ) 表面张力趋于另一稳定值, 说明在 SDS 浓度较高时, 水溶液——空气界面形成了稳定的混合单分子层, 此层的表面张力值和图 1 中  $\alpha = 0.8$  的  $r_{CMC}$  值相近.

么影响, 其值约为  $C_0$  PhE 的  $\gamma_{CMC}$  值, 说明 SDS 比例较低时, 不能在界面上与  $C_0$  PhE 竞争, 界面层由非离子表面活性剂组成. 当 SDS 浓度大于  $3.5 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  时, 表面张力曲线随 SDS 浓度的增加而升高. 此时, 由于表面活性较低的 SDS 挤进界面层, 取代了某些  $C_0$  PhE, 因而表面张力升高. 而当 SDS 浓度达到  $3.5 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  时,

#### 4 初步结论

- ① 用 Rubingh 和 Rosen 理论处理表面张力随浓度变化的实验结果, 可以得到混合表面活性剂分子在胶团内和在界面层相互作用强弱的定量表征, 有助于了解表面活性剂的复配规律.
- ② 当二元表面活性剂形成混合胶团时, 表面活性高的组分在胶团中占有更大的比例, 且胶团的组成随配比变化较小.
- ③ 活性不同的表面活性剂在形成界面定向吸附层时, 存在竞争吸附过程.

#### 参 考 文 献

- [1] 赵叔晞等, 中国科技大学学报, 19 (1989), 184.
- [2] Rubingh D N, Solution Chemistry of Surfactant (Ed. Mittal K L), 1979, Plenum Press, New York, Vol.1, 337.
- [3] Rosen M. J. et al., *J. Colloid and Interface Sci.*, **95** (1983), 443.
- [4] Hua X J et al., *J. Colloid and Interface Sci.*, **90** (1982), 212.
- [5] Rosen M J et al., *J. Colloid and Interface Sci.*, **86** (1982), 164.
- [6] 朱步瑶等, 化学通报, 1981, No.6, 21.
- [7] 赵国玺等, 化学学报, 38 (1980), 409.
- [8] 丁慧君等, 化学学报, 43 (1985), 603.
- [9] 杨望生等, 化学学报, 43 (1985), 705.
- [10] Turro N J et al., *J. Phys. Chem.*, **90** (1986), 288.
- [11] 戚文彬, 化学试剂, 1980, No.3, 17.
- [12] 赵叔晞等, 安徽大学学报, 1989, No.1, 57.

# Bulk and Surface Interaction of Mixed Ionic and Nonionic Surfactant Aqueous Solution of Sodium Dodecyl Sulfate and Octylphenol Polyoxyethylene Ether

Zhao Shuxi

Zhao Jianxi

*(Univ. of Sci. & Tech. of China) (Instit. of Agr. of Fujian)*

## Abstract

The bulk and surface interactions of mixed surfactant aqueous solution of sodium dodecyl sulfate (SDS) and octylphenol polyoxyethylene ether ( $C_8PhE_9$ ) have been investigated. The quantitative calculation of interaction parameter of mixed micelle  $\beta^M$  is based on a formulation proposed by Rubingh from surface tension experiments. The value of  $\beta^M$  for mixed micelle is about  $-1.21$  indicating a rather weak bulk interaction in the comicelle. The interaction parameter of the mixed monolayer  $\beta$  is also calculated according to the surface tension experiments based on Rosen's formulation. The value of  $\beta$  is about  $1.15$  when  $\alpha=0.9$ . The results may describe a competitive adsorption at the aqueous solution/air interface.

**Key words:** comicelle, interaction parameter, competitive adsorption.

# 活性氯—过氧化氢氧化光泽精发光的研究

吕小虎 陆明刚

(应用化学系)

## 摘 要

通过研究光泽精— $H_2O_2$  和光泽精— $ClO^-$ — $H_2O_2$  化学发光反应的动力学曲线、吸收光谱以及化学发光光谱, 提出了光泽精— $ClO^-$ — $H_2O_2$  化学发光反应的机理。还就温度和反应试剂的浓度对化学发光强度的影响进行了试验和讨论。

**关键词:** 光泽精, 活性氯, 过氧化氢, 化学发光机理。

光泽精 (lucigenin) 作为一种化学发光试剂已早为人知<sup>[1]</sup>。但已往的工作大多限于利用单一氧化剂来氧化光泽精而产生化学发光<sup>[2,3]</sup>, 我们的工作发现碱性光泽精溶液在活性氯(碱性条件下指  $ClO^-$ ) 和过氧化氢同时存在时的化学发光强度要远远大于单独使用这两种氧化剂时的化学发光强度。利用这种增强作用我们已建立了活性氯的化学发光分析法, 并用于监测水体中的活性氯的含量<sup>[4]</sup>。本文主要研究光泽精— $ClO^-$ — $H_2O_2$  体系的化学发光机理, 同时对一些影响因素进行试验和讨论。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器设备

YHF—1 型液相化学发光分析仪 (西安无线电八厂), UV—240 自动记录分光光度计 (日本岛津), WP<sub>4</sub> 光学光谱分析仪 (安徽光机所), XWT—106 型台式自动平衡记录仪 (上海大华仪表厂)。

### 1.2 试剂

称取适量光泽精 (美国 SIGMA 公司), 将其配制成  $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/l}$  的贮备溶液; 活性氯贮备溶液的浓度为  $0.49 \text{ mol/l}$ , 用碘量法标定所得; 过氧化氢贮备溶液的浓度为  $9.7 \text{ mol/l}$ 。这些反应试剂的稀溶液由上述贮备液稀释而得。其中活性氯由 pH 为 12.5 的氢氧化钠溶液来配制, 它和过氧化氢的稀溶液均应当日配制。

1988年12月26日收到

### 1.3 试验步骤

充分清洗化学发光反应池, 向其中分别加入 2 ml 适当浓度的碱性光泽精溶液和 1 ml 活性氯溶液, 混合后, 启动记录仪; 然后再向反应池中注入 1 ml 的过氧化氢溶液, 此时便发生化学发光反应, 以 GDB—142 光电倍增管接收发光信号, 其工作电压为 400V。化学发光动力学曲线由记录仪记录。由光学光谱分析仪记录该体系的化学发光光谱。

## 2 结果与讨论

### 2.1 化学发光动力学曲线

分别记录光泽精— $H_2O_2$  及光泽精— $ClO^-$ — $H_2O_2$  两个体系的化学发光动力学曲线图 1 中, (a) 光泽精 ( $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/l}$ ) +  $NaOH$  ( $1.0 \text{ mol/l}$ ) +  $H_2O_2$  ( $1.45 \text{ mol/l}$ ); (b) 光泽精 ( $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/l}$ ) +  $ClO^-$  ( $2.5 \times 10^{-4} \text{ g/ml}$ ,  $pH=12.5$ ) +  $H_2O_2$  ( $1.45 \text{ mol/l}$ )。前者产生的化学发光峰值强度可保持 7min, 由发光开始到强度下降到峰值的 50% 处, 需经历 24min。当向光泽精— $H_2O_2$  发光体系中加入适量的活性氯时, 发光峰值强度增大, 而峰值持续时间明显缩短。

### 2.2 化学发光光谱

由记录到的化学发光光谱 (见图 2)。图 2 中, (a) 光泽精 ( $5.0 \times 10^{-4} \text{ mol/l}$ ) +

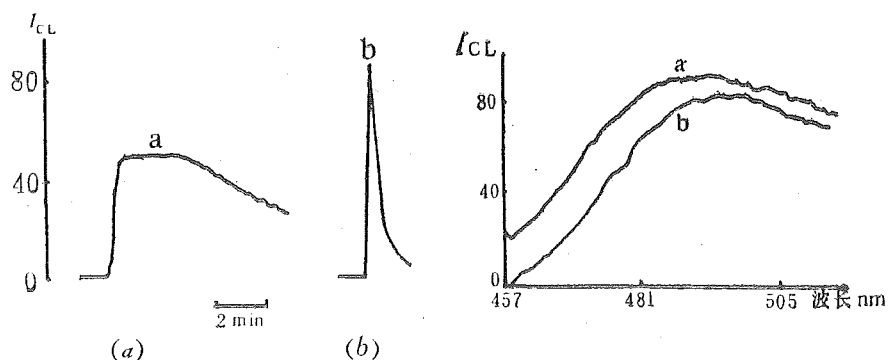


图 1 化学发光动力学曲线

图 2 化学发光光谱

$NaOH$  ( $0.3 \text{ mol/l}$ ) +  $H_2O_2$  ( $0.4 \text{ mol/l}$ ), 光谱分析仪预置迭加数为 80。(b) 光泽精 ( $5.0 \times 10^{-4} \text{ mol/l}$ ) +  $NaOH$  ( $0.3 \text{ mol/l}$ ) +  $ClO^-$  ( $2.0 \times 10^{-3} \text{ mol/l}$ ) +  $H_2O_2$  ( $0.4 \text{ mol/l}$ ), 光谱分析仪预置迭加数为 40。由图 2 可知, 在碱性条件下, 用过氧化氢或过氧化氢—活性氯氧化光泽精发光, 它们的发光光谱形状一致, 其最大发射峰位于  $490 \text{ nm}—500 \text{ nm}$  波长范围内。这说明两个化学发光反应中的光辐射体相同。参照文献 [2,3] 知, 该光辐射体为 N—甲基吡啶酮和光泽精。正是由于有两种光辐射体存在于化学发光反应中, 故其谱带较宽<sup>[5]</sup>。

### 2.3 反应试剂的浓度对发光强度的影响

化学发光反应中试剂的浓度对发光强度有较大的影响, 因为反应试剂的浓度影响着化学反应的速度和化学发光中的浓度猝灭作用, 而发光强度又受上述两个因素所控制。实验结果表明, 光泽精— $ClO^-$ — $H_2O_2$  体系的最佳化学发光反应条件是: 光泽精浓度为  $5.0 \times 10^{-5} \text{ mol/l}$ — $2.0 \times 10^{-4} \text{ mol/l}$ , 用量 2ml;  $ClO^-$  和  $H_2O_2$  浓度分别为  $2.0 \times 10^{-3} \text{ mol/l}$  和  $0.4 \text{ mol/l}$ , 用量均取 1 ml; 体系的 pH 值控制在 12.3—13.5 为宜。在上述条件下, 能得到最强的化学发

光强度。

## 2.4 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-ClO<sup>-</sup> 的氧化作用

碱性光泽精溶液被 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>、ClO<sup>-</sup> 或 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-ClO<sup>-</sup> 氧化速度的大小可由该溶液在波长为 398nm 处的吸光度的降低速度来表示(见图 3)。图 3 中, (a) 光泽精 (5.0 × 10<sup>-5</sup> mol/l) + ClO<sup>-</sup> (2.5 × 10<sup>-4</sup> g/ml, pH = 12.5), I 为碱性光泽精溶液 (5.0 × 10<sup>-5</sup> mol/l, pH = 12.5) 的吸收曲线; (b) 光泽精 (5.0 × 10<sup>-5</sup> mol/l) + NaOH (pH = 12.5) + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (0.3 mol/l); (c) 光泽精 (5.0 ×

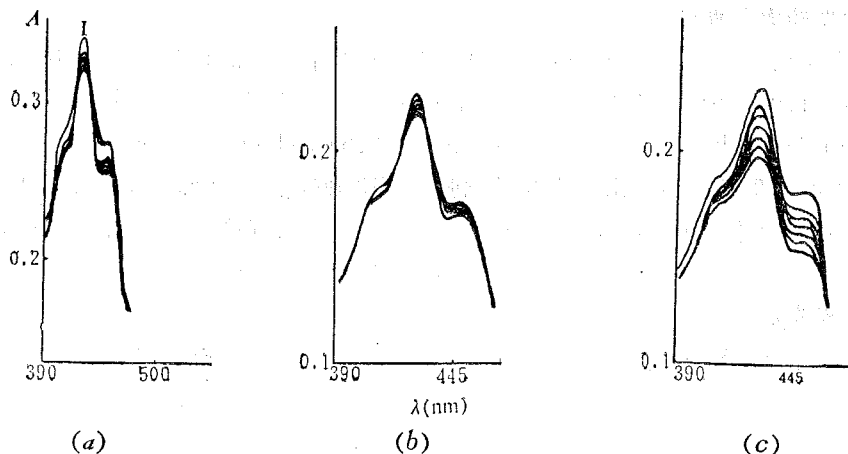


图 3 吸收光谱  
t = 10min, n = 7

10<sup>-5</sup> mol/l) + ClO<sup>-</sup> (5 × 10<sup>-3</sup> mol/l, pH = 12.5) + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (0.3 mol/l). 若 A<sub>t<sub>1</sub></sub> 和 A<sub>t<sub>2</sub></sub> 分别表示碱性光泽精溶液在时刻 t<sub>1</sub> 和 t<sub>2</sub> 时波长为 398nm 处的吸光度, 则其平均氧化速度可表示为

$$\text{平均氧化速度} = \frac{A_{t_1} - A_{t_2}}{t_2 - t_1} \quad (1)$$

由式 (1) 求得的光泽精平均氧化速度列入表 1

表 1 光泽精体系的平均氧化速度\* (A/min)

氧化剂	速 度 (A/min)					
	7	14	21	28	35	42
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.4	3.4	3.1	2.8	2.7	2.7
ClO <sup>-</sup>	2.3	2.1	1.9	2.1	2.3	2.1
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> -ClO <sup>-</sup>	11	8.6	7.6	7.9	7.7	7.5

\* 表中速度值已扩大 10000 倍。

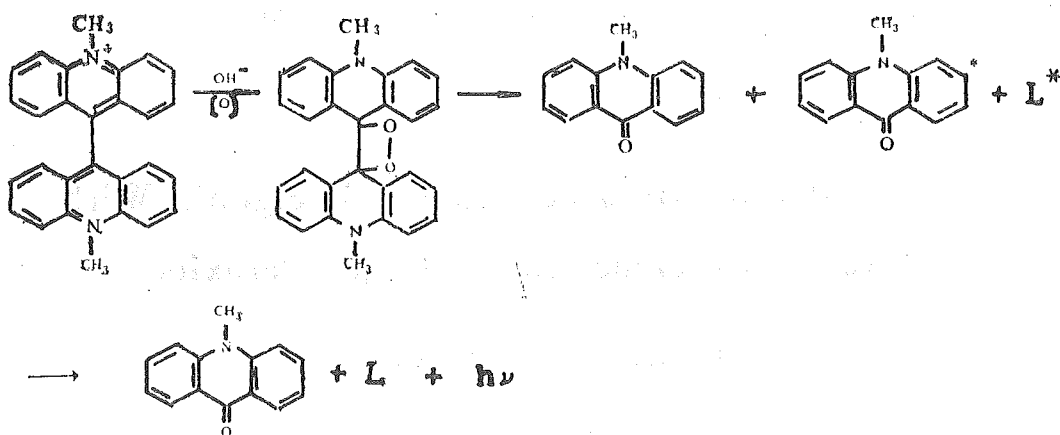
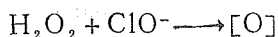
表 1 结果表明, 在任何时间间隔内, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-ClO<sup>-</sup> 氧化光泽精的速度始终大于 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 和 ClO<sup>-</sup> 单独氧化光泽精的速度之和。据此, 我们推测光泽精-ClO<sup>-</sup>-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 发光体系并非光泽精-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 发光体系和光泽精-ClO<sup>-</sup> 发光体系的简单并存, 而是 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 和 ClO<sup>-</sup> 先反应生成氧化能力更强的氧化剂, 然后这种氧化剂再氧化光泽精而发光。根据文献[6], 该氧化剂最有可能的是活性氧[O]。生成的活性氧和 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 一样能氧化碱性光泽精溶液生成四元环



过氧化物中间体, 该中间体能量较高, 易裂解。裂解释放的能量被其产物分子和共存的光泽精分子吸收而生成激发态, 然后便产生化学发光。所述体系的化学发光表观强度 (即动力学曲线上所呈现的发光强度) 除与体系的化学发光效率和化学发光反应速度有关外还受光辐射体浓度的影响, 在本文所述体系中即受光泽精和产物分子浓度的影响。图 1 所展示的化学发光强度与时间的关系和表 1 所给的光泽精平均氧化速度之间的差别, 乃是化学发光反应中两种光辐射体浓度共同变化的结果。

## 2.5 化学发光机理

依据实验结果, 结合有关文献报道<sup>[2,3,6]</sup>, 提出光泽精 (L)—ClO<sup>-</sup>—H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 体系的化学发光机理为:



## 2.6 温度对化学发光强度的影响

温度除影响化学发光量子效率外, 还影响化学发光反应的速度, 这两个因素同时影响着化学发光强度  $I$ 。

$$I = \phi_{CL} \cdot V \quad (2)$$

对某一化学发光体系而言, 温度的升高使化学发光反应的速率常数  $K$  增大, 同时, 温度的升高, 也使激发态分子间以及激发态分子和其它分子间的碰撞几率增大, 这就增加了激发态的猝灭几率, 使化学发光量子效率降低。故温度对化学发光强度的影响随体系的不同而存有差异。当温度的升高使反应速率常数增大而不至于导致化学发光效率明显降低, 即使  $\phi_{CL}K$  值增大, 则化学发光强度随温度的升高而增强, 否则, 发光强度将随温度的升高而减弱。实验结果见图 4, 图 4 中, (×) 光泽精 ( $5.0 \times 10^{-4}$  mol/l) + ClO<sup>-</sup> ( $2.0 \times 10^{-3}$  mol/l, pH = 12.5) + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (0.4 mol/l), (·) 光泽精 ( $5.0 \times 10^{-4}$  mol/l) + NaOH (pH = 12.5) + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (0.4 mol/l)。实验表明, 光泽精—ClO<sup>-</sup>—H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 体系和 光泽精—H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 体系在温度低于 25℃ 时, 化学发光强度均随温度的升高而增强, 但前者递增速度远大于后者。

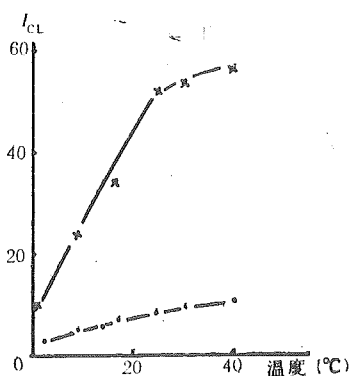


图 4 温度对化学发光强度的影响

这可解释为温度的升高,有利于  $\text{H}_2\text{O}_2-\text{ClO}^-$  生成活性氧,从而使光泽精被  $\text{H}_2\text{O}_2-\text{ClO}^-$  氧化的速度增大,表现为化学发光强度增加;而对于光泽精- $\text{H}_2\text{O}_2$  体系,温度的升高并没有增强  $\text{H}_2\text{O}_2$  的氧化能力,仅仅增大光泽精分子与  $\text{H}_2\text{O}_2$  分子间的碰撞几率,所以,该体系发光强度随温度递增的幅度不大。

#### 参 考 文 献

- [1] Glen K et al., *Angew. Chem.*, **48** (1935), 57.
- [2] Maskiewize R et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **101** (1979), 5347.
- [3] Maskiewize R et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **101**(1979), 5355.
- [4] 陆明刚、张晖、吕小虎、尹方, *环境科学与技术*, **4** (1988), 15.
- [5] 吕小虎, 中国科技大学硕士论文, 1988, p.17.
- [6] Khan A U et al., *J. Chem. Phys.*, **39** (1963), 3150.

## Study of Chemiluminescence of Lucigenin With Active Chlorine and Hydrogen Peroxide

Lu Xiaohu      Lu Minggang

(Department of Applied Chemistry)

#### Abstract

The chemiluminescent reactions of lucigenin- $\text{H}_2\text{O}_2$  system and lucigenin- $\text{ClO}^-$ - $\text{H}_2\text{O}_2$  system were studied. The kinetic curves, absorption spectra and chemiluminescence (abbr. CL) spectra of the two CL systems were recorded and studied. The CL mechanism of lucigenin- $\text{ClO}^-$ - $\text{H}_2\text{O}_2$  system was proposed. The effects of temperature and reagent's concentration on CL intensity were also discussed.

**Key words:** lucigenin, active chlorine, hydrogen peroxide, chemiluminescence.

# Determination of Cadmium in Fertilizer by Atomic Absorption Spectrometry After APDC-MIBK Extraction in Continuous Flow

Zhao Huazhang

*(China University of Science and Technology)*

Lars-Göran Danielsson      Folke Ingman

*(Royal Institute of Technology, Sweden)*

## Abstract

In the method, Ammonium pyrrolidinedithiocarbamate (APDC) was mixed with methyl isobutyl ketone (MIBK) first, after a short segmentation they were mixed with an acidic digestion solution of fertilizer. They reacted and extracted in an extraction coil. The organic extract was led into an atomic absorption spectrometer (AAS) through a phase separator. The proposed method can be used to determine cadmium in digestion solution of fertilizer down to 1 ppb at a rate of about 24 samples per hour. An increase in sensitivity of 23 times is achieved in comparison with direct aspiration of aqueous solution. APDC consumption was 0.9 mg/min and MIBK consumption was 0.3 ml/min. The r. s. d. was 1.9% and the recovery of added cadmium was 98%.

**Key words:** AAS, cadmium, extraction, flow injection analysis (FIA), pyrrolidinedithiocarbamate.

Received March 6, 1989.

## 1 Experimental

### 1.1 Reagents

All the reagents were of analytical grade and double distilled water was used throughout. The standard solution of cadmium in 0.03M nitric acid medium was prepared by diluting stock solution of 1000ppm from Merck. A solution of APDC was prepared by dissolving 0.2 g solid of APDC in 100ml of water and filtered through a filter paper of 0.45  $\mu\text{m}$ . MIBK was used without further purification.

### 1.2 Apparatus

A Varian AA-1475 atomic absorption spectrometer equipped with background correction and 'peak height' button was used throughout. The observation time for 'peak height' was 3 seconds. Instrument settings and adjustments of the air/acetylene flame were made according to the procedures given by the apparatus manual.

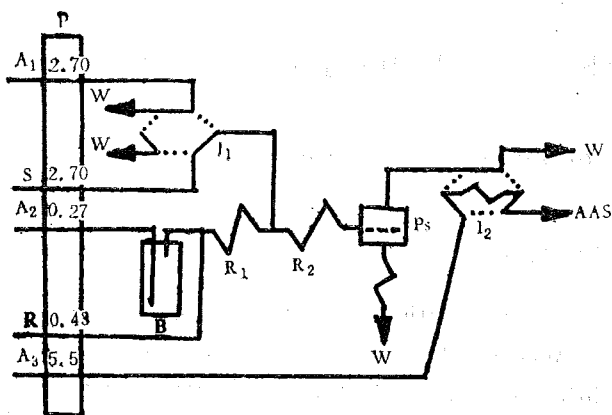


Fig. 1. Flow diagram of the proposed system: P, the peristaltic pump with indication of flow rates (ml/min); A<sub>1</sub>, wash water; A<sub>2</sub>, water feed to displacement bottle B providing a stream of MIBK; A<sub>3</sub>, the aqueous AAS carrier; S, sample solution; R, the APDC reagent; W, waste; R<sub>1</sub>, segment coil (5cm, 0.5mm i. d.); R<sub>2</sub>, extraction coil (2.5m, 0.5mm i. d.); PS, phase separator; R<sub>3</sub>, restrictor; coil; I<sub>1</sub>, the sample inlet valve in the (—) sample and (···) wash positions; I<sub>2</sub>, the injector, volume 90 $\mu\text{l}$ , in the (—) inject and (···) filling position.

## 2 Results and discussion

### 2.1 Flow rates in the extraction system

The test indicated that the flow rates of carrier should be 3.5 ml/min

The flow system comprised two peristaltic pump (Gilson Minipuls), one flow injection analyzer (FIA 5, Bifok, Sollentuna, Sweden), an extraction manifold with a membrane phase separator and a displacement bottle for pumping MIBK.

### 1.3 Manifold design

Figure 1 shows a flow diagram of the connected extraction and AAS system similar to what Lage Nord has proposed<sup>[8]</sup>. But in this system APDC is first mixed with MIBK and go through a short segment coil, then is mixed with an acidic sample so that the deposition of APDC in acidic medium could be avoided.

at least. The absorbance increased when the flow ratio of the sample to the organic phase increased, while the organic flow rate was kept constant; but the maximum is attained at a value of 12.5 approximately agreed with the value of 15 in the literature<sup>[3]</sup>.

## 2.2 The concentration of APDC

Varying the percent concentration of APDC from 0.1% to 2% did not affect the absorbance, but the absorbance of the blank increased 0.023 units when the percent concentration increased 1%. So the concentration of APDC finally used was 0.2% in determination of cadmium, but 0.5% APDC was used in the determination of the other elements in order to get enough APDC.

## 2.3 Residence time in the extraction system

The affect of residence time was studied by changing the extraction coil length while the flow rates were kept constant. The results indicated that the corresponding coil length should be more than 1.5m(0.5mm i. d.) The length used was 2.5m.

## 2.4 The effect of concentration of nitric acid

In the range of 0.03-0.6 mol/l nitric acid, the value of peak height is kept constant. But the value decreases as the concentration of nitric acid increases from 0.6mol/l. The determination of cadmium in this method was carried on at 0.28 M HNO<sub>3</sub> medium.

## 2.5 The effect of foreign ions

The effect of the main elements<sup>[1]</sup> on the determination of cadmium in the fertilizers was tested. It was found that at least 100 mg K, 100mg Ca, 5 mg Al, 5mg Mg, 70mg P in 50ml solution did not interfere with the determination, but Fe would interfere with the determination if the amount of Fe was more than 0.5mg. In this case, 2ml KI (30%) could mask at least 3mg Fe. It is interesting to note that if KI was not added, 8% Fe was extracted into MIBK from the aqueous phase, if it was added, only 0.5% was extracted in MIBK. So 2ml KI (30%) was used.

In addition to cadmium, tests were also made with Cu, Fe, Pb, Ni Ag and Zn. Table 1 shows the results of the determination of 8 elements with the proposed method. The increase of sensitivity is from 11 to 23 times. All the 8 elements have the optimum pH ranges at pH3—pH4. They might interfere with each other if the elements are determined at this pH range; Pb has the widest optimum pH range. Cd has the optimum pH range at acidic medium. If cadmium is determined in an acidic medium, there will be less interference. So the determination of cadmium in this method was carried on in nitic acid medium.

Table 1 Results of determination of 8 elements with the proposed method

Elements	Concentration (ppm)	Optimum pH ranges	Absorbance	Times of increase in sensitivity*
Cd	0.05	pH3.5—0.7M HNO <sub>3</sub>	0.40	23
Cu	0.20	3—5	0.42	17
Fe	1.0	3.5—5.5	0.78	15
Co	0.25	2—6	0.27	14
Pb	1.0	pH6—0.7M HNO <sub>3</sub>	0.52	13
Ni	0.20	3—5	0.23	13
Ag	0.20	3—4	0.28	12
Zn	0.050	2—5.5	0.36	11

\* Comparison of the results obtained by the proposed method with the data of 'Analytical method for flame spectroscopy' by Varian Techtro Pty. Ltd, Springvale Australia.

### 3 Determination of cadmium in fertilizers

#### 3.1 Sample preparations

Treat a sample (1.000g) of fertilizer in a covered beaker for 30 minutes with a gently boiling mixture of 10ml nitric acid (1:1) and 2ml hydrochloride acid (1:1). Transfer the solution to a 100ml volumetric flask, add water to the volume. Transfer 10ml the solution from the 100ml volumetric flask to a 50ml volumetric flask, add 1ml nitric acid (1:1) and some water, then add

2ml of KI (30%) and dilute to the mark with water.

#### 3.2 Calibration curves

Transfer aliquote of the appropriate standard solutions of cadmium to 50ml volumetric flask, and 2ml nitric acid (1:1) and some water, then add 2ml of KI (30%) and dilute to the mark with water. Run the solution into the proposed system and make the calibration curves (shown in Fig. 2).

#### 3.3 Analysis of fertilizers

Run the sample solutions into the proposed system and find the content of cadmium according

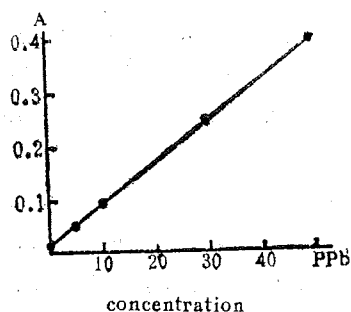


Fig. 2 Calibration curves for cadmium with the proposed method

There was a linear range from 0 to 50 ppb cadmium, but the blank has a litter absorbance. The limit of detection for Cd was 1 ppb.

to the calibration curves (shown in Table 2).

Table 2 Cadmium content of the samples

Samples	Cd content	(mg/kg)*
Gödselmedel NPK 20—5—9	0.0±0.1	(4)
Pebble—räfosfat	6.2±0.2	(3)
Khouribga—räfosfat (A)	10.0±0.3	(3)
Khouribga—räfosfat (B)	10.3±0.2	(12)

\* Mean± standard deviations of single value with no. of determinations in parentheses.

The reproducibility of the method was tested by treating 12 samples of 'Khouribga—räfosfat (B)'. The relative standard deviation was 1.9%.

Table 3 shows the recovery of cadmium of the method.

Table 3. Recovery of cadmium

Samles	Pebble—räfosfat*				Khouribga—räfosfat(A)**	
	0.25	0.50	1.00	2.00	5.0	10.0
Added(μg)	0.25	0.50	1.00	2.00	5.0	10.0
Recovery(%)	88	98	98	97	98	97

\* 10 ml (0.1000g) of the sample containing 0.62μg cadmium.

\*\* 1.000 g of the solid sample containing 10.0μg cadmium.

The recoveries of the samples were from 97 to 98%, except the one of 'Pebble—räfosfat' that was added 0.25μg cadmium. The recovery was only 88%, because the final determination concentration of added cadmium was 5 ppb that was near the detection limit.

The method recommended here was [run in acidic medium and had high sensitivity and selectivity. It should be suitable for other sample types as water and food.

#### References

- [1] Dellien I. and Persson L., Anal. Chim. Acta, 160(1984), 217—225.
- [2] Nord L. and Karlberg B., Anal. Chim. Acta, 125(1981), 199—202.
- [3] Nord L. and Karlberg B., Anal. Chim. Acta, 145(1981), 151—158

# APDC—MIBK 萃取流动注射—原子吸收法 测定肥料中微量镉

赵化章

(中国科学技术大学)

Lars-Göran Danielsson

Folke Ingman

(瑞典皇家工学院)

## 摘 要

APDC 和 MIBK 混合液, 经短的分隔后与含有镉的试液混合, 经过反应管进行络合萃取反应, 再通过一个相分离器, 将含有镉的有机相导入原子吸收进行测定。文中对一些反应参数如流动速度, 反应管长度, 溶液酸度以及与肥料有关的外来离子影响及其消除干扰的方法进行了试验。

本法能以每小时 24 个试样的速度测量, 可含有 1—50ppb 镉的溶液, 其灵敏度与原子吸收直接吸入法相比可增大至 23 倍。本法用于测定几个肥料样品, 回收率为 98% 左右, 相对标准偏差为 1.9%。

用本法的流程图测定 Cu, Fe, Co, Pb, Ni, Ag 和 Zn 等七个元素最佳酸度条件及灵敏度的结果有参考价值。

**关键词:** 原子吸收, 镉, 萃取, 流动注射分析, 吡咯烷二硫代氨基甲酸铵。



# 单室火灾中浮力修正的雷诺应力模型

张 辉 范维澄

(工程热物理系)

## 摘 要

本文用场模化法研究了浮升流在室内的运动规律。推导了有浮力修正的雷诺应力方程,结合相匹配的数值方法,编制了专门的计算机程序,求解了单个房间,单个热源,火灾烟气发生、发展各时刻的温度场和速度场,并用绘图软件处理。验证了烟气运动的几个典型现象,并与用普通雷诺应力模型的求解做了比较,认为推导的浮力修正雷诺应力模型能给出更为符合实际的结果。

**关键词:** 流模型, 浮力。

## 1 引言

湍流模型是研究湍流问题的一种工程方法,应用最广的是湍流粘性系数模型,已取得了相当的成功。但这类模型以湍流粘性系数概念为基础,认为雷诺应力与均流应变成正比,且各向同性,因而不能很好地处理各向异性较强的湍流,雷诺应力模型是新近提出的一种湍流模型,它抛弃了湍流粘性系数的概念,直接建立模化以雷诺应力为因变量的方程,更能体现湍流运输的本质,因而具有更广泛的适用性,一般认为,在复杂剪切流及其有附加力场影响湍流结构的流动中,雷诺应力模型是一种很有希望的模型,室内火灾烟气运动正是属于这一类湍流流动,其中,重力场是起决定作用的因素,因而有必要在火灾模拟中运用雷诺应力模型进行研究,同时由于数值方法在数值模拟中,也起着相当重要的作用,采用粗糙的数值方法引起的数值扩散误差往往会抵消改进模型带来的好处,因而为与雷诺应力模型相匹配,在计算中,采用乘方定律格式(PLDS)和二次上风差分格式(QUICK)。

场模拟是八十年代出现的一种先进的描述烟气运动的模化方法,发展相当迅速,本文按照场模化的学术思想,编制了专用计算程序,在程序中引入了多种湍流模型,包括:考虑浮力修正的 $K-\epsilon$ 模型、雷诺应力模型、及结合烟气运动这一具体问题推导出的考虑浮力修正的雷诺应力模型。

应用此程序,本文用有浮力修正的雷诺应力模型,初步地求解了单个房间、单个热源,

火灾烟气运动发生、发展各个时刻的温度场和速度场，并用绘图软件对结果进行了处理，获得了直观的图象，验证了烟气运动的几个典型现象。本文还用普通雷诺应力模型对同一问题进行了计算，并比较了结果，认为有浮力修正的模型更为合理。计算结果表明：以化学流体力学方程组为基础建立起来的场模化法，是合理和有效的，场模化的进一步研究将对建筑火灾研究起重要的作用。

## 2 理论模型和数值方法

### 2.1 数学物理模型

室内火灾烟气运动是一个三维、非定常、气相多组份的湍流流动和传热传质过程，牵涉到的因素相当多。这是个十分复杂的问题，做为初步的探讨，本文考虑一简化了的情形，见图1。代表一圆柱状房子，半径为 $R$ 、高度 $H$ ，在中心有一热源，侧壁为一堵墙，厚度为 $d$ 。这就构成了一个二维、非定常、湍流流动问题，其运动规律受质量守恒、牛顿第二定律、热力学第一定律控制。这些定律的数学表达式构成了化学流体力学的基本方程组。为了使方程封闭，我们必须构造湍流模型，下面我们写出有浮力修正雷诺应力模型的方程，对于有浮力修正 $K-\epsilon$ 模型可见参考文献[6]。

连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0$$

动量方程

$$\rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u_i u_j} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + (\rho - \rho_0) g_i$$

能量方程

$$C_p \rho \left( \frac{\partial T}{\partial t} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - C_p \rho \overline{u_j T'} \right) + S_n$$

$\overline{u_i u_j}$  方程

$$\rho \left( \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( C_\mu \frac{\rho K}{\epsilon} \overline{u_i u_j} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} + \mu \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} \right) + P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} + \epsilon_{ij}$$

其中

$$\epsilon_{ij} = -\frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \epsilon$$

$$P_{ij} = -\rho \left( \overline{u_i u_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \overline{u_j u_i} \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$

$$G_{ij} = -\rho \beta (\overline{u_j T'} g_i + \overline{u_i T'} g_j)$$

$$\phi_{ij} = \phi_{ij1} + \phi_{ij2} + \phi_{ij3} + \phi_{ij4}$$

$$\phi_{ij1} = -C_1 \frac{\rho \epsilon}{K} \left( \overline{u_i u_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} K \right)$$

$$\phi_{i12} = -C_2 \left( P_{i1} - \frac{2}{3} \delta_{i1} P \right)$$

$$\phi_{i13} = -C_3 \left( G_{i1} - \frac{2}{3} \delta_{i1} G \right)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i1\omega} = & \left[ C_1' \frac{\rho \epsilon}{K} \left( \overline{u_\kappa u_m n_\kappa n_m} \delta_{i1} - \frac{3}{2} \overline{u_\kappa u_i n_\kappa n_i} - \frac{3}{2} \overline{u_\kappa u_i n_\kappa n_i} \right) \right. \\ & \left. + C_2' \left( \phi_{\kappa m 2} n_\kappa n_m \delta_{i1} - \frac{3}{2} \phi_{i \kappa 2} n_\kappa n_i - \frac{3}{2} \phi_{\kappa i 2} n_\kappa n_i \right) \right] \frac{K^{3/2}}{C_1' \epsilon X_n} \end{aligned}$$

式中:  $n_i$  是壁面的单位法向量,  $X_n$  是到壁面的距离。

$\overline{u_i T'}$  方程:

$$\rho \left( \frac{\partial \overline{u_i T'}}{\partial t} + U_i \frac{\partial \overline{u_i T'}}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_\kappa} \left( C_{3T} \overline{u_\kappa u_i} \frac{\rho K}{\epsilon} \frac{\partial \overline{u_i T'}}{\partial x_i} \right) + P_{i\tau 1} + P_{i\tau 2} + G_{i\tau} + \phi_{i\tau}$$

其中:

$$P_{i\tau 1} = -\overline{\rho u_i u_\kappa} \frac{\partial T}{\partial x_\kappa}$$

$$P_{i\tau 2} = -\overline{\rho u_\kappa T'} \frac{\partial U_i}{\partial x_\kappa}$$

$$G_{i\tau} = -\rho \beta \overline{T'^2} g_i$$

$$\phi_{i\tau} = \phi_{i\tau 1} + \phi_{i\tau 2} + \phi_{i\tau 3}$$

$$\phi_{i\tau 1} = -C_{1T} \frac{\rho \epsilon}{K} \overline{u_i T'}$$

$$\phi_{i\tau 2} = -C_{2T} P_{i\tau 2}$$

$$\phi_{i\tau 3} = -C_{3T} G_{i\tau}$$

$\overline{T'^2}$  方程:

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial t} + U_i \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial x_i} \right) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left( C_c \frac{\rho K}{\epsilon} \overline{u_i u_\kappa} \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial x_\kappa} + \Gamma \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial x_i} \right) - 2 \overline{\rho u_i T'} \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ & - \frac{1}{k} \frac{\rho \epsilon}{K} \overline{T'^2} \end{aligned}$$

$\epsilon$  方程:

$$\rho \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( C_\epsilon \frac{\rho \epsilon}{\epsilon} \overline{u_i u_i} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{K} (P + G) (1 + C_{\epsilon 3} R_f) - C_{\epsilon 2} \frac{\rho \epsilon^2}{K}$$

式中

$$R_f = \begin{cases} -\frac{G}{P+G} & \text{水平剪切层} \\ 0 & \text{垂直剪切层} \end{cases}$$

在上述方程中

$$K = \frac{1}{2} \overline{u_i u_i}, \quad P = \frac{1}{2} P_{ii}, \quad G = \frac{1}{2} G_{ii}, \quad \epsilon = \frac{1}{2} \epsilon_{ii}$$

方程中共有 17 个常数，取值如下：

$C_s$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_2'$	$C_l$	$C_{sr}$	$C_{lr}$
0.22	1.8	0.6	0.5	0.5	0.3	2.5	0.11	3.0
$C_{2r}$	$C_{3r}$	$C_G$	$R$	$C_\epsilon$	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	
0.5	0.33	0.22	0.8	0.18	1.44	1.92	0.8	

在烟气传播过程中，温度场变化导致密度场的变化，其间的关联可用理想气体状态方程表示

$$\rho = p/RT \quad (R \text{ 为气体常数})$$

对应于此式，在上面的偏微分方程中，体膨胀系数

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{T}$$

综合上述，对于雷诺应力湍流模型共有 12 个偏微分方程相耦合：一个连续性方程、两个动量方程、一个能量方程、四个独立的雷诺应力方程 ( $\overline{u^2}$ 、 $\overline{v^2}$ 、 $\overline{w^2}$ 、 $\overline{uv}$ )、两个  $\overline{u_i T'}$  方程、一个  $T'^2$  方程、一个耗散率  $\epsilon$  方程。这 12 个偏微分方程联立再加上一些辅助公式（包括气态方程等）便构成了方程组的数学封闭。只要给出定解条件就可形成一个完整的数学问题。这种复杂的、以非线性和耦合为特点的偏微分方程组，在目前只能用数值方法求解。

在方程中，值得说明的是浮力的影响，它是自然对流的驱动力，既影响均流场也影响各脉动场，浮力对均流场的影响体现在垂直方向的动量方程上，动量方程中的压力  $p$  是由绝对压力  $P$  迭加上环境空气的重力势能构成的相对压力。

$$p = P + \rho g x \quad (\text{本算例轴向为 } x \text{ 向})$$

它在环境空气中处处相等，这样的处理使得均流动量方程中出现了这样一项  $(\rho_0 - \rho)g$ ，它体现了浮力的作用。

## 2.2 定解条件

### 初始条件

假定  $t = 0$  时，房间里空气静止、温度各处均匀为  $0^\circ\text{C}$ 。

### 边界条件

这是个椭圆型问题，每个边界都必须给出边界条件。

对称面：

$$V = 0, \quad \overline{uv} = 0, \quad \overline{vT'} = 0$$

别的变量均认为梯度为 0。

壁面

$$U = V = 0, \quad \epsilon = 10^{-7}, \quad uv = 0$$
$$\overline{u^2} = \overline{v^2} = \overline{w^2} = 0, \quad \overline{uT'} = \overline{vT'} = \overline{T'^2} = 0$$

对于温度, 假定上下底为绝热, 则有

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

对侧壁, 我们认为有导热损失, 同时假定侧壁外边界保持  $0^\circ\text{C}$ 。则由导热公式  $q = KA \frac{\partial T}{\partial y}$ 。

通过源项, 将影响带入方程中。

### 2.3 数值方法

在本文计算中, 采用了乘方定律和二次上风差分格式, 关于此部分的说明可见参考文献。<sup>[11]</sup>

### 3 结果与讨论

本文计算所考虑房间的大小: 高  $H = 3\text{m}$ , 半径  $R = 4\text{m}$ , 墙厚  $d = 0.2\text{m}$ , 导热系数为  $0.7\text{W/m}\cdot^\circ\text{C}$  热源处于房间中心, 网格采用指数规律的非均匀划分, 数目为  $15 \times 15$ 。考虑数值扩散及程序收敛和稳定性两方面的要求, 在计算过程中, 对动量和能量方程采用二次上风差分 (QUICK) 格式, 对别的方程均采用乘方定律 (PLDS) 格式。求解采用 SIMPLE 算法。整个计算在 Super-XT 机器上完成。

本文分别用浮力修正和普通雷诺应力模型对两种热源进行了计算求解。得到了烟气传播随时间变化的规律。并对所得结果进行了对比。

我们考虑两种热源。

- 半径  $r = 0.1\text{m}$ , 壁温  $T_i = 1000^\circ\text{C}$ , 这是平板自然对流问题。
- 热源大小为半径  $r_i = 0.1\text{m}$ , 高  $h = 0.333\text{m}$ , 热源释热率为  $20\text{kW}$ , 模拟了办公室废纸篓的燃烧。

用两种雷诺应力模型求解该两问题, 得到的烟气发展规律大体一致。

首先, 烟气刚发生时, 由于热源的放热, 使得周围空气变热, 密度变为不均匀, 受向上浮力的作用, 热空气上升, 又卷吸入周围的冷空气, 形成了羽流, 羽流随时间渐渐发展, 达到上壁面时, 受到其滞止作用形成沿顶篷向外传播的天篷射流, 随时间的更一步发展, 速度值渐变大, 热气流向外扩散, 弥漫整个顶篷, 形成了热气层, 热气层在侧壁, 受到压力作用会沿侧壁下转弯传播, 这时由于运动方向逆着浮力的方向, 受到了浮力的阻止, 因而下降到某一深度后, 即改向沿水平偏上运动, 与原形成的顶部热气层汇合, 逐渐加大热气层的厚度, 这就是反浮力射流和水平方向迴流的现象, 其垂直穿透深度与热源强度和侧壁条件有极大关系。

两种热源的结果也是略有区别的, 图 2 和图 3 是热源当  $t = 10\text{min}$  时的结果, 图 4 和图 5 是热源 2 当  $t = 22\text{s}$  时的结果。可以看到, 对于平板自然对流, 发展相当平缓, 热空气的反浮力射流等现象均不明显, 对于热源 2, 则清晰可见烟气运动的各典型过程, 由速度图可见, 除反浮力射流而形成的主要迴流区外, 在顶篷和墙壁相交处存在第二个迴流区, 使得天篷射流发生分离, 这个结果与实验观察相一致。这就是一种所谓的二次流, 曾对该问题用

$K-\epsilon$ 模型和有浮力修正的 $K-\epsilon$ 模型计算,均没能求出该现象<sup>[19]</sup>。显示了DSM模型能获得更符合实际的结果<sup>[1,2]</sup>。

图6和图7,为对热源2用无浮力修正的普通雷诺应力模型计算结果。也为22s,条件均同图4和图5。比较各图,很容易看到两者之间的差别。有浮力修正的模型,获得的热气层更密集于顶部,因而有更明显的烟气分层现象。

图8为两模型的定量比较,为 $R=2.5\text{m}$ 剖面上的温度-高度图,实线为有浮力修正的雷诺应力模型之结果,点划线为普通DSM结果。

鉴于一方面缺乏准确的实验测量数据,另一方面受到计算机能力限制,网格不够精细,因此,倘不具备把计算和实验进行严格定量对比的条件,然而,用两种DSM模型求得的结果在定性上都是正确的。

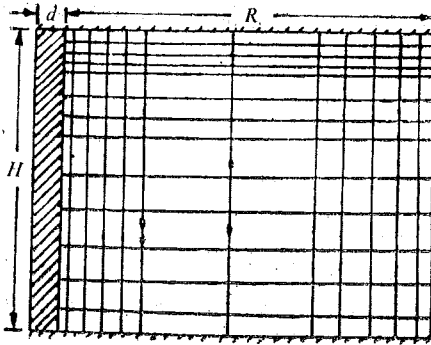


图1 几何图形

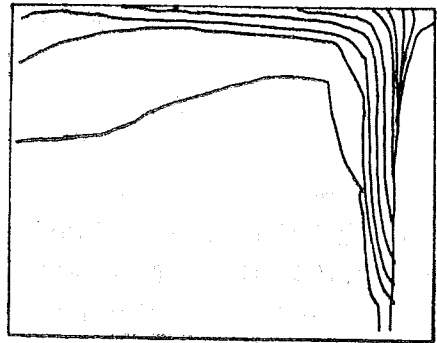


图2 热源1的等温线图

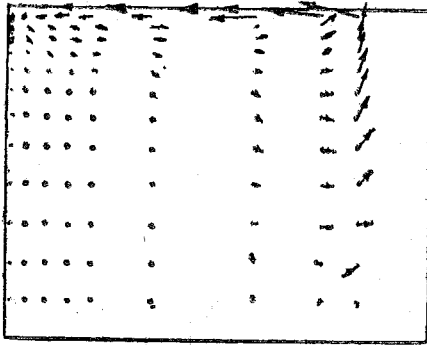


图3 热源1的速度矢量图

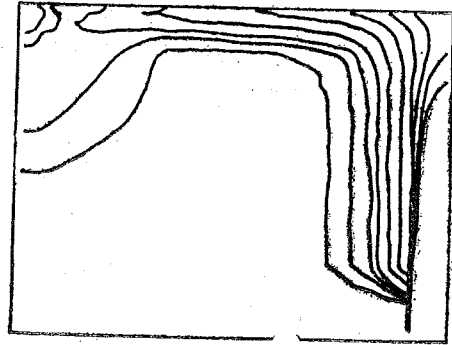


图4 热源2的等温线图

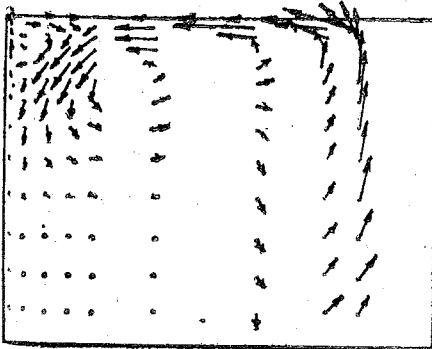


图5 热源2的速度矢量图

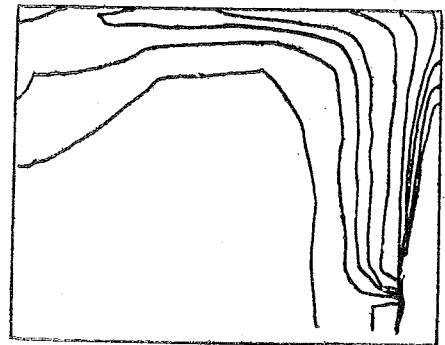


图6 普通DSM的等温线图

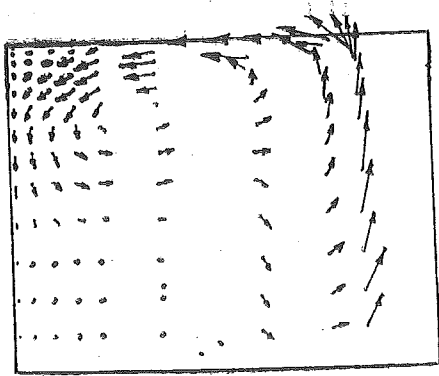


图 7 普通DSM的速度矢量图

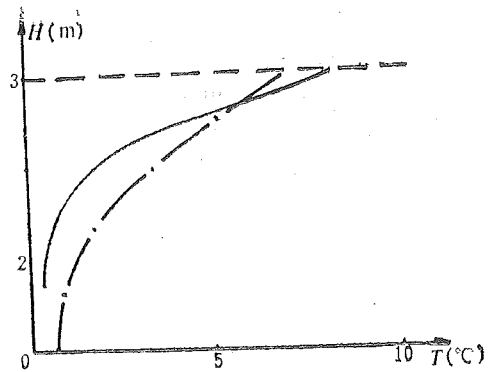


图 8 两种模型比较

#### 4 结论

本文阐述了雷诺应力模型的基本思想,结合火灾烟气运动这一具体问题,推导出了二维、非定常有浮力修正的雷诺应力模型方程,并结合相匹配的数值方法,最终编制了专用的火灾场模化计算机程序,用该程序模拟了单室、单热源,火灾烟气传播随时间的变化,得到了符合实际的结果,表明了以该模型建立起来的场模化法解决火灾问题是合理和有效的,本文同时对同一问题,用普通雷诺应力模型进行求解,并比较了他们之间的结果,从分析上看,有浮力修正的雷诺应力模型更为合理一些,更进一步的工作有待于实验的进行。

通过对有浮力修正的雷诺应力模型的计算表明,目前对于这类复杂的12个偏微分方程强耦合的联立方程组,用一般PC机亦有能力进行求解,获得了符合实际的结果,为雷诺应力模型走向实用做了一次有益的探索。

#### 参 考 文 献

- [1] Launder B E, Low Reynolds Number Turbulence Near Walls, UMIST, TED 86 1.
- [2] Launder B E, Second Moment Closure, Methodology and Practice, UMIST, TED 82 1.
- [3] Marbatos N C Pericleous K A, An Investigation of Three-Dimensional Fires in Enclosures, Private Communication, 1985.
- [4] Zukoski E E, Fluid Dynamic Aspects of Room Fires, 1st International Symposium of Fire Safty Science.
- [5] Emmous H W, The Needed Fire Science, 1st International Symposium of Fire Safty Science.
- [6] Cooper L Y, A Mathematical at Model for Estimating Available Safe Egress Time in Fires, *Fire and Material*, 6 (1982), 135.
- [7] Zukoski E E, Kubota T, A computer Model for Fluid Dynamic Aspects of a Transient Fire in a Two-Room Structure, Doc. NBS Grant No. 5 0001, (1978), Cal. Inst. Tech., Pasadena, CA.
- [8] Emmous H W, Experiments with a Fire Math Model, CIB W14 Chengdu Meeting, (1988).

- [9] 张辉, 范维澄, 火灾问题中的湍流模型和数值方法的研究, 中国科技大学学报, 1988.  
(Zhang, H. & Fan, W. C., The Study of the Turbulent Model and Numerical Scheme in Fires)
- [10] 范维澄, 张辉, 郑丽丽, 受浮力影响的湍流模型, 工程热物理年会论文集, 1988.
- [11] Zhang H, Fan W C, Field Modeling of Turbulence of Smoke in Fires, CIB W14 Chengdu Meeting, 1988.
- [12] 霍然, 范维澄, 通风口位置对室内火灾的影响, 消防协会年会, 1988.

## RSM With Modifications of Buoyancy

### Applied to a Room Fire

Zhang Hui      Fan Weicheng

(Dept. of Engineering Thermophysics)

#### Abstract

Turbulent buoyant flows in a room are examined with the methods of field modelling. Equations of Reynolds Stress Model (RSM) with influence of buoyancy taken into account are derived and incorporated into a computer program together with compatible numerical methods.

Predictions of distributions of velocity and temperature are obtained and presented with Graffics, which simulates well some typical phenomena of smoke movement. Therefore, the RSM is recommended for predictions of buoyant flows.

**Key words:** prediction, turbulence model, buoyancy.



# 有机液体导热系数的新推算式

## ——通用相关式和醇、烷、芳香族的具体推算式

陈则韶 葛新石

(工程热物理系)

### 摘 要

本研究用相关法给出了有机液体导热系数的通用相关式和醇、烷、芳香族的液体导热系数的具体推算式,经比对,22种液体的计算值与TPRC及其他权威参考文献的推荐值之间的平均偏差约为-1.5%,本推算式具有相关参数少和精度高的优点。

**关键词:** 有机液体, 导热系数, 推算式。

### 1 前言

有机液体的导热系数不仅在它的生产和应用过程中,而且在混合液体导热系数的推算式中<sup>[1]</sup>都是一个重要参数。目前,报道的已被测定的液体导热系数的数目远比液体所拥有的种类少得多,偏离常温区的数据就更少了。在大温度范围内各种液体的导热系数都用实验法测定,这是十分困难的工作,因此推算有机液体导热系数的研究很有必要。一些推算式已被有关文献[2-7]所介绍。这些计算式的建立是分别使用了不同方法:经验观察,因次分析,溶液理论,对应状态原理<sup>[5]</sup>,它们实用的算式,归根结底都是一种相关式。在已有推算式之中存在许多不足之处,或精度不高,或式中参数难以获得,或使用范围狭窄。精度能在2%之内者,只有TPRC的单一液体的拟合式和文献[6]的烷类相关式

$$\lambda = An^2 + Bn + C - [D(1/n)^2 + E(1/n) + F]T \quad (W \cdot m^{-1}K^{-1}) \quad (1)$$

式中, $n$ —分子所含的碳原子数 ( $7 \leq n \leq 16$ ),  $A, B, C, D, E, F$  为常数,其值参看[6]。该式算值与精度为 $\pm 1\%$ 的实验值之间的偏差为 $\pm 1\%$ 左右。因此寻求适用范围广、简便精确的有机液体导热系数的推算式仍然十分重要。

### 2 有机液体导热系数的新相关式

由于液体是凝聚态,相应的凝聚态理论还不如统计物理和固体物理成熟,液体导热系数

的实用推算式仍然是相关式。获得好的相关式有二个要点：①选择合适的相关参数；②用较好的方法建立合理的通用相关式。

## 2.1 相关参数

凡能描述液体物性的物理量都与液体导热系数有关，因而它们都有资格作为液体导热系数的相关参数，但对导热系数有决定影响或有强烈影响的是液体分子的组成、构造和它的温度。许多物理量也都与分子的组成和构造有关，但有些物理量是只唯一与分子的组成和构造有关，这些物理量可视为分子组成和构造的等价物理量，例如液体的分子量  $M$ ，熔点  $T_m$ ，三相点  $T_c$ ，沸点  $T_b$ 。除与分子的组成、构造有关之外，还受到压力影响，而压力对导热系数也有影响。因此我们把  $M$ 、 $T_m$ 、 $T_b$ 、 $T_c$  及温度  $T$  选作为液体导热系数的相关参数。这些参数还具有易于获得和精度高的优点。

## 2.2 通用相关式

### 2.2.1 基准温度 $T_b$

液体导热系数与温度的关系在摄氏温标中被表示为

$$\lambda = at + b$$

式中  $t$  为摄氏度， $^{\circ}\text{C}$ ，基准温度为冰点。在绝对温标中被表示为

$$\lambda = AT + B$$

式中  $T$  为绝对温度，K，基准温度为绝对零度。由于所取的温度基准不合适以及温标不当，致使至今液体的导热系数  $\lambda$  与温度的关系仍然停留在依赖实验数据拟合并只适用于单一液体的水平上，较为普遍的规律难以揭示。

作者认为：因为液体只存在于它自身的熔点至沸点之间的温度范围内，所以取该液体的沸点  $T_b$  或熔点  $T_m$ ，比取冰点或绝对零度为基准温度，能更有助于我们揭示液体导热系数与温度之间的关系。在本研究中，取沸点  $T_b$  为基准温度和用  $(T_b - T)/T_b$  表示无量纲液体温度，于是液体导热系数与温度的关系式可表示为

$$\lambda = A(T_b - T)/T_b + \lambda_b \quad (2)$$

式中， $A$  液体导热系数的相对温度系数； $\lambda_b$  在基准温度时的名义导热系数，即在沸点时的名义导热系数，简记作沸点名义导热系数。

### 2.2.2 沸点名义导热系数 $\lambda_b$

$\lambda_b$  与温度  $T$  无关，只取决于液体分子的组成和构造，故可以被表示为相关参数  $T_m$ 、 $T_b$ 、 $T_c$  和  $M$  的函数。据物理定性分析和对实验数据的观察可知， $\lambda_b$  是随  $T_m$ 、 $T_b$ 、 $T_c$  的升高而增加，随  $M$  的增大而减少。考虑到三个参数  $T_m$ 、 $T_b$  和  $T_c$  对  $\lambda_b$  有均等影响，并与  $T$  有同样的量纲，于是设定  $\lambda_b$  正比于  $(T_m + T_b + T_c)$ ，并设定  $\lambda_b$  反比于  $M_m$ 。应用对应状态原理，选取有机液体中最小分子量和结构最为简单的甲烷为参考液体，并令无量纲分子特性温度  $\hat{T}$  和无量纲分子量  $\hat{M}$  为

$$\hat{T} = (T_m + T_b + T_c) / (T_{m_0} + T_{b_0} + T_{c_0})$$

$$\hat{M} = M / M_0$$

式中，带脚标“ $0$ ”者为甲烷的参数。

于是,  $\lambda_b$  可表示为

$$\lambda_b = B\dot{T}/\dot{M}^m, \quad B = f(\dot{T}, \dot{M}) \quad (3)$$

式(3)把  $\lambda_b$  与  $\dot{T}$  和  $\dot{M}$  的关系表示为两种函数的乘积形式, 其中  $\dot{T}/\dot{M}^m$  是据分析与观察获得的, 而  $B$  是不明项, 但仍然是  $\dot{T}$  与  $\dot{M}$  的函数, 且是  $\lambda_b$  的弱函数, 其重要性不如  $(\dot{T}/\dot{M}^m)$  项, 暂且也可把  $B$  视作常数。  $m$  一待定常数。

### 2.2.3 通用相关式

把式(3)代入式(2)得

$$\lambda = A(T_b - T)/T_b + B\dot{T}/\dot{M}^m \quad (4)$$

式(4)即是有机液体导热系数的新的通用相关式。评价相关式的优劣标准是看它能否应用在较大范围, 并取得较高精度。以下我们选取实验数据较为丰富的醇、烷和芳香族为例说明通用相关式的应用及具体推算式的确立。

### 3 醇、烷和芳香族的 $\lambda$ 的推算式

式(4)中的  $A$  值可由下式用一些实验值确定,

$$A = -T_b \frac{d\lambda}{dT} \quad (5)$$

一些醇类和碳氢类的由实验值确定的  $A$  的平均值  $A_m$  列于表 2, 它们接近于  $1 (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 。当  $\lambda$  也取  $(\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$  为单位, 并取  $A = 1 (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$  时, 偏差  $|A_m - 1| < |A_{\max} - A_{\min}|$ , 即所选取  $A$  的精度在实验误差范围之内。例如, 对于葵烷 ( $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ ), 其  $|A_m - 1| = 0.27$ , 而实验值确定的  $|A_{\max} - A_{\min}| = 0.40$ ,  $A_{\max} = 1.46$ , 由 TPRC<sup>[3]</sup> 获得, 而  $A_{\min} = 1.06$ , 由式(1), 即文献[6]获得。

在  $A$  被取定之后, 可以暂且把  $B$  视为常数, 由实验值确定  $m$ 。当  $A = 1 (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ ,  $B = 1 (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ ,  $m = 0.55$ 。

在此基础上, 可以利用  $\lambda$  的测定值  $\lambda_{exp}$ , 把  $B = f(\dot{T}, \dot{M})$  的关系表示于图上, 并选择一些近似函数式进行试算和比较。在醇、烷、芳香族系统可将  $B$  表示为如下的  $\dot{T}$  和  $\dot{M}$  的相关式

$$B = [1 + 0.7(\dot{T}^2 \dot{M}^{1/2})^{-1}] \quad (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}) \quad (6)$$

式(6)的右边括号内的第二项将随着  $\dot{T}^2 \dot{M}^{1/2}$  的增大而迅速收敛于零。当  $\dot{T}^2 \dot{M}^{1/2} \geq 1.4$  时,  $|B - 1| \leq 0.01$ 。将式(6)及  $A$  和  $m$  的具体值代入式(4)得到醇、烷和芳香族共用的导热系数的一般推算式为

$$\lambda = \left(1 - \frac{T}{T_b}\right) + [1 + 0.7(\dot{T}^2 \dot{M}^{1/2})^{-1}] \frac{\dot{T}}{M^{0.55}} \quad (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}) \quad (7)$$

当烷族的分子中碳原子数大于 6, 醇类的碳原子数大于 3, 即  $B \approx 1 (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$  时, 因为

$$(T_{m_0} + T_{b_0} + T_{c_0})/M_0^{0.55} = 85\text{k}$$

所以可以获得简便计算式为

$$\lambda = \left(1 - \frac{T}{T_b}\right) + \frac{(T_{m_0} + T_{b_0} + T_{c_0})}{85M^{0.55}} \quad (\text{mW} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}) \quad (8)$$

#### 4 精度

式(7)和式(8)的精度可以通过计算值和实验值的比较得到说明。取TPRC<sup>[1]</sup>, 方程(1)<sup>[5]</sup>的推荐值和其他一些文献[5]、[8]中的数据为比较参考数据。为了使比较结果有最大范围的适用性, 又使比较结果明了, 每种液体都只取温度不同的两点数据, 在已找到的实验数据中, 一点在低温处尽可能接近熔点, 一点在高温处尽可能接近于沸点。这样取点, 这些偏差将是最大。烷、醇和芳香族液体中22种液体的 $M$ 、 $T_m$ 、 $T_b$ 和 $T_c$ 值分列于表1, 它们的 $A_m$ 、 $B$ 、 $\lambda_0$ 和对应于温度 $T$ 的导热系数的计算值 $\lambda_{cal}$ 、参考值 $\lambda_{exp}$ , 平均偏差

表1 一些有机液体的 $M$ 、 $T_m$ 、 $T_b$ 和 $T_c$ 。

名称	分子量 $M$	熔点 $T_m$ (K)	沸点 $T_b$ (K)	临界点 $T_c$ (K)
甲烷	16.043	90.70	111.63	190.52
乙烷	30.069	90.36	184.60	305.30
丙烷	44.096	85.45	231.10	369.8
丁烷	58.123	113.55	261.50	408.13
戊烷	72.15	143.40	309.20	469.60
己烷	86.18	177.60	341.91	507.40
庚烷	100.20	182.50	371.60	540.2
辛烷	114.23	216.35	398.9	568.8
寅烷	128.25	219.62	422.12	594.6
葵烷	142.27	243.42	446.12	617.6
十四烷	198.37	279.02	525.62	638.8
十六烷	226.43	291.32	560.62	694.0
十七烷	240.45	295.12	576.12	717.0
苯	78.11	278.68	353.5	562.1
甲苯	92.14	178.16	383.8	591.7
甲醇	32.04	175.47	337.8	512.6
乙醇	46.07	159.05	351.7	516.2
正丙醇	60.07	146.95	370.4	536.7
正丁醇	74.12	183.85	390.80	562.9
正戊醇	88.15	194.95	411.40	586.0
正己醇	102.17	225.82	435.80	610.0
正庚醇	116.19	238.82	448.92	633.0

表 2 一些有机液体的  $A_m$ 、 $B$ 、 $\lambda_b$ 、 $\lambda_{ca1}$  及  $\lambda_{exp}$

名 称	$A_m$	$n$	$\lambda_b$	$T$	$\lambda_{ca1}$	$\lambda_{exp}/^*$	$\lambda_{exp}/^*$	$\delta_i\%$
甲烷		2	2	100	2.101	2.140/9		1.8
乙烷	1.26	1.49	1.567	100	2.109	1.08/9		1.5
				160	1.700	1.67/9		
丙烷	1.76	1.24	1.242	180	1.463	1.663/9		-8.5
				220	1.290	1.357/9		
正丁烷	0.83	1.10	1.081	260	1.128	1.186/9		-5.4
				270	1.089	1.156/9		
正戊烷	1.11	1.03	1.063	200	1.416	1.490/1		-5.9
				300	1.092	1.174/1		
正己烷	1.06	1.00	1.046	250	1.315	1.350/1		-2.9
				340	1.052	1.133/1		
正庚烷	0.96	1.00	1.022	250	1.348	1.380/1	1.353/5	-1.0
				370	1.025	1.104/1	1.010/5	
正辛烷	1.10	1.00	1.028	250	1.401	1.460/1	1.393/5	-0.4
				390	1.050	1.060/1	1.022/5	
正寅烷	1.20	1.00	1.007	250	1.415	1.510/1	1.431/5	0.6
				420	1.012	0.990/1	0.980/5	
正葵烷	1.27	1.00	1.006	250	1.446	1.545/1	1.426/5	3.2
				440	1.020	0.923/1	0.970/5	
正十四烷	1.02	1.00	0.925	280	1.392		1.440/5	-2.3
				520	0.936		0.948/5	
正十六烷	0.98	1.00	0.921	300	1.385		1.429/5	-1.3
				560	0.922		0.917/5	
正十七烷	1.06	1.00	0.915	300	1.394		1.440/5	-3.5
				570	0.926			
苯	1.02	1.00	1.281	280	1.488	1.490/1		0.0
				350	1.313	1.313/1	1.315/9	
甲苯	1.05	1.00	1.128	180	1.659	1.650/1		0.5
				360	1.190	1.188/1	1.124/9	
甲醇	1.08	1.05	1.876	260	2.106	2.080/1	2.135/9	0.3
				320	1.927	1.865/1	1.965/9	
乙醇	1.04	1.02	1.505	280	1.709	1.719/1	1.719/9	-0.4
				350	1.510	1.512/1		

表 2 (续)

名称	$A_m$	$n$	$\lambda_b$	$T$	$\lambda_{cal}$	$\lambda_{exp}/^*$	$\lambda^{exp}/^*$	$\bar{\delta}_i\%$
正丙醇	0.60	1.00	1.312	298	1.507	1.497/4		-0.2
				323	1.440	1.456/4		
正丁醇	0.91	1.00	1.256	273	1.557	1.545/7		0.4
				338	1.391	1.393/7		
正戊醇	0.85	1.00	1.193	273	1.529	1.529/7		-0.9
				323	1.408	1.426/7		
正己醇	0.04	1.00	1.170	273	1.544	1.526/7		-0.3
				323	1.429	1.453/7		
正庚醇	0.70	1.00	1.136	273	1.528	1.533/7		-1.8
				338	1.383	1.431/7		

注: 1. 在 $\lambda_{exp}$ /之后的数字1、4、5、7、9等,是该测定值的文献出处。

2.  $A_m, B, b, \lambda_{cal}, \lambda_{exp}$ 的单位都是  $(mW \cdot cm^{-1}K^{-1})$ ,  $T$ 的单位是K。

$\bar{\delta}_i$ 等均被列于表2。表2中的 $\lambda_{cal}$ 与 $\lambda_{exp}$ 还被直观地示于图1。定义每种液体的平均偏差 $\bar{\delta}_i$ 为

$$\bar{\delta}_i = \sum_{i=1}^K \delta_i / K, \quad K=1, 2, \dots \quad (9)$$

$$\delta_i = (\lambda_{cal} - \lambda_{exp}) / \lambda_{exp} \times 100\%$$

式中,  $K$ 为选作一种液体比较用的实验值总数。定义总平均偏差 $\bar{\delta}_n$ 为

$$\bar{\delta}_n = \sum_{j=1}^n \bar{\delta}_j / n, \quad j=1, 2, \dots \quad (10)$$

式中,  $n$ 为参与比较的液体种类的总数。对于22种液体有:  $\bar{\delta}_{22} = -1.37\%$ ; 对于13种烷类有 $\bar{\delta}_{c1} = -2.1\%$ , 对于7种醇类有 $\bar{\delta}_{OH} = -0.41\%$ , 对于2种芳香族类有 $\bar{\delta}_{e2} = 0.25\%$ 。丙烷的偏差 $\bar{\delta}_i = -8.5\%$ 。值得指出的是, 表2的参考值中, 有大量作者的测定值为依据的是: 苯、甲苯、甲醇、乙醇、丙醇、庚烷至葵烷, 甲烷至戊烷的数据极少, 文献中的推荐值有时也仅根据一个作者的测定值而定。本式的

算值与测定值多的推荐值特别吻合。与各别测定值的偏差也在工程使用的允许范围。

## 5 结语

(1) 本文提出的用液体沸点作为基准温度和无量纲化用的温度尺度有助于揭示液体导热系数与温度之间的关系, 用此方法建立的通用相关式不仅使同族, 甚至使不同族液体都可找

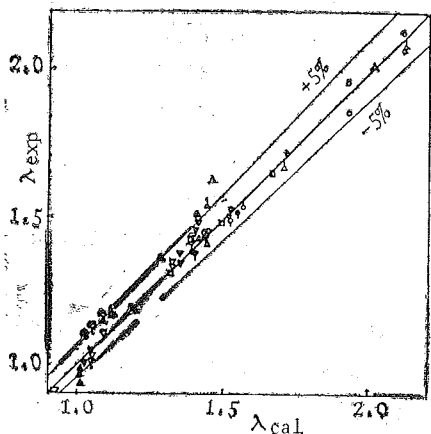


图1 表2中22种液体 $\lambda_{cal}$ 与 $\lambda_{exp}$ 的比较

到共同常数, 因而其相关式可作为推算式。

(2) 本文选择的分子量  $M$ 、熔点  $T_m$ 、沸点  $T_b$ 、三相点  $T_c$ , 已被证明是液体导热系数的良好相关因子, 可以体现液体分子的特征, 还具有易得和精度高的优点, 这些参数也可能作为液体其他物性, 例如比热、蒸发热等的相关因子。

(3) 本文给出的醇、烷、芳香族所适用的液体导热系数的推算式, 具有测定值同等精度, 满足工程需要。

(4) 其他各族的液体导热系数的具体推算式正在进一步研究之中。

### 参 考 文 献

- [1] 陈则韶, 关于潜热蓄热材料的诸热物性的同时测定法及有机混合液体导热系数的推算研究, 日本九州大学博士论文, 1987。
- [2] Touloukian Y S, Liley P E and Sarena S C, Thermal Conductivity, Nonmetallic liquids and Gases, IFI/PLENUM, New York-Washington, 1970。
- [3] 童景山等编著, 流体热物性值计算, 清华大学出版社, 1982。
- [4] Sato I, The Methods of Evaluating the Physical Properties Maru Yoshi, Japan, 1965。
- [5] Okiwara K, Research on Measuring and Predicting the Thermal Conductivities of the Liquid Hydrocarbon and Alcohol, Doctoral the'sis University of Tohoku, Japan, 1985。
- [6] Wada Y, Takano T, Kawaguchi H, Nagasaka Y and Nagashima A, Measurement and correlation of the Thermal Conductivity of Liquid Paraffin Hydrocarbons and Their Mixtures, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers (B), March 1985, No. 463。
- [7] Reid R C, Prausnitz J M and Sherwood T K, The Properties of Gases and Liquids, 3d ed., McGraw-Hill, New York, 1977。
- [8] Jamieson U T, Irving J B and Tudhope J S, Diquid Thermal Conductivity and Data Survey to 1973, Edinburgh HMSO, 1985。
- [9] Fujii M, Fujii T and Takamatsu H, Measurement of Thermal Conductivities of Liquid Mixtures by Using a Small Bead Thermiator, The 1st Asian Thermophysical Properties Conference, 1985。
- [10] Data of Heat Transfer Engineering, Mechanical Engineering Institute of Japan, 1986。

# A New Formula for Predicting the Thermal Conductivity of Organic Liquid

—A common correlation formula and a calculation formula for Alcohol, Alkane and Aromatic

Chen Zeshao    Ge Xinshi

*(Department of Engineering Thermophysics)*

## Abstract

By adopting a correlation method, this research presents a common correlation formula for the thermal conductivity of organic liquid and a new calculation formula for predicting the thermal conductivity of the liquids of alcohol, alkane and aromatic. The accuracy of the formula has been checked with the data recommended by TPRC and other references; the average deviation between the calculated and recommended values is about  $-1.5\%$  for 22 kinds of liquids. The new formula has some merits as fewer parameters and higher accuracy.

**Key words:** organic liquid, thermal conductivity, calculation formula.



# 光波导高灵敏度硫酸亚铁剂量计的研究

刘占军 吴欣

(应用化学系)

## 摘 要

利用光导吸收池来提高  $\text{Fe}^{3+}$  离子浓度的检测灵敏度, 从而降低硫酸亚铁剂量计的量程下限, 扩大其应用范围。实验结果: 标准工作曲线的线性相关系数为 0.99945, 平行样品测试数据的相对标准偏差为 0.6%, 所测吸收剂量的下限降至约 10mGy, 是迄今为止文献中报道的硫酸亚铁剂量计测量下限的最低值。

**关键词:** 光导吸收池, 硫酸亚铁剂量计, 辐射吸收剂量。

## 1 引言

硫酸亚铁剂量计是辐射剂量学中广泛使用的二级标准化学剂量计。通常情况下, 其适合的吸收剂量测量范围是 40~400Gy。为降低其测量下限, 扩大其应用范围, 人们已进行了大量研究工作。其中  $^{59}\text{Fe}$  示踪法效果较好, 可使其测量下限降至 0.1~0.2Gy<sup>[1]</sup>。但该方法使用放射性物质, 处理较为繁琐, 一般情况下不宜采用。由 KSCN 与  $\text{Fe}^{3+}$  生成络合物, 然后用含氧有机溶剂萃取出来进行分光光度分析, 可以提高正铁离子分光光度分析的灵敏度和增加络合物颜色的稳定性。用于萃取的试剂有甲基异丁基甲酮(MIBK)、磷酸三丁酯、高级醇类和醚类等, 而用 MIBK 较为方便和特效。硫氰酸铁络合物的 MIBK 溶液的摩尔吸光系数为  $2.4 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ,  $\lambda_{\text{max}} = 495\text{nm}$ 。MIBK 萃取液中  $\text{Fe}^{3+}$  的测定较水溶液中  $\text{Fe}^{3+}$  的测定的灵敏度高一个数量级<sup>[2,3]</sup>。

光波导(OWG)剂量计的研究开始于八十年代初, 现已取得较大进展。1981年美国的 Kronenberg 和 McLaughlin 等研制出了 5cm 长的 OWG 辐射变色染料剂量计, 1983年该剂量计进入了实用化阶段<sup>[4,5]</sup>。1985年, Radak 和 McLaughlin 等又报道了 100cm 长的 OWG 辐射变色染料剂量计, 其吸收剂量测量下限低至 10mGy<sup>[6]</sup>。但该体系对紫外光敏感, 使用不大方便。

本研究的目的是把萃取方法和光波导技术用于硫酸亚铁剂量计体系, 进一步提高测量灵

敏度，降低测量下限，扩大应用范围。选用折射率 1.34 的含氟塑料管作光导吸收池，所用萃取剂为 MIBK，其折射率为  $n_D^{20} = 1.396$ ，二者配合，能满足光波导全反射条件。用 1 米长的光导吸收池，所测辐射吸收剂量的下限达 10mGy，是迄今对该剂量体系文献报道的最好值。实验结果表明，该剂量体系、测试装置和测试方法是可行的，可望在辐射生物学、放射医学中的吸收剂量测量及特殊情况下（如核爆炸及放射性事故现场周围）的放射性环境监测发挥作用。

## 2 实验部分

### 2.1 测试架、光导吸收池的结构及使用方法

测试架由电木制成，其结构如图 1 所示。

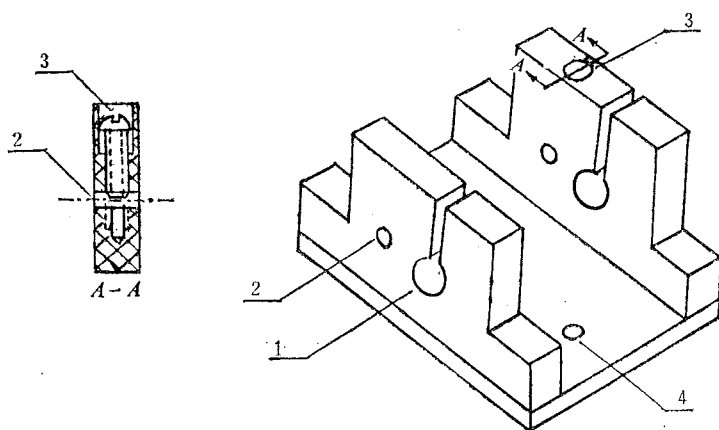


图 1 测试架示意图

1 光导吸收池接头安装孔，2 参比光孔，3 参比光孔径调节螺钉，4 定位孔

定位孔 4（共三个）和所用分光光度计样品室内比色皿底板上的定位销紧密配合，以保证测试架每次放入样品室时其相对位置不变。参比光孔通过调节螺钉调节其进光量，以此来补偿光导吸收池中因光散射等所引起的表观吸收，使样品吸光度读数处于刻度盘上合适的范

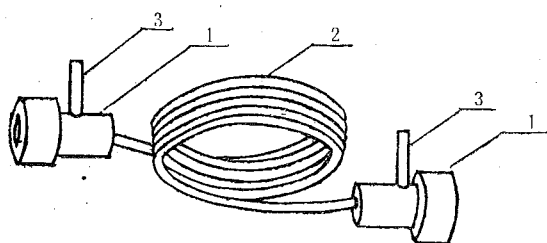


图 2 光导吸收池示意图

1 光导吸收池接头，2 光导管，3 进(出)样支管

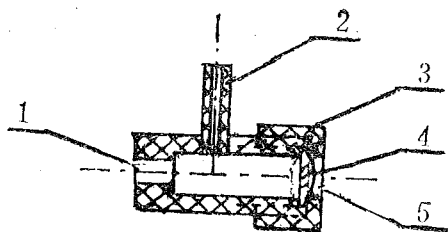


图 3 光导吸收池接头剖视图

1 光导管联接孔，2 进(出)样支管，3 透镜固定螺帽，4 聚光透镜，5 进(出)光孔

围。光导吸收池接头安装孔和光导吸收池接头外径相同，与其紧密配合，对光导吸收池接头起固定及定位作用。上述两项严格定位措施是保证测量结果重现性好的重要手段之一。参比光孔和光导吸收池接头安装孔的中心间距正好等于 751G 型分光光度计样品室内拉杆的一个档

次的距离,通过拉杆的推拉,可使参比光孔和光导池接头进(出)光孔分别对准光路。

光导吸收池由光导管2和光导吸收池接头1组成,如图2所示。光导管由含氟塑料管制成,是光导吸收池的主要部分。光导吸收池接头由聚四氟乙烯制成,其结构如图3所示。光导管通过孔1和光导吸收池连接,连接处要注意密封。进(出)样支管2接上硅橡胶管,可连接注射器吸入和排出样品。透镜4起聚光和密封双重作用。

通过光导吸收池接头把光导吸收池安装固定在测试架上,并用注射器吸入样品溶液或对照溶液。装样时要小心,严防气泡的产生。气-液界面的强烈散射作用严重影响测试结果的重现性。把测试架放入751G分光光度计样品室,固定好位置。以空气作参比。把波长调节盘固定在测量波长495nm处。根据实验情况调节参比光孔的大小,使吸光度 $A$ 的读数处于刻度盘上合适的范围内。先使参比光孔处于光路,通过调节仪器狭缝使透光率为100%;然后将光导吸收池推入光路,测出其吸光度 $A$ 。光导吸收池的洗涤方法是,先用所用溶剂洗,然后用丙酮或乙醇等易挥发溶剂洗,最后通氮气吹干。

## 2.2 仪器、设备、装置和试剂

1) 上海分析仪器厂产751G型分光光度计。2) 标准 $^{60}\text{Co}$ 源:  $A = 2.33 \times 10^8 \text{Bq}$ 。3) 自己设计制作的测试架及光导吸收池,所用国产含氟塑料管 $\phi_{\text{外}} = 2.8\text{mm}$ ,  $\phi_{\text{内}} = 2.0\text{mm}$ ,  $n_D^{20} = 1.340$ 。4) 硫酸亚铁铵, A.R., 重结晶后使用; 浓硫酸, A.R.; 硫氰酸钾, A.R.; 4-甲基-戊酮-2 (MIBK), 过滤后使用; 氯化钠, A.R.; 去离子水经三次蒸馏, 过滤后使用。用上述高纯水配制0.08M硫酸溶液; 用0.08M硫酸溶液配制1MKSCN溶液, 以少量MIBK萃取至酮层无色, 由此得到可供使用的KSCN溶液。

## 2.3 实验步骤

### 2.3.1 $\Delta A - C_{\text{Fe}^{3+}}$ 标准工作曲线的绘制

称取经重结晶的摩尔盐0.1961g, 以0.08M硫酸溶解后移入50ml容量瓶中, 配至刻度。用0.0100NK<sub>2</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>标准溶液标定其浓度。取定量该溶液用30% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>氧化成Fe<sup>3+</sup>, 并经稀释得到 $2 \times 10^{-6} \text{M Fe}^{3+}$ 溶液。准确移取此溶液0.0ml、0.5ml、1.0ml、1.5ml、2.0ml和2.5ml至6只10ml容量瓶中, 用0.08M硫酸稀释至刻度。在6只干燥的分液漏斗中分别加入上述六种溶液5ml、1MKSCN溶液1ml、MIBK 5ml, 萃取3分钟后静置15分钟, 弃去水层, 分别从各有机相中移取2ml至10ml容量瓶中, 用MIBK稀释至刻度。其样品编号分别为0、1、2、3、4和5。

将纯溶剂MIBK吸入光导吸收池中, 把测试架放入751G分光光度计的样品室内, 在495nm处测其吸光度值。调节参比光孔的进光量, 直至纯溶剂MIBK的吸光度接近于0。在以后的测量过程中, 参比光孔的大小不再改变。然后分别吸入0—5号溶液, 分别测得 $A_0$ 、 $A_1$ 、 $A_2$ 、 $A_3$ 、 $A_4$ 和 $A_5$ , 令 $\Delta A_i = A_i - A_0$ , 以 $\Delta A_i \sim C_{\text{Fe}^{3+}}$ 作图, 得标准工作曲线。

选其中一种溶液作 $A_i \sim \lambda$ 谱图。

### 2.3.2 测定辐射吸收剂量

配制 $5 \times 10^{-6} \text{M Fe}^{2+} - 0.08 \text{M H}_2\text{SO}_4 - 0.001 \text{M NaCl}$ 溶液作辐射剂量液, 分别装于若干支棕色辐照瓶中, 在标准 $^{60}\text{Co}$ 源的辐射场内固定位置照射一定时间。辐照后放5小时以上的时间, 取5ml辐照液按前述条件进行萃取, 测MIBK层的吸光度 $A$ , 同时测同样萃取的未辐照液的吸光度 $A'$ , 得 $\Delta A = A - A'$ 。从 $\Delta A \sim C_{\text{Fe}^{3+}}$ 标准工作曲线上查得 $C_{\text{Fe}^{3+}}$ , 然后由

公式  $D_{\text{计}} = 9.65 \times 10^6 \frac{C_{\text{Fe}^{3+}}}{G \cdot \rho}$  算出吸收剂量值 ( $\rho = 1.003 \text{ kg/L}$ , 为  $0.08 \text{ M}$  硫酸剂量液的密度)。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 光导吸收池与比色皿测得 $A-\lambda$ 谱图比较

用  $100 \text{ cm}$  长的光导吸收池与  $1 \text{ cm}$  长的比色皿测得的  $A-\lambda$  谱图结果在图 4 中示出。可以看出, 两谱图的形状相似, 峰值位置相同, 均在  $495 \text{ nm}$ 。因此, 在用光导吸收池时, 仍可在  $495 \text{ nm}$  处测吸光度  $A$  值。

#### 3.2 用光导吸收池所测数据的重复性试验

配制某一合适浓度的  $\text{Fe}(\text{SCN})_6^{3-}$ -MIBK 溶液, 在  $751 \text{ G}$  型分光光度计上用光导吸收池

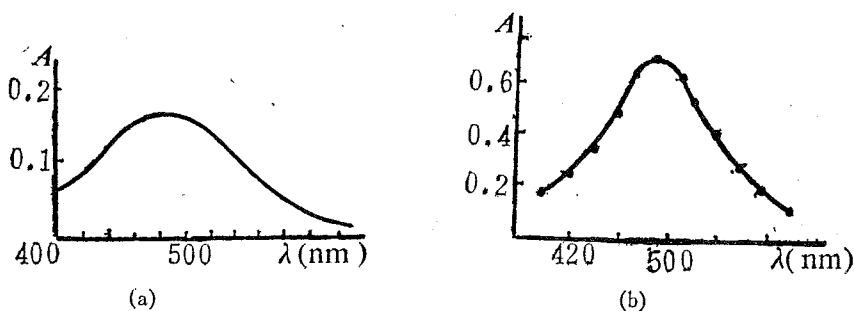


图 4  $A-\lambda$  谱图

(a) 用  $1 \text{ cm}$  比色皿在  $\text{UV-240}$  分光光度计上的扫描图,  $C_{\text{Fe}^{3+}} = 7.0 \times 10^{-6} \text{ M}$ ; (b) 用  $100 \text{ cm}$  长的光导吸收池在  $751 \text{ G}$  分光光度计上测出的谱图,  $C_{\text{Fe}^{3+}} = 2.2 \times 10^{-7}$

重复测其吸光度 10 次 (每次测量时都把测试架从样品室中取出, 并重装一次溶液), 结果如表 1 所示。其相对标准偏差低至  $0.6\%$ , 优于文献中报道的相对标准偏差  $3\%$  的试验结果<sup>[6]</sup>。测试架严格定位, 通过过滤除去溶液中的微粒杂质及装样时避免气泡的产生是提高测试数据重现性的重要措施。

表 1 数据重现性试验

试验序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	相对标准偏差
$A_i$	0.530	0.524	0.528	0.524	0.532	0.525	0.527	0.531	0.525	0.524	0.6%

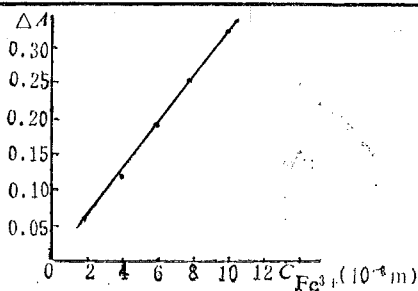


图 5  $\Delta A-C_{\text{Fe}^{3+}}$  标准曲线

#### 3.3 标准工作曲线 $\Delta A-C_{\text{Fe}^{3+}}$

由  $\Delta A-C_{\text{Fe}^{3+}}$  实验数据绘制出图 5 中所示的标准工作曲线, 其线性相关系数  $\gamma = 0.99945$ 。在实验过程中 (包括下面的剂量液的配制), 我们用的硫酸浓度为  $0.08 \text{ M}$ , 得到了线性较好的标准工作曲线。因为  $\text{Fe}^{3+}$  和  $\text{SCN}^-$  络合时适宜酸度对盐酸、硫酸、硝酸或高氯酸均限于  $0.05-0.2 \text{ N}$  浓度范围<sup>[3]</sup>, 故我们选用  $0.08 \text{ M}$  的硫酸浓度, 而不是通常硫酸亚铁剂量计

所用的  $0.4 \text{ M}$  硫酸溶液。在这一酸度下,  $C_{(\text{Fe}^{3+})}$  比常规硫酸亚铁剂量计的低约  $2\%$ 。

### 3.4 辐射吸收剂量的测定

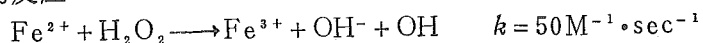
用  $5 \times 10^{-6} M \text{Fe}^{2+} - 0.08 M \text{H}_2\text{SO}_4 - 0.001 M \text{NaCl}$  剂量液进行吸收剂量的测定, 测试结果在表 2 中示出。

表 2 吸收剂量测量结果和理论计算值的比较

由 $^{60}\text{Co}$ 源活度算出的 $D(\times 10^{-2} \text{Gy})$	1.36	2.75	4.14	5.20	6.18
由标准曲线查出的 $D(\times 10^{-2} \text{Gy})$	1.33	2.66	3.99	5.0	6.0
相对偏差 (%)	2.3	3.4	3.8	4.0	3.0

测量值和理论计算值比较接近, 其相对偏差在 4% 以内。

通常亚铁剂量计体系的  $\text{Fe}^{2+}$  浓度在  $10^{-4} - 10^{-2} M$  范围内, 而本实验中为了减少亚铁离子自氧化速度 (剂量液储存和辐照期间) 和尽量降低  $\text{KSCN}-\text{FeSO}_4$  体系中亚铁离子的热氧化速度 (显色和萃取期间), 将亚铁离子浓度配成  $5 \times 10^{-6} M$ 。对该体系, 要使亚铁剂量计体系最慢的反应



完成 ( $\text{H}_2\text{O}_2$  反应掉 99% 以上), 剂量液辐照后要放置 5 小时以上再进行萃取及吸光度测量<sup>[7]</sup>。

### 3.5 剂量体系的稳定性

#### 3.5.1 未辐照和辐照剂量液的稳定性

剂量液均保存在棕色辐照瓶中, 未辐照液和辐照液自氧化现象不明显, 但若有杂质存在, 自氧化速率增大。本实验中将保存了 14 天的未辐照液放在辐射场中辐照, 测定结果的相对偏差小于 4%, 表明未辐照剂量液保存 14 天后仍可使用, 其稳定性很好。

萃取过程中  $\text{KSCN}-\text{FeSO}_4$  体系中亚铁离子的热氧化, 可通过在相同条件下萃取辐照液和未辐照液, 取两者的吸光度之差来消除其影响。这样做也可同时消除溶液中亚铁离子自氧化的影响, 从而减小测量结果的系统误差。

#### 3.5.2 $\text{Fe}(\text{SCN})_6^{3-}$ 络合物 MIBK 溶液的稳定性

实验结果表明, 该络合物的 MIBK 溶液至少在 100 分钟内是稳定的。而在水溶液中, 该络合物的吸光度每小时减低约 9%<sup>[2]</sup>。可见, 此络合物在 MIBK 溶剂中的稳定性比在水溶液体系中提高很多。

## 4 结论

用 MIBK 萃取  $\text{Fe}(\text{SCN})_6^{3-}$  并使用 1 m 长的光导吸收池, 可使硫酸亚铁剂量计的 量程下限降低三个数量级, 约达 10 mGy; 所测标准工作曲线的线性相关系数为 0.99945; 十次重复实验数据的相对标准偏差为 0.6%; 使用保存 14 天的剂量液测吸收剂量, 其相对偏差在 4% 以内;  $\text{Fe}(\text{SCN})_6^{3-}$  MIBK 萃取液的吸光度在 100 分钟内基本保持不变。这些结果表明, 该剂量体系、测试装置和测试方法是可行的, 可望在微剂量测量领域发挥作用。

## 参 考 文 献

- [1] 阿蒂克斯, F. H., 罗奇, W. C. 著(美), 陈常茂等译, 辐射剂量学, 第二卷, 原子能出版社, 1981, p203—218.
- [2] 马钦科, Z 著(波), 郑用熙等译, 元素的分光光度测定, 地质出版社, 1983, p265—279.
- [3] 株州冶炼厂等编, 有色冶金中元素的分离与测定, 冶金工业出版社, 1979, p192—207.
- [4] US patent 4,377, 751. (March 22, 1981).
- [5] Kronenberg S et al., *Nuclear Instruments & Methods*, **190**(1981), 365—368.
- [6] Radak B B, Mclaughlin W L et al., *Nuclear Instruments & Methods in Physical Research*, **A243** (1986), 201—206.
- [7] Spinks J W T and Woods R J, *An Introduction to Radiation Chemistry*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, New York, 1976, p295—299.

# Study on Enhancing the Measuring Sensitivity of Ferrous Sulfate Dosimeter by OWG Technique

Liu Zhanjun    Wu Xin

(*Department of Applied Chemistry*)

### Abstract

This study aimed at enhancing the measuring sensitivity of ferrous sulfate dosimeter by optical waveguide absorption cell in order to reduce the dosimeter's lower limit of the measured dose range and to make its usage widened. The optical waveguide absorption cell and its holder were self-designed and made. The cell consists of two Teflon adapters and flourinated plastic tubing with a low refractive index of 1.34. The absorbance was measured by single beam spectrophotometer. The linear correlation coefficient of standard curve is 0.99945. The relative standard deviation of measured dada is 0.6%. The lower limit of measured dose is about 10mGy, the best reported in literature for ferrous sulfate dosimeter.

**Key words:** optical waveguide absorption cell, ferrous sulfate dosimeter, radiation absorbed dose.

# 磁致伸缩仪

何正明 赵妙余 黄教民 李志超 汪晓光

(物理系)

## 摘要

自制了两台磁致伸缩仪。一台是借助于磁化强度小角度旋转原理制成的“薄窄非晶合金条带磁致伸缩仪”；另一台是用 Fabry-Perot 干涉原理制成的“高温磁致伸缩仪”。介绍了仪器的原理，结构及性能。

**关键词：**磁致伸缩，非晶条带干涉仪。

## 1 引言

自1928年阿库洛夫首先推导出立方晶体的饱和磁致伸缩系数 $\lambda_s$ 的理论公式以后有关磁致伸缩的理论与实验的研究更加深入。由于磁致伸缩反应了铁磁物质磁化过程中磁结构、磁畴的运动变化过程，反应了自旋磁矩和轨道磁矩相互作用的微观机理，因此磁致伸缩的研究对研究磁性体的性质有十分重要的意义。特别是磁性非晶合金和Nd-Fe-B稀土永磁材料具有独特的磁致伸缩性质，这已引起不少磁学工作者的兴趣。如何测量各种磁性材料的磁致伸缩，也成为一个重要课题。

测量磁致伸缩系数的方法很多。常见的是应变仪法、电容法和干涉法，它们分别将磁致伸缩量 $\Delta l$ 转变成电阻、电容和两相干光的光程差的变化，通过变化的电阻 $\Delta R$ ，电容 $\Delta C$ 、光程差 $\Delta$ 的测量来计算 $\lambda_s$ 。此外还有磁矩转动法，趋近饱和法，铁磁共振法。本文报道了我们自制的两台磁致伸缩仪。大大提高了测量的灵敏度和精度。

## 2 薄窄非晶合金条带磁致伸缩仪

### 2.1 原理

在平行非晶薄带表面外加以使之磁化至饱和的偏置直流磁场 $H_{\parallel}$ 及一个横向的交变磁场 $H_{\perp}$ ，磁矩在交变场作用下做小角度摆动，如果纵向加上张应力 $\sigma$ ，摆动角将发生变化，其变化的大小与 $\sigma$ 值和饱和磁致伸缩系数 $\lambda_s$ 有关，可通过改变 $H_{\parallel}$ 保持转角不变，从而计算出饱和磁致伸缩系数为

$$\lambda_s = \frac{(H_{\parallel})_0 - (H_{\parallel})\sigma}{3\sigma} M_s$$

其中  $(H_{\parallel})_0$  为外应力  $\sigma = 0$  时纵场的大小;  $(H_{\parallel})_{\sigma}$  为保持磁矩转角不变时相应力  $\sigma$  下的纵场大小;  $M_s$  为样品的饱和磁化强度;  $\sigma$  为应力. 公式的推导运用了能量极小原理. 磁体的总能

$$E = -H_{\parallel} M_s \cos\theta - H_{\perp} M_s \sin\theta + \frac{3}{2} \lambda_s \sigma \sin^2\theta + \frac{1}{2} (N_{\perp} \sin^2\theta + N_{\parallel} \cos^2\theta) \quad (1)$$

$\theta$  表示了磁矩和平行场方向的夹角,  $N_{\parallel}$  和  $N_{\perp}$  分别平行和垂直带面的退磁因子. 由能量最低条件  $\partial E / \partial \theta = 0$ , 又考虑到磁矩的转角  $\theta$  很小即  $\cos\theta \approx 1$  则易得到磁矩在任一瞬时的平衡位置为

$$\sin\theta(t) = H_{\perp \max} \sin(\omega t) / [H_{\parallel} + 3\lambda_s \sigma / M_s + M_s (N_{\parallel} - N_{\perp})] \quad (2)$$

磁矩的最大转角为

$$\sin\theta_{\max} = H_{\perp \max} / [H_{\parallel} + 3\lambda_s \sigma / M_s + M_s (N_{\parallel} - N_{\perp})] \quad (3)$$

样品架上绕有探测线圈, 线圈截面与  $H_{\parallel}$  垂直, 则磁矩摆动在线圈内产生的感应电动势为

$$e_{2f} = -Nsd4\pi M_s \cos\theta / dt = -4\pi M_s N S d \cos\theta / dt.$$

$$d \cos\theta / dt = d \sqrt{1 - \sin^2\theta} / dt = -\sin\theta H_{\perp} \omega \cos(\omega t) / [H_{\parallel} + 3\lambda_s \sigma / M_s + M_s (N_{\parallel} - N_{\perp})]$$

$$= -\frac{1}{2} \omega \sin^2\theta_{\max} \sin 2\omega t$$

$$e_{2f} = 2\pi N S M_s \omega \sin^2\theta_{\max} \sin 2\omega t \quad (4)$$

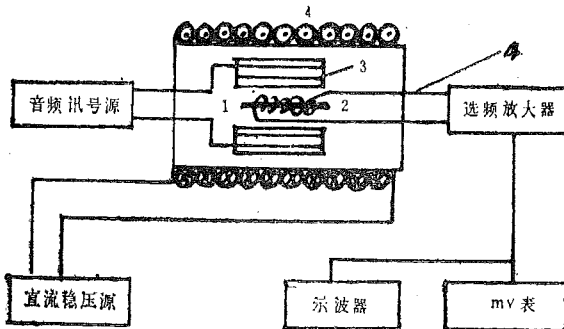


图1 薄窄非晶合金条带磁致伸缩仪

- 1 样品 2 探测线圈 3 交流磁化线圈(横场)  
4 直流螺线管(纵场)

其中  $N$  为探测线圈的匝数,  $S$  为其截面积,  $\omega$  为横向交变场的频率, 由 (4) 可以看到探测线圈内感应电动势的交变频率是倍频讯号. 探测线圈要求紧密绕在样品周围, 其线圈面要垂直样品轴向, 这样才能减小基频及空隙磁场对讯号的影响. 讯号经选频放大器放大滤掉基频讯号的干扰. 当保持  $H_{\perp}$  不变时, 改变  $H_{\parallel}$  使加张应力变化时感应电动势的值  $e_{2f}$  保持不变, 则可由 (4) 式得:

$$(H_{\parallel})_0 = (H_{\parallel})_{\sigma} + 3\lambda_s \sigma / M_s .$$

$$\lambda_s = [(H_{\parallel})_0 - (H_{\parallel})_{\sigma}] M_s / 3\sigma \quad (5)$$

## 2.2 仪器结构方框图 1 所示

## 2.3 仪器性能和实例

- (1) 灵敏度为  $10^{-6} \sim 10^{-7}$  量级
- (2) 精度 3%
- (3) 样品厚度为几十微米窄薄软磁条带.
- (4) 例  $\text{Fe}_{80-x}\text{Cu}_x\text{Si}_5\text{B}_{15}$  非晶样品室温下磁致伸缩

$xat\%$	0	0.2	0.4	0.625	0.8	2.5	5
$\lambda_s \times 10^6$	43.4	47.0	54.1	54.5	57.2	51.3	40.0



### 3 高温磁致伸缩仪

#### 3.1 测量原理:

高温磁致伸缩仪是用法布里——珀罗干涉仪的多光束干涉原理<sup>[2]</sup>, 把被测的伸缩量变成干涉的程差  $\Delta = 2nd\cos i'$  其中  $n$  为干涉仪间隙介质的折射率,  $i'$  为入射角,  $d$  为两平行镜间距离。当干涉仪间隙为空气, 垂直入射的情况下干涉条纹级次  $K$  与镜间距  $d$  有下述关系  $2d = K\lambda$  其中  $\lambda$  为  $\lambda$  射光波长由此得:

$$d = K \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (6)$$

当样品伸缩  $\Delta L$ , 使干涉仪镜间距离随之变成:

$$(d + \Delta L) = (K + \Delta K) \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{由此得}$$

$$\Delta L = \Delta K \cdot (\lambda/2) \quad (7)$$

设干涉条纹两极大之间距离为  $S$ 、因样品伸长导致条纹移动为  $\Delta S$  则  $\Delta K = \Delta S/S$  代入 (2) 式得

$$\Delta L = \Delta S/S \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (8)$$

这样可数出或用电子线路, 微机读出  $\Delta S$ , 那么伸缩量  $\Delta L$  就可知了。

#### 3.2 仪器结构

图 2 所示

样品室及炉丝架用石英制成, 温度范围为室温——  
800°C。

磁场经效准  $H = 235\text{oe}/\text{A}$ 。允许电流 7A。

当被测的伸缩量变成干涉的程差后用光电二极管接收此干涉条纹光强度变化。并在示波器上显示。一束  $6328 \text{ \AA}$  的激光穿过一个短间隔的法布里——珀罗干涉仪, 干涉仪的一片反射镜支承在一个压电陶瓷筒上, 在 0—150V 的锯齿波电压作用下这片反射镜作用周期的等速平移。振幅大于半波长, 在硅光二极管输出的光电讯号中出现两个兴峰如图 (3) 所示。兴峰间距为  $S$ 。干涉仪的另一片反射镜支承在一个保证移动平行性的片状弹簧支架上被测样品的一端通过一石英棒与支架顶紧, 另一端通过另一石英棒与顶端螺丝紧密接触。当样品发生磁致伸缩或其它原因引起的伸缩时, 反射镜随之做相应的平移这时电讯号的兴峰在示波器屏上的位置变化为  $\Delta S$ 。

#### 3.3 仪器的性能

- 1) 此仪器可测准到  $30 \text{ \AA}$  的微变。
- 2) 自制镍铬丝绕制的无感电炉及良好的保温系统, 温度范围从从室温—800°C。
- 3) 自制螺线管磁场范围 0—1500oe。

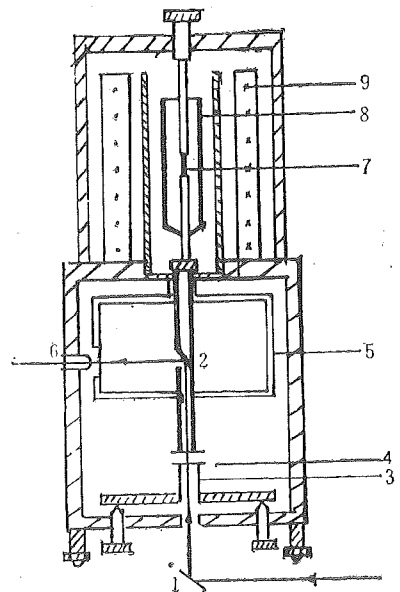
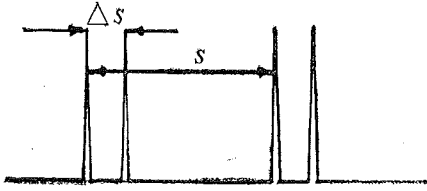


图 2 高温磁致伸缩仪结构图  
1. 2. 平面镜 3. 压电陶瓷 4. 干涉仪  
5. 平行弹簧 6. 光电二极管  
7. 样品 8. 炉体 9. 磁场

4) 本仪器测量 Ni 的  $\lambda_s - T$  曲线如图(4)所示, 测量时室温  $32^\circ\text{C}$ , 的  $\lambda_s$  值为  $-30.5 \times 10^{-6}$ 。



图(3)示波屏干涉条纹示意图

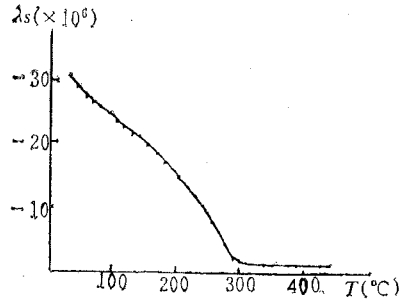


图 4. Ni 的  $\lambda_s - T$  曲线  $T = 32^\circ\text{C}$  (室温)  $\lambda_s = -30.5 \times 10^{-6}$

#### 4 讨论

上述引言中所提及的各种磁致伸缩测量仪都有其各自的独特优点也有其不可忽视的缺点, 例如容法不可避免地存在接触电位的影响; 形变电阻法又由于采用胶水粘贴阻碍了样品伸缩量的传递, 使灵敏度受到限制, 而且对于目前大量研制的非晶窄薄条带还存在着粘贴的困难; 各种间接的测量带来不可避免的计算误差, 因此对于不同的材料应选择适当的测试手段。

“薄窄非晶合金条带磁致伸缩仪”解决了应变电阻法粘贴薄带的困难; 也可克服电容法活动电极所引起的反作用影响; 而且它是一种补偿法的测量手段。感应倍频讯号的振幅决定于最大转角。这取决于应力各向异性场与饱和直流偏场相互补偿。感应讯号可在示波器上得到监视, 补偿法的优点是减小了基频讯号及外界杂散场干扰的误差, 因此有较高的精度; 它原理简单, 制作方便, 是一种可行的方法。最近报道了小角度法的横向场由通过样品的电流产生, 当这场足够小以至于其温度效应可以忽略的情况是行之有效的。

“高温磁致伸缩仪”的主要特点是采用了短间距的法布里—珀罗干涉仪, 其两片镜片的间距为  $1\text{mm}$  左右, 这一点理想地消除了空气流动的影响, 提高了波形的稳定性; 其测量是在逐点恒定温度下测量无磁场与加磁场两种情况下的差值, 因此是瞬时进行的, 排除了其它缓变因素, 如仪器本身材料热胀对测量结果的影响; 此仪器所测的结果得到的是样品的绝对伸缩量, 这避免了一切间接测量所带来的计算误差。这种装置不仅可以测量样品的磁致伸缩, 经过简单改动还可以测量其它类型的微变如电致伸缩、热膨胀, 地壳下沉, 及透明材料的介电常数……等有较大的应用价值。

为了进一步提高测量精度还需克服各种干扰带来的误差, 如小角度法的探测线圈截面与  $H_{\perp}$  的平行度, 放大器的线性度, 干涉法的稳定度及位移的平行度, 温度及磁场的误差, 应力的影响……还有待进一步改进。

#### 5 致谢

本文得到陈慧余付数教授的指导和帮助在此表示衷心感谢。

## 参 考 文 献

- [1] Narita K., 国外金属材料, 3 (1981), 39.  
[2] 李志超, 黄文浩, 陈慧余, 金属材料研究 10, (1984) No5, 39.

## Two Magnetostriction Apparatuses

Hezhengming, Zhao miaogu Huang Jiacmin Li zhichao wang xiaoguang\*

*(Department of physics)*

### Abstract

This paper presents two magnetostriction apparatuses we have made. One is used to measure narrow-thin amorphous ribbon by means of small-angle-magnetization-rotation. The other is a "High Temperature Magnetostriction Apparatus" which works on the theory of Fabry-perot interferometer. The paper also introduces the structure, the measurement fundamentals and characteristics of the apparatuses.

**Key words:** magnetostriction, amorphous ribbon, interferometer.

# 关于M. J. D. Brand和G. A. Rechnitz离子 选择电极标准加入迭代法的研究

王基镛

(近代化学系)

## 摘 要

M. J. D. Brand和G. A. Rechnitz给出著名的二次标准加入迭代算法,但它有时发散。发散的原因是什么?大范围收敛的条件是什么?近似初值 $C_x^{(0)}=0$ 是否最佳?最佳选择是什么?直接的迭代方程是什么?怎样定解?本文回答了上述一系列问题并改进与完善了这个迭代算法。

**关键词:** 离子选择电极, 迭代方程, 分析化学。

众所周知, M. J. D. Brand和G. A. Rechnitz关于离子选择电极标准加入法及电脑数据处理的研究成果得到了国内外广泛的应用<sup>[1,2]</sup>。但是宣家祥却指出他们的二次标准加入迭代法(简称BR算法)有时是发散的<sup>[3]</sup>;相反,曹履诚等按此法编制程序计算收敛<sup>[4]</sup>。那末是何原因导致发散?满足什么条件它又收敛?是否存在一个大范围收敛的迭代格式?近似初值选零合不合理?是否存在最优选择?直接的BR迭代方程是什么?如何定解?鉴于BR算法亦敛亦散,它的可靠性又如何?等等。准确地回答这些问题对提高分析工作的质量无疑是有很大帮助的。但文[1]是用实验数据的电脑处理结果与加入量进行对比来说明计算是准确的。显然这是重要的,但也是经验的,不能进一步解决上述实际问题。为此本文作了研究,从实验与定理两方面回答了上述问题,对BR算法作了适当的改进、完善与提高,使它更加简便、准确与可靠,因而也特别适合固化在微电脑智能离子计的ROM之中<sup>[5]</sup>。

## 1 理论分析

二次标准加入法三个测量点的Nernst方程为

1989年3月15日收到。

$$\begin{cases} E_1 = E_0 + S \log C_x & (1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_2 = E_0 + S \log \frac{C_x V_x + C_{s1} V_{s1}}{V_x + V_{s1}} & (2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_3 = E_0 + S \log \frac{C_x V_x + C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}}{V_x + V_{s1} + V_{s2}} & (3) \end{cases}$$

其中,  $V_x$ 、 $C_x$  分别是试液的体积与被测离子的浓度,  $C_{s1}$ 、 $C_{s2}$  与  $V_{s1}$ 、 $V_{s2}$  分别是标液的浓度与所加入的体积,  $S$  是电极的斜率,  $E_0$  是常数,  $E_1$ 、 $E_2$  与  $E_3$  是各次测得的电动势。

BR 迭代的步骤是: 先令  $C_x = 0$ , 由 (2)、(3) 式解出  $S$  和  $E_0$  的值, 代入 (1) 式中求得  $C_x$  的第一次近似值, 再把它代入 (2)、(3) 式, 类似可求出  $C_x$  的第二次近似值, 继续做下去, 直至  $C_x$  数值收敛为止。事实上, 免去反复求解  $S$ 、 $E_0$  值的中间步骤并保持上述算法的基本特点, 我们得到

$$C_x = F(C_x), \quad F(C_x) = W \cdot \left( \frac{C_x V_x + C_{s1} V_{s1}}{C_x V_x + C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}} \right)^{\frac{E_1 - E_3}{E_2 - E_3}} \cdot \frac{C_x V_x + C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}}{V_x + V_{s1} + V_{s2}} \quad (4)$$

其中  $W = \left( \frac{V_x + V_{s1} + V_{s2}}{V_x + V_{s1}} \right)^{\frac{E_1 - E_3}{E_2 - E_3}}$ , 我们可以证得下面的定理。

**定理** 若  $V_{s1}$ 、 $V_{s2}$ 、 $V_x > 0$ ,  $C_{s2} \geq C_{s1} > C_x > 0$ , 且

$$0 < \frac{E_2 - E_3}{E_1 - E_3} < \frac{V_{s2}}{V_{s1} + V_{s2}} \cdot \frac{V_x}{V_x + V_{s1}}, \quad \text{当 } C_{s2} = C_{s1} \text{ 时} \quad (5)$$

$$0 < \frac{E_2 - E_3}{E_1 - E_3} < 1, \quad \text{当 } C_{s2} > C_{s1} \text{ 时} \quad (6)$$

则方程 (4) 在区间  $(0, +\infty)$  中有唯一实根  $C_x^*$ 。任选近似初值  $C_x^{(0)} \in [0, C_x^* + \delta]$ ,  $\delta$  为一适当的正数, 由迭代格式

$$C_x^{(k+1)} = F(C_x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

产生的序列  $\{C_x^{(k)}\}$  收敛于  $C_x^*$ 。

**证明** 对于  $V_1, V_2 \in (0, +\infty)$ ,  $\theta \in [1, +\infty)$ ,  $x \in (1, +\infty)$ , 引进辅助函数

$$f(x) = \left( \ln \frac{1 + V_1 x}{1 + V_1} \right) / \left( \ln \frac{1 + (V_1 + \theta V_2) x}{1 + V_1 + V_2} \right)$$

作变换  $V_1 = V_{s1}/V_x$ ,  $V_2 = V_{s2}/V_x$ ,  $x = C_{s1}/C_x$ ,  $\theta = C_{s2}/C_{s1}$ , 对 (4) 式略加变形得

$$f(x) = 1 - \frac{E_2 - E_3}{E_1 - E_3} \quad (8)$$

易证  $f(x)$  是严格增函数, 且  $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) = 1$  及

$$\lim_{x \rightarrow 1^+} f(x) = \begin{cases} \frac{V_{s1}}{V_{s1} + V_{s2}} \cdot \frac{V_x + V_{s1} + V_{s2}}{V_x + V_{s1}}, & \text{当 } \theta = 1 \text{ 时} \\ 0, & \text{当 } \theta > 1 \text{ 时} \end{cases}$$

所以当 (5) 或 (6) 式满足时, 方程 (4) 在区间  $(0, +\infty)$  中有唯一解  $C_x^*$ 。

因为

$$\frac{F'(C_x)}{F(C_x)} = \frac{V_x}{C_x V_x + C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}} \left( \frac{E_1 - E_3}{E_2 - E_3} \cdot \frac{C_{s2} V_{s1}}{C_x V_x + C_{s1} V_{s1}} + 1 \right)$$

于是易证  $|F'(C_x^*)| < 1$  及  $|F'(C_x)|$  是严格增函数, 又因  $|F'(C_x)|$  连续, 所以存在  $\delta > 0$ , 当  $C_x \in (0, C_x^* + \delta]$  时, 有  $|F'(C_x)| < 1$  成立, 故由 (7) 式产生的迭代序列  $\{C_x^{(k)}\}$  收敛于  $C_x^*$ .

若令  $C_x^{(0)} = 0$ , 代入 (7) 式右边计算得  $C_x^{(1)}$

$$C_x^{(1)} = \left( \frac{V_x + V_{s1} + V_{s2}}{V_x + V_{s1}} \cdot \frac{C_{s1} V_{s1}}{C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}} \right)^{\frac{E_1 - E_3}{E_2 - E_3}} \cdot \frac{C_{s1} V_{s1} + C_{s2} V_{s2}}{V_x + V_{s1} + V_{s2}}$$

故  $0 < C_x^{(1)} < C_x^*$ , 即  $C_x^{(1)} \in (0, C_x^* + \delta]$ , 由此可得, 对于任意  $C_x^{(0)} \in [0, C_x^* + \delta]$ , 由 (7) 式产生的迭代序列  $\{C_x^{(k)}\}$  收敛于  $C_x^*$ . 定理证毕.

当  $C_x^*$  求出后, 即可按下式求出  $S$  与  $E_0$  的值

$$S = (E_2 - E_1) / \left( \log \frac{C_x^* V_x + C_{s1} V_{s1}}{C_x^* (V_x + V_{s1})} \right) \quad (9)$$

$$E_0 = E_1 - S \log C_x^* \quad (10)$$

由定理可知, 方程 (4) 解的存在、唯一及迭代格式 (7) 收敛不是无条件的, 而是要满足 (5) 或 (6) 式, 否则迭代发散。这就是 BR 算法有时发散的原因所在。此时, 问题一定出在试样分析的实验之中, 要查找原因, 重新测定。

(7) 式是直接的迭代格式, 按它编程序免去反复求  $S$  及  $E_0$  值的中间步骤, 不易出错。同时, (7) 式也是大范围收敛的迭代格式, 近似初值不必固定为零, 它可以在区间  $[0, C_x^* + \delta]$  中任意选取。通常  $C_x^{(0)}$  越靠近  $C_x^*$ , 至收敛所需的迭代次数越少。因此应该尽量选靠近  $C_x^*$  的近似初值。为此, 把电极工作曲线直线部分的下限浓度作为近似初值, 这便是最佳的选择。例如, 一般下限浓度不会超过  $10^{-7}$  (M), 因此就令  $C_x^{(0)} = 10^{-7}$ 。

以上述定理为基础, 我们在方程定解、直接的迭代格式的推演、大范围收敛的条件以及初值的区间与最佳选择等诸方面使 BR 算法得到了改进、完善与提高, 因而它已不再是经验性的了, 理论与下面的实验数据处理结果均说明它是二次标准加入法的一种可靠的数据处理方法。

## 2 实验数据处理

二次标准加入法在生产与科研中已是一种常用的方法, 有大量的数据可供处理, 这里只选了代表性的几组及部分中外文献中的数据, 计算结果列于表 1, 显见, 与理论预期的一样, 计算结果是准确的。

在应用 BR 算法时要注意以下三点: (i) 直接按 (7) 式编制程序; (ii) 最优初值  $C_x^{(0)} = 10^{-7}$ ; (iii) 要注意收敛条件 (5) 与 (6), 最好把它们加在程序之中, 用来判断是否有计算的必要, 没有必要就意味着实验有毛病。

除了 BR 算法外, 至今已发表了很多不同的关于二次标准加入法实验数据处理方法的文章。笔者将压缩映像原理引进到这个领域后, 不但可以设计新的优秀算法<sup>[6]</sup>, 而且还能对以往的重要算法展开深化研究的工作, 本文就是一个典型的例子。在继续作了仔细认真的研究

表 1 各种离子选择电极实测数据计算结果表

实验项目	试液体积 $V_x$ (ml)	试液浓度 $C_x$ (M)	标液浓度 (M)		加入标液 体积(ml)		电 动 势 (mV)			计算结果 $C_x^*(M)$
			$C_{s,1}$	$C_{s,2}$	$V_{s,1}$	$V_{s,2}$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	
测 F <sup>-</sup>	25.00	$1.00 \times 10^{-5}$	$1.00 \times 10^{-3}$	$1.00 \times 10^{-3}$	1.00	1.00	299.9	192.0	187.5	$1.05 \times 10^{-5}$
测 F <sup>-</sup>	25.00	$1.00 \times 10^{-4}$	$1.00 \times 10^{-3}$	$1.00 \times 10^{-2}$	2.00	1.00	175.6	162.4	133.1	$1.00 \times 10^{-4}$
测 I <sup>-</sup>	50.00	$1.00 \times 10^{-5}$	$1.00 \times 10^{-4}$	$1.00 \times 10^{-3}$	5.00	2.00	-89.1	-104.2	-130.9	$0.99 \times 10^{-5}$
测 Cl <sup>-</sup> [1]	20.00	$1.00 \times 10^{-2}$	0.10	0.10	2.00	2.00	107.9	92.9	84.9	$1.00 \times 10^{-2}$
测 Ca <sup>++</sup> [3]	50.00	$1.00 \times 10^{-3}$	0.10	0.10	0.25	0.25	-22.5	-17.8	-14.5	$0.98 \times 10^{-3}$
测 Cd <sup>++</sup>	50.00	$1.00 \times 10^{-5}$	$1.00 \times 10^{-3}$	$1.00 \times 10^{-3}$	1.00	1.00	-214.2	-199.0	-192.2	$0.96 \times 10^{-5}$

工作之后, 现在似乎可以看到, 非线性最小二乘拟合原理、压缩映像原理、摄动原理及 Gran 坐标系原理这四根支柱已平稳地支撑起离子电极分析数据处理的整个系统了<sup>[5-10]</sup>。

## 参 考 文 献

- [1] Brand M J D *et al.*, *Anal Chem.*, 42(1970), 1172.  
 [2] 苏渝生, 离子选择电极通讯, 4(1984), 26.  
 [3] 宣家祥, 离子选择电极通讯, 1 (1981), 37.  
 [4] 曹履诚等, 离子选择电极通讯, 2(1982), 38.  
 [5] 王基谔等, 化学传感器, 7 (1987), 36; 9(1989), 71.  
 [6] 王基谔等, 高等学校化学学报, 6(1985), 488.  
 [7] 王基谔等, 分析化学, 13(1985), 389; 14(1986), 329; 14(1986), 401.  
 [8] 王基谔, 安徽化工(增刊), (1987), 89.  
 [9] 王基谔, 化学通报, (1990), No. 2, 52.  
 [10] Wang Jirong (王基谔), *Analyst*, 114(1989), 796.

# Study on M. J. D. Brand and G. A. Rechnitz's Iterative Method of Double Standard Method in ISE Analysis

Wang Jirong

*(Department of Modern Chemistry)*

## Abstract

M. J. D. Brand and G. A. Rechnitz gave the well known iterative method for double standard addition method. According to it, iterative process is at times divergent. What are the causes of the divergence? What are the conditions for convergence? Is the initial approximation  $C_x^{(0)} = 0$  optimum? Is there an optimum initial approximation? What is a direct iterative equation? How do we decide the solution of the equation? The above problems are solved in this paper and this iterative method is improved on.

**Key words:** ISE, iterative equation, analytical chemistry.



# 一种新的莫尔条纹法\*

谢建平 明海 徐继泽 吴云霞

(物理系)

## 摘 要

单色平行光照明全息双频位相光栅, 1级衍射的直条纹投射到物体上, 在另一相同光栅的1级衍射像中出现莫尔条纹。

**关键词:** 全息双频光栅, 莫尔条纹, 衍射。

物体表面形状的测量是光学量度术的一个重要方面, 最好的方法是描绘出物体表面的等高线<sup>[1]</sup>。目前常用的方法有条纹投影法<sup>[2]</sup>, 全息莫尔法<sup>[3]</sup>和莫尔条纹法<sup>[1, 4]</sup>。莫尔现象是两个光栅之间的干涉现象, 其中一个光栅投影到物体上, 光栅条纹受到物体表面形状的畸变, 通过另一相同的光栅来观察物体时, 便出现了莫尔条纹, 它们是物体表面高度的等值线。由于莫尔条纹法使用非相干光照明, 可观察较大的物体, 在工程和医学上使用广泛, 有较好的应用价值, 近20年来引起了人们广泛的兴趣。

以往莫尔法中都使用黑白条形透射光栅, 这里我们介绍一种用位相光栅产生莫尔条纹的方法, 给出等高线的深度公式和实验验证, 并对其改进和应用进行一些讨论。

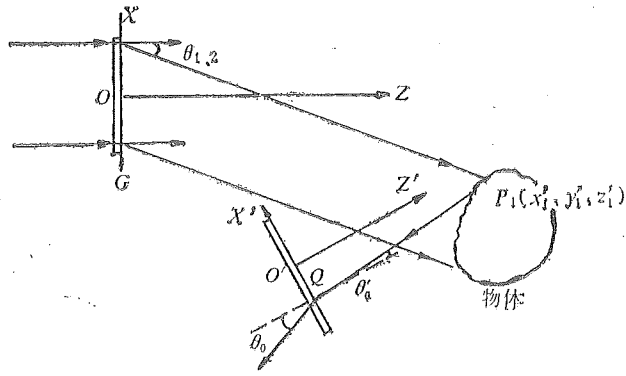


图1 双频位相光栅产生莫尔条纹的光路

1989年4月20日收到。

\*在86年中国光学学会首届光学测试学术会议上宣读过。

## 1. 原理

实验光路如图 1 所示。平行光束垂直照射到全息双频位相光栅  $G_1$  上, 在 +1 级 (或 -1 级) 方向上有两个衍射分量, 它们彼此干涉形成了对比度为 1 的高质量平直等间距条纹。对光栅  $G_1$  有坐标系  $O-xyz$ ,  $x$ 、 $y$  轴在光栅面上,  $y$  轴平行光栅拍频条纹。光栅振幅透射率<sup>[5]</sup>为

$$t_1(x, y) = \exp\left[j\frac{m}{2}\sin\frac{2\pi x}{d_1}\right] + \exp\left[j\frac{m}{2}\sin\frac{2\pi x}{d_2}\right] \quad (1)$$

其中  $m$  为光栅位相调制度,  $d_1$ 、 $d_2$  为双频光栅的两个空间周期, 其拍频周期为  $\frac{1}{d'} = \left|\frac{1}{d_1} - \frac{1}{d_2}\right|$ 。

两个 +1 级分量的衍射方向由下式决定

$$\sin\theta_1 = \frac{\lambda}{d_1}, \quad \sin\theta_2 = \frac{\lambda}{d_2} \quad (2)$$

其平均衍射角  $\bar{\theta} = \frac{1}{2}(\theta_1 + \theta_2)$ 。它们形成的干涉条纹投影到物体上, 其振幅分布可写成<sup>[5]</sup>

$$u(x, y, z) = A_0 J_1\left(\frac{m}{2}\right) \sum_{i=1}^2 \exp[jk(x\sin\theta_i + z\cos\theta_i)] \quad (3)$$

对光栅  $G_2$  也有坐标系  $O'-x'y'z'$ ,  $x'$ 、 $y'$  轴在光栅面上,  $y'$  轴平行光栅拍频条纹, 定点  $O'$  在  $O-xyz$  中为  $(x_0, y_0, z_0)$ 。两坐标系之间有

$$\begin{aligned} x &= x' \cos\alpha + z' \sin\alpha + x_0 \\ y &= y' \\ z &= -x' \sin\alpha + z' \cos\alpha + z_0 \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\alpha$  为  $x'$  和  $x$  轴的夹角, 则 (3) 式变成

$$\begin{aligned} u(x', y', z') &= A_0 J_1\left(\frac{m}{2}\right) \times \\ &\times \sum_{i=1}^2 \exp\{jk[x' \sin(\theta_i - \alpha) + z' \cos(\theta_i - \alpha) + x_0 \sin\theta_i + z_0 \cos\theta_i]\} \end{aligned} \quad (5)$$

若把  $z'$  看作物体表面形状的函数  $z' = z'(x', y')$ , 则投影到物面并受到表面形状畸变的条纹分布为  $|u(x', y', z')|^2$ 。

假定物面上任一点  $P_1(x'_1, y'_1, z)$  处的振幅反射系数为  $\gamma$ , 那么反射光为

$$u_{p_1} = \frac{\gamma}{z_1} u(x'_1, y'_1, z_1) \exp\left\{j\frac{k}{2z'}[(x' - x_1)^2 + (y' - y_1)^2]\right\} \quad (6)$$

在观察光路中, 照相机或人眼是受到光阑限制通过光栅  $G_2$  来观察物面的。光栅  $G_2$  的透射率也由 (1) 式表示, 它的两个 +1 衍射分量为

$$J_1\left(\frac{m}{2}\right) \left\{ \exp\left[jkx' \left(\sin\theta_0 + \frac{\lambda}{d_1}\right)\right] + \exp\left[jkx' \left(\sin\theta_0 + \frac{\lambda}{d_2}\right)\right] \right\} \quad (7)$$

这里  $\theta_0$  是物点  $P_1$  光线在  $G_2$  上的入射角, 其 +1 级衍射方向  $\theta_0$  为  $\sin\theta_0 = \sin\theta_0 + \frac{\lambda}{d}$ ,

$d = \frac{1}{2}(d_1 + d_2)$ 。若通过光栅  $G_2$  上的  $Q(x', y', 0)$  点在 +1 级衍射  $\theta_0$  方向上来观察坐标为  $x'_1 = x' + z'_1 \text{tg} \theta'_0$ ,  $y'_1 = y'$ ,  $z'_1 = z'$  的  $P_1$  点时, 其强度由 (6) 和 (7) 式为

$$\begin{aligned}
 I(P_1) &= \left| u_{P_1} J_1\left(\frac{m}{2}\right) \left\{ \exp\left[jkx' \left(\sin \theta'_0 + \frac{\lambda}{d_1}\right)\right] + \exp\left[jkx' \left(\sin \theta'_0 + \frac{\lambda}{d_2}\right)\right] \right\} \right|^2 \\
 &= \frac{4A_0 \gamma^2 J_1^4\left(\frac{m}{2}\right)}{z_1'^2} \left\{ 1 + \cos\left[\frac{2\pi x'}{d'} A + \frac{2\pi z'_1}{d'} (\text{tg} \bar{\theta} + A \text{tg} \theta'_0) + \varphi_0\right] + \cos \frac{2\pi x'}{d'} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \cos\left[\frac{2\pi x'}{d'} (A+1) + \frac{2\pi z'_1}{d'} (\text{tg} \bar{\theta} + A \text{tg} \theta'_0) + \varphi_0\right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \cos\left[\frac{2\pi x'}{d'} (A-1) + \frac{2\pi z'_1}{d'} (\text{tg} \bar{\theta} + A \text{tg} \theta'_0) + \varphi_0\right] \right\} \quad (8)
 \end{aligned}$$

式中  $A = \cos \alpha - \sin \alpha \text{tg} \bar{\theta}$ ,  $\varphi_0 = \frac{2\pi}{d'}(x_0 + z_0 \text{tg} \bar{\theta})$ , 并利用了  $\sin \theta_1 - \sin \theta_2 = \frac{\lambda}{d_1} - \frac{\lambda}{d_2} = \frac{\lambda}{d'}$ ,

$\cos \theta_1 - \cos \theta_2 = -\delta(\cos \theta) = \text{tg} \bar{\theta} \cdot \frac{\lambda}{d'}$ 。上式中的第5项当  $A = \cos \alpha - \sin \alpha \text{tg} \bar{\theta} = 1$ ,  $\alpha = 0$  即两光栅平行时, 可得到等高线方程,

$$\frac{2\pi z'_1}{d'} (\text{tg} \bar{\theta} + \text{tg} \theta'_0) + \varphi_0 = 2n\pi, n \text{ 为整数。}$$

莫尔条纹深度间距公式为

$$\Delta z'_1 = \frac{d'}{\text{tg} \bar{\theta} + \text{tg} \theta'_0} \quad (9)$$

(9) 式和用黑白条形光栅作莫尔条纹的深度间距公式相同<sup>[1]</sup>。

## 2 实验和结果

按图 1 的光路, 将 520mW 的氩离子激光束 ( $\lambda = 5145 \text{ \AA}$ ) 扩束成平行光, 垂直照射到全息双频位相光栅<sup>[6]</sup>上, 其拍频周期  $d' = 2.134 \text{ mm}$ , 衍射效率约 18%,  $\bar{\theta} = 15.6^\circ$ 。为了验证深

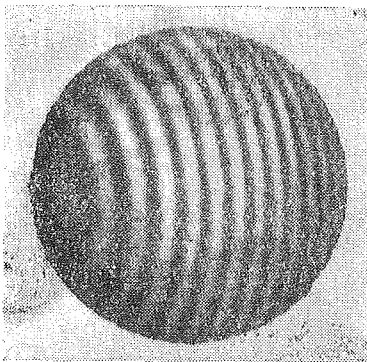


图 2a 光栅衍射像

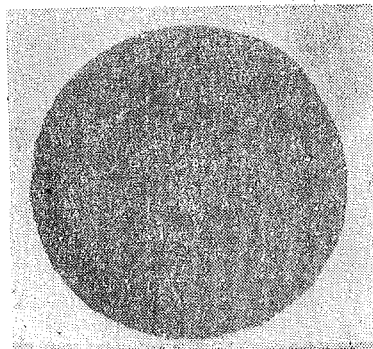


图 2b 莫尔条纹

度间距公式(9),待测物是直径为37.77mm的乒乓球。光栅 $G_2$ 与 $G_1$ 的参数相同,二者平行放置。 $G_1$ 到物体中心为650mm, $G_2$ 到物中心为150mm。拍摄物镜到物的距离为850mm,放大倍率 $M=0.44$ ,物镜上放置宽度为2mm的缝光栏,狭缝平行于投影条纹。图2a和2b分别是小球通过光栅 $G_2$ 的1级衍射像和莫尔条纹的照片。实验中测得 $\theta'_0=6.7^\circ$ , $\bar{\theta}=15.6^\circ$ ,那么 $\Delta z'_{理}=5.38\text{mm}$ 。测量底片上的莫尔条纹距离为4.6和12.3mm,由放大倍率和小球的直径值得到莫尔条纹深度间距 $\Delta z'_{实}=5.3\text{mm}$ ,与理论值基本符合。因此实验证实了文中分析的正确。

实验中左右平移光栅 $G_2$ 或 $G_1$ ,观察莫尔条纹位置虽然变动,但其深度间距不变。前后平移光栅 $G_2$ ,莫尔条纹的对比度不发生明显的变化,有较大的观测景深。

用全息双频位相光栅产生莫尔条纹,是建立在光栅衍射基础上的,投影条纹的质量高,景深大,又由于解调光栅也是位相光栅 $G_2$ ,其1级分量的透射率的对比度也为1,因而使莫尔条纹对比度较之用黑白条形光栅的高,观测景深也可加大。双频位相光栅用全息术制作简单,拍频周期 $d'$ 和1级衍射角 $\bar{\theta}$ 可制作成不同数值,得到不同精度的莫尔条纹深度间距。实验中不需要全息莫尔法那样的机械稳定性。本方法的明显缺点是要用相干光源,只适合较小物体外形的测量。若用红宝石脉冲激光器,本方法可观察高速运动物体的外形。如果光栅 $G_1$ 的投影部分改为白光条纹投影系统,在 $G_2$ 上加滤色片也应观测到莫尔条纹。这时(5)式中 $u(x',y',z')$ 只要用条纹强度分布来代替,物点 $P(x'_i,y'_i,z'_i)$ 的振幅 $u_{P_i}$ 用投影条纹强度的开方值,同样的分析也可得到 $\Delta z'_i = \frac{d'}{\text{tg}\bar{\theta} + \text{tg}\theta'_i}$ 的莫尔条纹深度间距公式,但这时投影条纹的间距也必须为光栅 $G_2$ 的拍频周期 $d'$ 。

本工作中得到了许存义和左健同志的帮助,作者深表谢意。

### 参 考 文 献

- [1] Takasaki H, *Appl. Opt.*, **9**(1970), No. 6, 1457.
- [2] Howe S H, Welford W T, *Nature*, **216**(1967), 786.
- [3] Haines K, Hildebrand B P, *Phys. Letters*, **19**(1965), 10; **20**(1966), 442.
- [4] Meadows D M, Johnson W O, Allen J B, *Appl. Opt.*, **9**(1970), No. 4, 942.
- [5] J. W. 顾德门著,詹达三等人译校,傅里叶光学导论,科学出版社,1979,77—78页。
- [6] 谢建平等人,光学学报, **5** (1985), No. 2, 103.

# A New Method of Moire

Xie Jianping Ming Hai Xu Jize Wu Yunxia

*(Department of Physics)*

## Abstract

The 1st order straight fringes, diffracted from holographic double-frequency phase grating illuminated by monochromatic collimated beam, are projected onto the object. The Moire fringes appear in the 1st diffraction image of the other same grating.

**Key words:** holographic double-frequency grating, Moire fringe, diffraction.

# 白眉蝮蛇毒降血压组份的分离 纯化及其性质的初步研究

王 淳 黄婉治 何思谦

(生物系)

覃公平

(中国人民解放军238医院)

## 摘 要

从东北长白山脉的白眉蝮蛇 (*A. H. Ussuriensis*) 蛇毒中得到一种聚丙烯酰胺凝胶电泳纯的降压组份 (*Hypotensive component*) 简称 HTC, 该组份经过 DEAE—Sephadex  $A_5$  和 Sephadex G—75 柱层析两步完成, HTC 不含碳水化合物, SDS—PAGE 电泳测得分子量为 17500 道尔顿, 等电点为 pH6.6, 它具有精氨酸酯酶活性而没有出血活性, 促凝, 抗凝, 纤溶等活性、也无磷脂酶  $A_2$ 、蛋白质水解酶和 *L*—氨基酸氧化酶的活性。

按每公斤家兔体重静脉注入 0.1mg HTC 其血压显著下降, 数分钟后, 血压基本上恢复正常。

**关键词:** 白眉蝮蛇 (*Agkistrodon halys ussuriensis*), 蛇毒; 降血压组份 (HTC), 酶活性

## 1 前言

1949年 Roche et al<sup>[1]</sup> 最早对 *Bothrops jararaca* 蛇毒的降血压机理作了较为深入的探讨, 近年来人们又对不同蛇毒所引起的动物降压机理作了进一步的研究, 例如1969年 G. Oshima<sup>[2]</sup> 等研究了蝮亚科蝮蛇和眼镜蛇科的32种蛇毒的精氨酸酯酶及激肽释放酶的分布, 指出激肽释放酶在蝮亚科蛇毒中活力最高, 它与毛细血管舒张, 血压下降有直接的关系, 1970年 Haddy<sup>[3]</sup> et al 和 1972年 Rothschild<sup>[4]</sup> et al 等也在这方面作了许多探索性的工

1989年5月5日收到。

作，所提出的论点也因各种蛇而异，1988年王玉珍<sup>[5]</sup>等人报道了尖吻蛇毒降压组份的分离纯化及性质的研究。本文报道从东北长白山白眉蝮蛇毒中分离纯化了HTC的工作。

## 2 材料与方 法

**材料** 东北长白山乌苏里亚种白眉蝮蛇毒系中国人民解放军238医院提供，DEAE—Sephadex A<sub>50</sub>，Sephadex G—75为典瑞pharmacia公司产品，低分子标准蛋白质为西德Combithek产品，丙烯酰胺，甲叉双丙烯酰胺系英国BDH产品，其它试剂均为国产AR级以上纯度。

**动物** 健康小白鼠(20g±2g)/只，家兔雌雄兼用体重1.5~2.5kg/只。

**仪器设备** 动物血压测定装置系自己组装，柱层析系统为LKB产品，4050型分光光度计为瑞型LKB产品

### 实验方法

1. 聚丙烯酰胺凝胶电泳测纯度，SDS—PAGE测定分子量，等电聚焦电泳测等电点均按LKB电泳仪说明书进行。

2. 糖蛋白的测定按孙册<sup>[6]</sup>方法进行。

3. 血浆凝血酶原时间(PPT)按Cheng.H C.<sup>[7]</sup>方法进行。

4. 纤溶活性测定按Ouyang<sup>[8]</sup>方法进行。

5. 出血活性测定，按Kondo<sup>[9]</sup>方法进行

6. 致死活性，禁食12小时的小白鼠，每组4只均按0.2mg蛇毒/20g体重注入腹腔，24小时后观察死亡的情况。

7. 蛋白水解酶活性，按Rick<sup>[10]</sup>(1963年)的方法进行。

8. 精氨酸脂酶活性的测定，按屈贤铭<sup>[11]</sup>等人的方法进行。

9. L—氨基酸氧化酶活性测定，按Wellner<sup>[12]</sup>等人方法进行。

10. 磷脂酶A<sub>2</sub>活性测定，按Weils<sup>[13]</sup>方法进行。

11. 家兔血压的测定，家兔1.5~2Kg/只，用乌拉坦1.5g/Kg进行麻醉，用液体传导系统直接测量颈总动脉血压，同时在生理仪上进行血压变化的测定。

## 3 结果

### 3.1 白眉蝮蛇毒中降血压组份的分离纯化

DEAE—Sephadax A<sub>50</sub>柱层析：粗毒2g溶于20ml左右0.02M Tris—HCl pH8的缓冲液中，离心(600xg, 10min)，取上清液加于柱上(3.5×75cm)，第一级洗脱用0.02M Tris—HCl pH8缓冲液，第二级洗脱用0~0.5M NaCl配于同一缓冲液中，为直线梯度，第三级为含0.5M NaCl的同一缓冲液洗脱，结果见图1，测免动脉血压，其中峰4, 5, 6, 7均有降压作用，但峰5降压作用最强，最后将此峰收集，浓缩，结果见表1

表1粗毒经DEAE—sephadex A—50柱层析分离后各组份对家兔血压的影响

组份	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
血压 mmHg	//////	124→	116	102	→94	88→	90→	////	////	////	80→	////	////	////	////	80→	////	////	////	////
		106	36	30	→30	121	60				121					121				

2 Sephadex—G75 柱层析：将第五组份浓缩后上 Sephadex—G75 层析柱(3×50cm)，以生理盐水洗脱，共分出五个峰，其中第三峰有降压作用，结果见图 2，将该峰收集、脱盐、浓缩，经丙烯酰胺电泳测定、降血压组份呈均一的蛋白质带，结果见图 3，其中一组用糖蛋白染色鉴定，该组份不含碳水化合物，是不含糖的蛋白质。

### 3.2 白眉蝮蛇毒中降压组份的理化性质

1. 等电点测定： $PI = 6.6$

2. 分子量测定：用 SDS 聚丙烯酰胺电泳法，以胰高血糖素，细胞色素 C 及胰凝乳蛋白酶原 A 为标准蛋白质，测其分子量为 17500 道尔顿，结果见图 4。

3. 降压组份的酶学性质：

经用上述各种酶活性及毒性测定方法，未测出该降压组份有蛋白水解酶、磷脂酶  $A_2$ ，L-氨基酸氧化酶等活性，也无出血，抗凝血和纤溶活性，但具有精氨酸酯酶活性，其酶活比为  $5.00 \mu\text{mol}/\text{min mg}$ 。

4. 降压组份对家兔血压的影响

粗毒经 Sephadex— $A_{50}$  分离所得第五峰，按家兔  $1\text{mg}/\text{kg}$  的剂量注入，其血压从  $116\text{mmHg}$  降至  $36\text{mmHg}$ ，近 1 小时后又升至  $48\text{mmHg}$ ，但无法恢复正常。

将第五峰经 Sephadex—G75 分离后，所得第三峰按家兔  $0.1\text{mg}/\text{kg}$  的剂量注入，其血压从  $98\text{mmHg}$  下降至  $40\text{mmHg}$ ，均 9 分钟后恢复正常。

## 4 讨论

我们利用柱层析的方法从长白山白眉蝮蛇毒中分离纯化了降血压组份，它是一种不含碳水化合物的蛋白质，不具有蛋白水解酶，磷脂酶  $A_2$ ，L-氨基酸氧化酶，抗凝血，出血以及纤溶活性，因此该组份不同于王玉珍<sup>[5]</sup>等人从尖吻蝮蛇毒中分离纯化的降压组份。

Viljoen<sup>[14]</sup> et al (1979)，管利丰<sup>[15]</sup> (1982) 等人认为，蝮蛇毒中具有精氨酸酯酶活性的酶有三种，即类凝血样酶，激肽释放酶，纤溶酶，我们已对尖吻蝮蛇毒中的类凝血样酶<sup>[16]</sup>，纤溶酶以及白眉蝮蛇毒中的类凝血样酶进行研究，白眉蝮蛇的 HTC 无论是分子量，等电点和酶学性质与它们都不一样。

激肽释放酶在体内的功能是能使激肽原释放激肽，引起毛细血管舒张，血压下降等作用。白眉蝮蛇毒中的 HTC 也不是激肽释放酶，在家兔中注入 HTC 以后在激肽释放酶的作用下是否释放出能降血压的小肽或者是一种具有降压作用的新的蛋白质，还有待于对它的作用机理作进一步的研究阐明。

我国蝮蛇分布较广，数量较多，东北白眉蛇毒资源丰富。而且有一定的药用价值。覃公平<sup>[17]</sup>等人已从白眉蝮蛇毒中研制出抗血栓针剂，用于心血管病的治疗，并取得很好的结果我们将该蛇毒经 DEAE—Sephadex  $A_{50}$  柱层析分离共得二十个峰，其中峰 5 和峰 6 降血压较强。尤其第 5 峰最强，第 6 峰除有降压作用外，还有纤溶活性和出血活性，因此我们选用峰 5 进一步分离纯化，得到了聚丙烯酰胺凝胶电泳均一的降血压组份，这对进一步研究白眉蝮蛇毒的毒理和药理提供了一定的依据，对于开辟蛇毒的综合利用和治疗高血压病提供了新的途径，要弄清该降血压组份的机理，还需在生理、药理和生化方面作大量的工作。



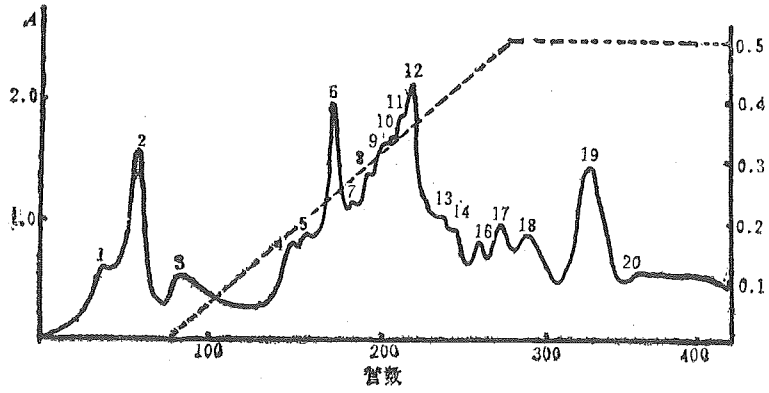


图 1 白眉蝮蛇毒的 DEAE—Sephadex A<sub>50</sub> 柱层析

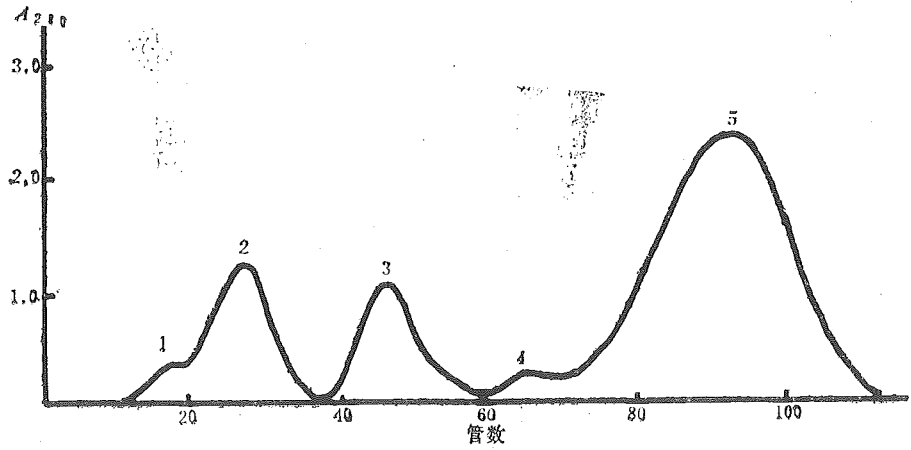


图 2 HTC 进一步用 Sephadex—G75 柱层析分离纯化

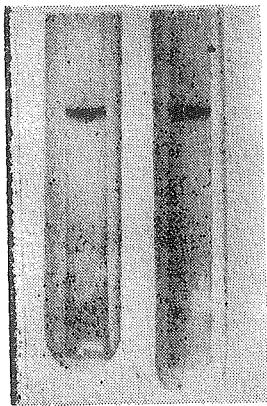


图 3 HTC 的聚丙烯酰胺凝胶电泳, 胶浓度为 7%

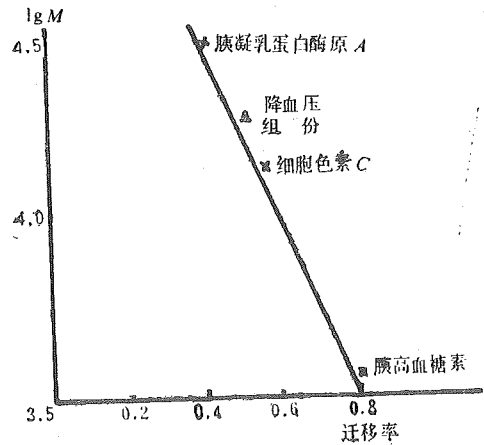


图 4 用 SDS—PAGE 方法测定 HTC 分子量

## 参 考 文 献

- [1] Roche, et al. *J. Physiol.*, 156 (1949), 261.
- [2] Oshime, et al., *Toxicon*, 7 (1969), 229.
- [3] Haddy, et al., *Hand book Exp. Pharmacol.*, 25 (1970).
- [4] Rothschild, et al., *Toxins of Animal and Plant Origin 2* (1972).
- [5] 王玉珍等, 中国药理学报, 9(4) (1988), 334.
- [6] 孙册等凝集素 (1986) 科学出版社, 21.
- [7] Cheng, H, C, et al. *Toxicon*, 4 (1967) 235.
- [8] Ouyang, et al. *Biochim. Biophys. Acta*, 420 (1976) 298.
- [9] Kondo, et al., *Jap. J. med. Sci. Biol.* 13 (1960), 43.
- [10] Rick, W. *Methods of enzymatic analysis*. 1st ed. N Y: Academic press, (1963); 800—23.
- [11] 屈贤铭等, 生物化学与生物物理学报, 3 (1963), 229.
- [12] Wellner, et al., *Methods in Enzymology*, 17 (1971), Part B.
- [13] Weils, et al., *Biochemistry*, 8 (1969), 414.
- [14] Viljoen, et al., *Toxicon*, 17 (1979), 145.
- [15] 营利丰等, 生物化学与生物物理学报, 14 (1982) 302
- [16] 王淳等, 动物学研究, 2 (1981), 89.

## Purification and Properties of the Hypotensive Component of Agkistrodon Halys Ussuriensis Venom

Wang Chun, Huang Wanzhi, He Sigian

(Department of Biology, USTC)

Qin Gongping

(238 Hospital, P. L. A.)

### Abstract

A Hypotensive component (HTC) has been isolated and purified from *A. H. ussuriensis* venom by means of the chromatography of DEAF-Sephadex A-50 and Sephadex G-75.

HTC has been proved to be homogeneous by polyacrylamide gel disc electrophoresis. Its molecular weight is 17500 by SDS-PAGE and PI is 6.6.

Biochemical analysis has shown that the HTC does not contain saccharide,

HTC shows neither caseinolytic L-amino and oxidase or phospholipase A<sub>2</sub> activities, nor hemorrhagic, fibrinolytic anticoagulant, thrombin-like or lethal activities, while it does have arginine ester hydrolase activities.

An extinct decrease of blood pressure in rabbits after iv HTC 0.1 mg/kg was observed. The HTC caused a rapid decrease of blood pressure from 98mm Hg to 40 mm Hg, and it almost returned to its original value after a few minutes.

**Key words.** *Agkistrodon halys ussuriensis*, venom, hypotensive component, enzyme activities.

# 我校实验废水水质情况调查 和评价方法研究

李龙泉 朱玉瑞 张贤萱 周俊英  
何友昭 陈怀亮 金谷 淦五二

(应用化学系)

## 摘 要

本文根据一年来对我校有关实验楼排水水质的监测结果,确定了十一个污染参数,采用综合污染指标,评价了水质。其中对 pH 污染指数提出了新的计算方法。本文还对监测结果进行了全面分析,并提出了防止水质污染的具体建议。

**关键词:** 水质调查, 水质监测, 水质评价, 环境化学。

我校化学楼、物理楼以及结构和成份分析中心实验室等,在长年教学和科研中产生大量废水,其中含有各种对环境有害的成份。为了保护环境,了解这些废水的水质情况,我们进行了为期一年的监测,大致掌握了有关排水点水质的情况,获得基本数据。在调查的数据处理中,采用了综合污染指标,把对地面水水质评价的方法推广应用到对排水口水质评价中来,并且提出了 pH 污染指数的新的计算方法。本工作作为高等院校或科研单位的实验废水水质调查提供了有益的经验。

## 1 采样点分布

我校实验废水的主要排放地为化学楼、物理楼以及结构和成份分析中心实验室(以下简称“中心实验室”)。废水排放的路线见图1和图2。由此确定了五个主要采样点:

采样点 I: 化学楼废水排放口; 采样点 II: 物理楼废水和中心实验室部分废水排放口; 采样点 III: 中心实验室部分废水排放口; 采样点 IV: 我校对外废水排放口(北出水口); 采样点 V: 我校对外废水排放口(东出水口)。

图1中,在西池塘内有一隔墙,使化学楼排放的废水贮存在内塘,通过溢流孔与西池塘水相通。除以上五个主要采样点外,我们对东池塘、西池塘和内塘的水质也进行了分析。

1988年11月11日收到。

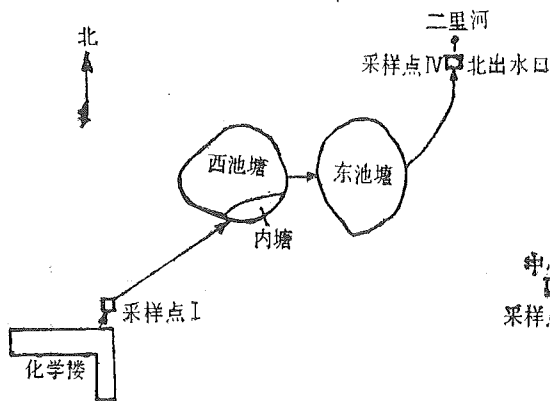


图 1 化学楼废水排放路线

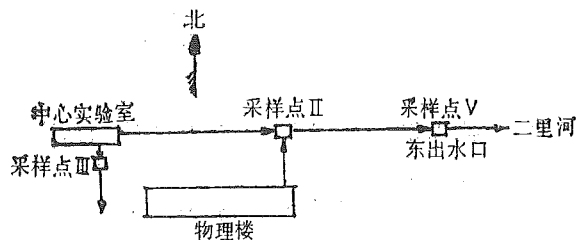


图 2 物理楼和中心实验室废水排放路线

## 2 水质评价参数

为对采样点的水质进行评价，我们采用综合污染指标<sup>[1]</sup>

$$P = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n P_i$$

其中， $n$  为污染参数数量。本调查中选用 11 个污染参数：pH、COD（化学耗氧量）、BOD（生化需氧量）、Hg、As、Cd、Pb、Cr、CN 酚和 F。式中  $P_i$  为污染指数，其值按下式计算：

$$P_i = \frac{\bar{C}_i}{S_i}$$

其中， $S_i$  为相应污染参数排放标准（见表 1）， $\bar{C}_i$  为该污染参数平均实测浓度：

$$\bar{C}_i = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m C_i$$

其中， $m$  为测定次数， $C_i$  为各次实测浓度。各污染参数的测定方法均按卫生部规定的标准分析方法进行。

表 1 各污染参数排放标准

污染参数	pH	COD	BOD	Hg	As	Cd	Pb	Cr	CN	酚	F
排放标准	6.0~9.0	100	60	0.05	0.5	0.1	1.0	0.5	0.5	0.5	10

注：除 pH 外，单位均为 mg/l，下同。

各污染参数中，由于 pH 的特殊情况，其污染指数不能按上述公式计算，对此 Nemerow<sup>[2]</sup> 和金士博<sup>[3]</sup> 提出了有关的计算公式，前者公式不尽合理，而后者公式中有不定系数，使用不便，故我们提出下列新的计算公式

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{S_{\min} - \bar{C}_i}{7.0 - S_{\min}} \\ \frac{7.0 - \bar{C}_i}{7.0 - S_{\min}} \\ \frac{\bar{C}_i - 7.0}{S_{\max} - 7.0} \\ 1 + \frac{\bar{C}_i - S_{\max}}{S_{\max} - 7.0} \end{array} \right. \begin{array}{l} C_i < S_{\min} \\ S_{\min} \leq C_i \leq 7.0 \\ 7.0 \leq C_i \leq S_{\max} \\ C_i > S_{\max} \end{array}$$

式中各  $\bar{C}_i$  值为相应  $C_i$  在不同区间内的平均值,  $S_{\min}$  和  $S_{\max}$  分别为 pH 标准的下限和上限(对排水来说,  $S_{\min} = 6.0$ ,  $S_{\max} = 9.0$ )。将各区的值加权平均后即得 pH 的总污染指数 ( $P_i$ ), 各权重为该区间内数据的个数与总测定次数的比值。

该公式计算简便, 并可反映出超标 pH 值的较大影响。

### 3 评价结果

根据一年来采样分析结果, 利用上述公式计算出各污染参数的污染指数和各采样点的综合污染指标, 列于表 2。

对化学楼废水流经的池塘水, 进行分析的结果发现, 各污染参数的单次测量浓度与地面水水质标准相比, 除 BOD 和 Hg 以外, 无一超标。各污染参数的平均浓度列于表 3。

表 2 各采样点的水质评价结果

污染参数	污 染 指 数				
	采样点 I	采样点 II	采样点 III	采样点 IV	采样点 V
pH	0.136	0.240	0.415	0.322	0.230
COD	1.042	0.343	0.497	1.682	0.465
BOD	0.828	0.098	0.058	1.271	0.202
Hg	0.011	0.106	0.074	0.027	0.011
As	0.009	0.007	<0.001	0.009	0.006
Cd	0.134	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001
Pb	0.121	0.001	0.004	0.003	<0.001
Cr	0.149	0.016	0.083	0.001	0.002
CN	0.008	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001
酚	0.010	<0.001	0.036	0.004	<0.001
F	0.028	0.048	0.038	0.016	0.022
综合污染指标	0.225	0.078	0.110	0.303	0.085

表 3 池塘水水质分析

污染参数	地面水	平均浓度		
	水质标准	东池塘	西池塘	内塘
pH	6.5~8.5	8.0	7.7	7.6
BOD	3~4	8.8	8.6	3.5
Hg	0.001	0.0016	0.0006	0.0008
As	0.04	0.003	0.002	0.001
Cd	0.01	0.0019	—	<0.001
Pb	0.1	0.002	<0.001	0.002
Cr	0.05	<0.001	<0.001	0.001
CN	0.05	<0.004	<0.004	<0.004
酚	0.01	<0.002	<0.002	<0.002
F	1.0	0.33	0.55	0.44

#### 4 讨论

4.1 若以地面水水质为标准计算综合污染指标,其值小于0.2时,可视为“清洁”,其值为0.2~0.4时,可视为“尚清洁”<sup>[1]</sup>。本研究以排水标准计算,采样点I和IV的综合污染指标数值在0.2~0.4之间,其它各采样点的综合污染指标数值皆小于0.2。虽然由于排水标准浓度高于地面水标准浓度,即使在综合污染指标数值相同的情况下,排水水质仍会劣于地面水水质,但由于本调查中各采样点所得综合污染指标数值都较小,可见对于排水标准来讲,并没有显示出明显污染。

由表2可见,化学楼的排水中(采样点I),每项污染参数均可测出,可见污染程度相对要大,虽然北出水口(采样点IV)的综合污染指标最大,但主要是由COD和BOD造成的,这是由于家属宿舍区的生活污水所致,对环境的危害不如化学楼排水严重。物理楼、中心实验室和东出水口的水质污染较轻。但值得注意的是池塘水中多次发现Hg浓度超过地面水水质标准,平均浓度也接近甚至超过标准,其造成对环境的污染不容忽视。

4.2 我校各实验楼的排水水质并不低劣的主要原因是实验废水和厕所污水合流排放,再加上各种洗涤水和冷却水的大量排放,使含有有毒成份的实验废水受到稀释,有的浓度甚至低于可测浓度。此外,由于水中悬浮物的吸附,使一部分有毒成份沉入底泥。特别是化学楼的排水,先经沉淀池然后再排放到东、西两池塘中,使大量有害成份通过沉淀、吸附、氧化和生物降解等作用得到部分净化,最后在北出水口排放时,有害重金属浓度明显下降,因此表观上看污染并不明显。

4.3 根据排水水质的分析,虽未发现有明显污染,但并不等于我校实验废水的排放并未污染环境,原因是:

(1) 由于有害成份被稀释,其浓度虽然较低,但其总量仍不可忽视,会在环境中积累或被生物富集,最终会破坏环境和危害人体健康。因此,目前国内外开始以总量控制来进行监

测，这可避免单纯以浓度作监测标准的不足。

(2) 很多有害成份转入底泥，在一定条件下会重新释放到水中，或被水中生物吸收、富集，造成对环境的污染。在我校东、西两池塘中曾捕获到不少畸变的鱼类，就是一个明证，这与池塘水中汞含量高是相关的，同时也是与化学楼的废水排放密切相关的。

(3) 实验室中有害成份的排放有一定的随机性，而我们采样也有一定的随机性，故分析数据不易反映出最大污染情况，而只能得到一种统计的结果。同时，综合污染指标只反映出各污染参数的综合情况，不能排除其中个别成份会对环境有严重污染。目前有多种水质评价模式，但都有一定局限性，故只能作为评价的参考，不能因综合污染指标数值较小而掉以轻心。

4.4 根据我们调查的结果和上述讨论，从保护环境出发，特提出如下建议：

(1) 为了进一步了解我校实验废水对环境的影响，有必要对各排水口的底泥及各池塘水中的生物进行分析，特别是其中有害成份的分析。

(2) 对化学楼沉淀池及各实验楼排水口的淤泥应进行彻底清除，并妥善处置。否则会降低沉淀处理效果并存在隐患。

(3) 对各池塘和我校对外排水口的底泥，特别是西池塘中内塘的底泥应经常清除，并妥善处置，以防止污染扩散。

(4) 各实验室处理有害物质时，应进行回收或转化，不得任意排放，危害环境。

致谢：在工作中，得到应用化学系钱明伦副教授以及基建处严琳琳工程师和郭隋生同志的帮助，特此致谢。

### 参 考 文 献

- [1] 王华东等，水环境污染概论，北京师范大学出版社，1984，199~200，
- [2] Nemerow. N. L., Scientific Stream Pollution Analysis, 1974.
- [3] 金士博等，内梅罗污染指数公式与漓江水质评价，环境科学，2，(1980) 1~7，



# Investigation on Laboratory Waste Water at our University and Methods for Evaluation

Li Longquan Zhu Yurui Zhang Xianxuan Zhou Junying  
He Youzhao Chen Huailiang Jin Gu Gan Wuer

*(Department of Applied Chemistry)*

## Abstract

Eleven pollution parameters were determined on the basis of an x one-year investigation on the waste water discharged from several laboratories on campus. The water quality a was evaluated by the comprehensive pollution index and a new method is proposed here for calculating pH pollution index. Based on the results of the investigation, some concrete suggestions are put forward against further water pollution.

**Key words:** water investigation, water evaluation, water detemination, environmantal chemistry.

# 机械串联系统的可靠性

熊会民

卢玉明

(中国科学技术大学)

(东南大学)

## 摘 要

探讨了机械串联系统的可靠性问题。提出了不同工况下、不同可靠性水平的机械串联系统的可靠度的计算方法。对于机械串联系统，乘法法则不是通用的可靠度计算法，它只适用于平稳载荷下工作的高可靠性机械系统。

**关键词：**可靠性，串联系统，乘法法则，最薄弱环节模型。

## 1 意义

设系统是由若干独立的功能单元组成的，当组成系统的任一单元失效时，系统就丧失规定的功能，则该系统为串联系统。一般而言，大多数的机械系统都属于串联系统。目前，机械串联系统的可靠度计算，一般仍采用乘法法则。但是，在实际应用中发现，按乘法法则计算的结果往往和系统实际运行的可靠度不符。例如，Chaddock<sup>[1]</sup>在研究武器的可靠性时，就发觉乘法法则不适合于计算武器系统的可靠度。因此，研究机械系统可靠度的计算方法，对正确设计、预测系统的可靠性具有重要的实际意义。

## 2 功能单元的干涉模型

设单元强度随机变量 $X$ 的概率密度函数为 $f(x)$ ，分布函数为 $F(x)$ ；作用于单元的应力随机变量 $Y$ 的概率密度函数为 $g(y)$ ，分布函数为 $G(y)$ ，那么，根据应力——强度干涉理论<sup>[4,6]</sup>，单元的可靠度

$$R_s = \int_0^{\infty} g(y)[1 - F(y)]dy \quad (1)$$

1988年8月27日收到。

$F(y)$ 为 $F(x)$ 在 $y$ 处的值。

### 3 串联系统可靠度的一般表达式

在串联系统中,犹如链条的强度取决于最弱链环的强度一样,系统的强度或寿命取决于最弱单元的强度或寿命。这样的功能逻辑模型就是串联链式模型或最弱环节模型。

设系统所受的应力为 $Y$ ,其概率密度函数为 $g(y)$ 。考虑理想的情况,即组成串联系统的各单元强度为 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 是独立的且具有相同的分布,分布函数为 $F(x)$ 。则可得系统可靠度<sup>[3,5]</sup>

$$R_s = \int_0^{\infty} g(y)[1-F(y)]^n dy \quad (2)$$

$F(y)$ 的意义同式(1)。

### 4 计算串联系统可靠度的两种极限方法

#### 4.1 乘法法则

设串联系统的各单元的失效是相互独立的,各单元的可靠度分别为 $R_{s1}, R_{s2}, \dots, R_{sn}$ ,根据概率乘法定理,系统的可靠度为

$$R_s = R_{s1} \cdot R_{s2} \cdots R_{sn} = \prod_{i=1}^n R_{si} \quad (3)$$

理想情况下,在规定的时间内,各单元的可靠度相同,式(3)可写成

$$R_s = R_s^n \quad (4)$$

式(3)即计算串联系统可靠度的乘法法则。可以证明,乘法法则算出的是串联系统可靠度的下限<sup>[2]</sup>。

#### 4.2 最弱环节模型

在串联系统中,若系统的失效是由最弱单元的失效所致,则系统的可靠度就等于最弱单元的可靠度,即

$$R_s = R_s = \min_i R_{si} \quad (5)$$

式(5)即计算串联系统可靠度的最弱环节模型。比较式(1)及式(2),可以看出

$$g(\cdot)[1-F(\cdot)] \geq g(\cdot)[1-F(\cdot)]^n$$

总是成立的。所以,最弱环节模型算出的是串联系统可靠度的上限。

以上分析表明,串联系统的可靠度应处在由两种极限计算方法算出的可靠度之间,即

$$\prod_{i=1}^n R_{si} \leq R_s \leq \min_i R_{si} \quad (6)$$

### 5 系统工况对可靠性的影响

在影响可靠性的诸多随机因素中,系统的使用条件具有决定性的作用。使用条件集中地表现为载荷(广义的)的变化情况。为了研究应力与强度的相对离散性对系统可靠性的影响,定义应力相对离散系数

$$SR = \frac{\sigma_y}{\sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}} \quad (7)$$

$\sigma_s$  为强度随机变量的标准差,  $\sigma_r$  为应力随机变量的标准差。

根据应力相对离散系数  $SR$  的大小, 将载荷分为三类

(i) 剧烈变化载荷  $\sigma_r \gg \sigma_s$ ,  $SR \approx 1$ ;

(ii) 中等变化载荷  $\sigma_r \approx \sigma_s$ ,  $SR \leq 0.7$ ;

(iii) 平稳载荷  $\sigma_r \ll \sigma_s$ ,  $SR \approx 0$ 。

现就两种极限情况进行讨论:

(i) 应力为定值

设应力为定值  $Y_0$ , 则应力标准差  $\sigma_r = 0$ , 应力相对离散系数  $SR = 0$ 。于是, 式 (2) 可以积分

$$R_s = \int_0^{\infty} g(y)[1-F(y)]^n dy = \int_0^{\infty} [1-F(y)]^n d[G(y)] = [1-F(Y_0)]^n \quad (8)$$

式 (8) 中的  $F(Y_0)$  为单元强度小于应力  $Y_0$  的概率, 即单元的失效概率。而单元可靠度

$$R_0 = 1 - F(Y_0)$$

所以

$$R_s = R_0^n \quad (9)$$

式 (9) 与乘法法则是一致的。因此, 乘法法则适合于计算载荷平稳时候的串联系统可靠度。

就大多数机械系统而言, 要获得定值应力的使用条件是很困难的, 只有在特殊要求的情况下, 对环境条件严加控制才能实现。因此, 乘法法则只适用于计算特殊条件下的机械串联系统的可靠度。相反, 在大多数的电子系统中, 一般都能满足定值应力 (电压、电流、温度等) 的工作条件。所以, 在电子系统中, 乘法法则得到广泛的应用。

(ii) 强度为定值

设强度为定值  $X_0$ , 则强度标准差  $\sigma_s = 0$ , 应力相对离散系数  $SR = 1$ 。如果应力标准差  $\sigma_r \gg 0$ , 则表示载荷变化剧烈, 工况恶劣。这种情况下, 式 (2) 的积分是

$$R_s = \int_0^{\infty} g(y)[1-F(y)]^n dy = \int_0^{X_0} g(y) dy = G(X_0) \quad (10)$$

$G(X_0)$  为单元工作应力小于单元强度的概率, 即单元的可靠度, 故

$$R_s = R_0 \quad (11)$$

式 (11) 与最薄弱环节模型是一致的。因此, 最薄弱环节模型适合于计算载荷变化剧烈时的串联系统可靠度。

以上讨论了两种极端工作条件下的串联系统可靠性问题。它表明, 在一般工作条件下, 串联系统的可靠度应处在系统可靠度的上、下限之间, 如式 (6) 所示。

## 6 串联系统可靠度的一般算法

在中等变化载荷条件下工作的大多数机械系统, 可靠度按式 (2) 计算。作为算例, 假设单元强度随机变量  $X$  服从威布尔分布, 分布函数为

$$F(x) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{x-x_0}{\theta-x_0}\right)^\beta\right] \quad (x \geq x_0 \geq 0) \quad (12)$$

$\beta$  为形状参数,  $x_0$  为位置参数即截尾参数,  $\theta - x_0$  为尺度参数。

系统的工作应力  $Y$  服从正态分布, 概率密度函数为

$$g(y) = \frac{1}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(y-\mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right] \quad (0 < y < \infty) \quad (13)$$

$\mu_y$  为均值,  $\sigma_y^2$  为方差。

系统可靠度为

$$R_s = \int_0^\infty \frac{1}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(y-\mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right] \exp\left[-n\left(\frac{y-x_0}{\theta-x_0}\right)^\beta\right] dy \quad (14)$$

一般, 式 (14) 不能直接积分, 可采用数值积分法或随机模拟法近似求解。限于篇幅, 不推求解过程, 并只列出部分计算结果, 如图 1~3 所示。图 1~3 中, 曲线 1 为系统可靠度上限, 曲线 2 为载荷变化中等时候的系统可靠度, 曲线 3 为系统可靠度下限。

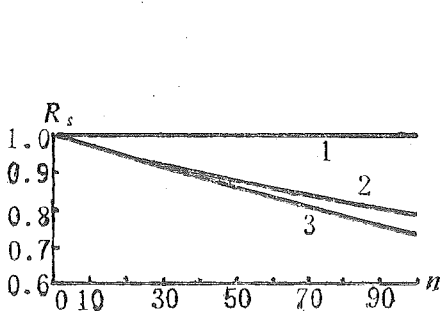


图 1  $\beta=2$   $\theta=72$   $x_0=54$   
 $\mu_y=54$   $\sigma_y=1$   $SR=0.1191$

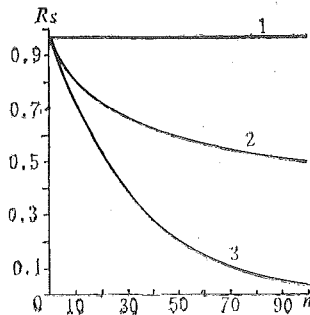


图 2  $\beta=3$   $\theta=72$   $x_0=54$   
 $\mu_y=54$   $\sigma_y=5$   $SR=0.6502$

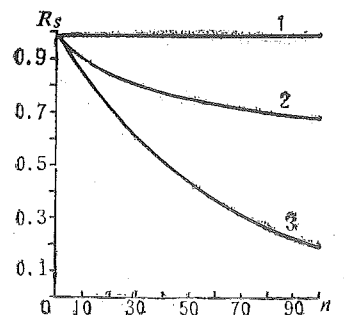


图 3  $\beta=4$   $\theta=72$   $x_0=54$   
 $\mu_y=54$   $\sigma_y=5$   $SR=0.7376$

从计算结果可知, 当应力相对离散系数较小时, 载荷变化中等时的系统可靠度与由乘法法则算出的系统可靠度下限接近。随着  $SR$  的增大, 载荷变化中等时的系统可靠度开始偏离系统可靠度下限。

由威布尔分布的特性可知, 形状参数  $\beta$  愈大, 分布的离散性愈小, 总体的质量愈高。若单元是在正常的生产条件下制造的, 一般, 形状参数  $\beta \geq 3$ 。由图 2~3 的曲线可看出, 当  $\beta \geq 3$  时, 在载荷变化中等的情况下, 系统可靠度近于系统可靠度上、下限的平均值。

## 7 几点看法

综上所述, 对于正常生产条件下制造的机械系统的可靠性, 我们提出如下看法:

(1) 乘法法则适合于计算在平稳载荷下工作的、具有高可靠度单元 ( $R_0 \geq 0.9995$ ) 的

机械系统及电子系统的可靠度。为保证固有设计可靠性的实现，应对使用条件严加控制。

由本文的理论分析及小概率事件原理可知，乘法法则算出的可靠度是系统可靠度的下限。系统的实际可靠度，一般要高于下限。若使用条件难以严格控制，载荷变化剧烈，则下限就是系统的实际可靠度。

虽然 Chaddock 在研究武器的可靠性时，根据乘法法则不适合于计算武器系统的可靠度的事实，得出“不存在这种关系（指乘法法则）……”<sup>[1]</sup>的结论。但是，我们对国产收录机芯的理论计算及试验证实，对高可靠性机械系统（机芯的功能可靠度  $R_s = 0.9982$ ），乘法法则是正确的。因此，Chaddock 和 Carter 的论断<sup>[1]</sup>值得商榷。

(2) 若系统具有明显的薄弱环节，则此薄弱环节即为系统的最弱单元。一般而言，单元可靠度  $R_s \leq 0.90$ ，可以认为是最弱单元。这类系统在载荷变化剧烈的条件下工作时，最弱单元最先失效。因此，最弱单元的可靠度是系统可靠度的上限。由于使用条件恶劣，载荷变化情况难以预测，一些可靠度不太高的单元 ( $R_s \leq 0.99$ ) 也可能失效，系统的实际可靠度应等于这些失效单元可靠度的乘积，小于上限。

如这类系统的工作条件优良，载荷变化平稳，则系统的实际可靠度接近上限。

(3) 对于在载荷变化中等的条件下工作具有一般可靠性水平的机械系统。由于这类系统的单元失效，既不服从最弱环节模型，又不是小概率事件。所以，其可靠度介于系统可靠度上、下限之间。若各单元的制造质量可以保证，则系统的可靠度近于系统可靠度上、下限的平均值。

上述看法是在假设各单元相互独立且具有相同分布的理想情况下分析得到的，对于实际的机械系统尚须进一步研究。不妥之处，请批评指正。

### 参 考 文 献

- [1] Carter A D S, Mechanical Reliability/2nd ed., Macmillan Education Ltd, London, 1986, 25—32.
- [2] David K Lloyd and Myron Lipow, Reliability: Management, Methods, and Mathematics, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1962, 220—238.
- [3] Kapur K C and Lamberson L R, Reliability in Engineering Design, John Wiley & Sons, N. Y., 1977, 40—45, 212—216.
- [4] Patrick D T and O'connor, Practical Reliability Engineering/2nd ed., John Wiley & Sons, N. Y., 1985, 101—105.
- [5] Moss T R ed., Mechanical Reliability, Based on Papers Given at a Oneday Symposium, IPC Science and Techanology, Westbury, 1980, 36—47.
- [6] 卢玉明编, 机械零件的可靠性设计, 高等教育出版社, 1989.

# A Reliability of Mechanical Series System

Xiong Huimin

*(China University of Science and Technology)*

Lu Yuming

*(Southeast University)*

## Abstract

Authors deal with a reliability problem of the mechanical series system, and advances the reliability calculating method of mechanical series system that works on different working conditions and has different reliability standards. Authors hold that the product rule isn't current reliability calculation method for the mechanical series system. The product rule is only suitable for a high level reliability mechanical system working on smooth load condition.

**Key words:** reliability, series system, product rule, the weakest link model.

# 茶树体内游离氨基酸对儿茶素代谢的影响

王传友\* 黄雨初

(安徽农学院茶业系)

(中国科技大学生物系)

## 摘 要

茶树体内儿茶素代谢受 C/N 代谢平衡状态所制约。通过氨基酸对  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的影响,发现 Glu、Lys 有正效应,而 Ala、phe 有负效应。分析不同施氮量茶梢中的游离氨基酸,结果表明,体内 Glu、Ala、phe、Thr 等含量及代谢活性的不同,至少是影响儿茶素含量的原因之一。

**关键词:** 茶树 (*Camellia sinensis*, L.), 儿茶素, 代谢, 氨基酸。

茶树体内儿茶素及其没食子酸酯是茶树体内类黄酮物质的主要成分,并且是茶树新梢叶片的特征性成分之一,与成品茶的品质关系密切<sup>[1-3]</sup>。因此,研究茶树体内儿茶素的代谢作用,对于认识体内物质的转化过程,以及了解茶叶品质的形成机理,为有目的地进行控制,都具有积极意义的。

儿茶素在体内的代谢过程受多种因素的影响<sup>[4,5]</sup>。本文旨在就茶树体内游离氨基酸对儿茶素的代谢作用进行探讨。儿茶素代谢与体内 C/N 代谢水平及平衡有关系<sup>[1,3]</sup>,而体内游离氨基酸具有较高的含量和代谢活性,能积极地参与体内的物质代谢过程<sup>[6]</sup>。并且氨基酸代谢亦易受体内 C/N 代谢水平影响<sup>[1]</sup>,不同施肥量及其它栽培条件,常会引起体内儿茶素及氨基酸含量水平的不同,并且两者都是茶叶品质的构成因子。

## 1 实验部分

### 1.1 实验材料

早晨 6-7 时于安农实验茶园采摘一芽二叶新梢(福丁无性系、五年生),盛于带水的烧杯中,迅速带回实验室,洗净,在水中剪去基部 2-3mm,吹去表面的水分,称重。

### 1.2 氨基酸的导入和同化 $^{14}\text{CO}_2$ 过程

用小塑料杯将每组的新梢装入,往其中加入非标记氨基酸 (0.01M, 1ml), 放入小型

1988年6月20日收到。

\*现在安徽省茶叶进出口公司工作



玻璃密闭箱内, 并使其同化  $^{14}\text{CO}_2$ , 进行光合作用 (1hr, 2.3-2.6Lux, 25°C), 然后置于室内自然同化 1hr, 随即进行代谢产物分离、制样。

### 1.3 代谢产物的分离

不同处理的茶树, 体内各代谢物 (多酚类、咖啡碱、有机酸、氨基酸、碳水化合物) 的系统分离采用离子交换树脂柱法, 具体方法参见西条了康、竹尾忠一<sup>[7]</sup>的报道。

### 1.4 放射活性的测定

200ul 样液加入闪烁液 5ml, 用国产 FJ-2101(G) 型双道液体闪烁计数器测定。

### 1.5 氨基酸的提取和自动分析

参见朱广廉等的方法<sup>[8]</sup>, 茶梢 10 克, 快速剪碎后加入 80ml 沸 80% 乙醇, 保持微沸 3 分钟, 冷后组织匀浆 3 分钟, 抽滤, 残渣用 30、20、10ml 80% 乙醇洗净抽滤三次, 滤液合并, 定容至 150ml, 取 30ml 于 85°C 减压蒸干, 用 0.02N HCl 100ml 溶解, 过滤并定容至 150ml。取 1ml 试液加 1ml 2% 磺基水杨酸混匀后静置片刻, 于 15,000rpm 离心 5 分钟, 上清液上 835 日立 (Hitachi) 氨基酸自动分析仪分析。

## 2 结果和讨论

### 2.1 氨基酸对 $^{14}\text{CO}_2$ 掺入儿茶素的影响

将非标记的氨基酸掺入茶梢, 同时使茶梢同化  $^{14}\text{CO}_2$ , 观察  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的放射性。从实验组与对照组的比较可看出氨基酸的作用。由表 1、2 得出, 不同种类氨基酸对茶梢同化  $^{14}\text{CO}_2$  形成各种代谢产物的影响是不同的。其中谷氨酸、赖氨酸能提高  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的比率, 而丙氨酸、苯丙氨酸则降低  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的比率。亦即不同的氨基酸由于所具的代谢活性不同, 它们及其中间转变物所参与的体内物质转化途径也不能不同; 以及不同的氨基酸可能提高整体代谢水平 (如谷氨酸、赖氨酸), 或改变体内 C/N 代谢平衡 (如丙氨酸、苯丙氨酸), 这样, 就引起了某些代谢产物含量增加或减少的差异。

表 1 非标记氨基酸对  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的影响 (dpm/克干重芽梢)

提取物	处 理 方 法				
	Ala + $^{14}\text{CO}_2$	phe + $^{14}\text{CO}_2$	Lys + $^{14}\text{CO}_2$	Glu + $^{14}\text{CO}_2$	$^{14}\text{CO}_2$ (对照)
总提取物	2832679	4731448	3772020	2040900	8212500
咖啡碱	157624	236797	204840	214272	543924
儿茶素	60383	119886	151260	222900	286320
氨基酸	237874	183289	241920	225720	452856
有机酸	70970	57952	148428	207504	38664
碳水物	810340	1574521	1604880	924000	2754060

表 2 氨基酸对  $^{14}\text{CO}_2$  掺入各代谢物效率的影响 (%)

提取物	处 理 方 法				
	Ala + $^{14}\text{CO}_2$	phe + $^{14}\text{CO}_2$	Lys + $^{14}\text{CO}_2$	Glu + $^{14}\text{CO}_2$	$^{14}\text{CO}_2$ (对照)
咖啡碱	5.56	5.00	5.43	10.50	6.62
儿茶素	2.13	2.53	4.01	10.92	3.49
氨基酸	8.40	3.87	6.41	11.06	5.51
有机酸	2.51	1.23	3.94	10.17	0.47
碳水物	28.61	33.28	42.55	45.27	33.54

由表 1 看出, 由于氨基酸的掺入,  $^{14}\text{CO}_2$  掺入儿茶素的放射活性都比对照组低, 同时, 咖啡碱等其它代谢产物的放射活性也比对照组低, 而有机酸则由于氨基酸的掺入, 其放射活性都比对照组高, 这说明体内氮素水平的改变, 碳素代谢以至整个代谢平衡都将受到深刻的影响。

### 2.2 不同施氮量的茶梢中游离氨基酸的变化

选用福丁无性系五年生茶树, 在秋季以每棵增施 0.5kg 硫酸铵作为高氮处理, 以正常施肥量的茶树作对照, 测得其茶梢儿茶素含量分别为 17.73% 和 20.85%, 同时测得两者的游离氨基酸组成和含量如图 1、2 和表 3 所示。

试验结果表明, 不同施氮量的茶树, 不仅其游离氨基酸的含量不同, 其儿茶素含量也是

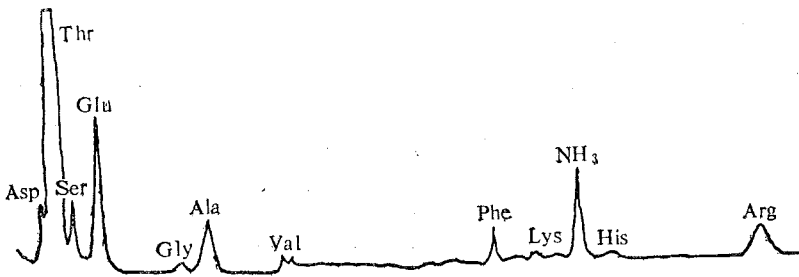


图 1 正常施肥的茶梢中氨基酸的自动分析图

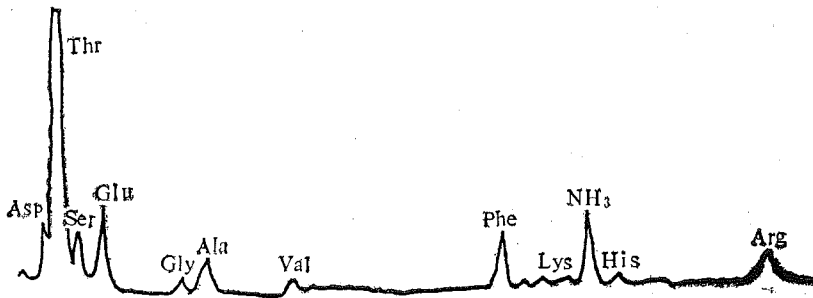


图 2 高氮处理的茶梢中氨基酸的自动分析图

表 3 不同处理茶梢中氨基酸组成的自动分析结果 (单位:  $\mu\text{g}$ )

名称	ASP	Thr	Ser	Glu	Gly	Ala	Cys	Val	Phe	Lys	NH <sub>3</sub>	His	Arg
正常施肥	63.60	1030.20	39.54	232.07	7.89	87.53	27.66	11.49	49.07	8.78	27.30	10.99	115.50
高氮处理	54.96	1280.18	27.37	123.47	7.54	48.76	4.32	9.76	75.16	10.53	22.75	11.85	104.80

不等的。高氮处理的茶梢中，苏氨酸、苯丙氨酸显著高于对照组，而谷氨酸、丙氨酸却明显低于对照组。儿茶素含量也是高氮茶梢低于正常施肥的茶梢。结合实验一的结果，可以认为，体内谷氨酸、丙氨酸、苯丙氨酸和苏氨酸等含量和代谢活性的不同，至少是影响儿茶素含量的因素之一。

因此，通过施肥措施来控制体内 C/N 水平，可以调节体内氨基酸和儿茶素等成分的含量，从而有利于茶叶优良品质的形成。

### 3 小结

氨基酸对儿茶素代谢的作用，其机制可以从两个方面来认识。第一，氨基酸在体内物质代谢动态中，处于不同的代谢途径的交叉点，不同种类的氨基酸掺入儿茶素代谢的程度亦不同。第二，氨基酸及其中间转变物能够提高整体代谢水平或改变体内的 C/N 平衡，而这种提高或改变的机制可能是受有关酶系所控制。

### 参 考 文 献

- [1] 安徽农学院主编，茶叶生物化学，农业出版社，1979，42-46。
- [2] 王泽农译，关于茶叶生物化学的研究，科技文献出版社，1957，12。
- [3] 王泽农，茶叶生化原理，农业出版社，1981，200-206。
- [4] 王传友等，环己六醇在茶树儿茶素生物合成中的作用，中国科学技术大学学报，17 (1987)，469-474。
- [5] 戴伦凯等译，黄酮类化合物，科学出版社，北京，1983，142-225。
- [6] 植化翻译组译，植物生物化学，科学出版社，北京，1984，221-232。
- [7] 西条了康、竹尾忠一，茶技研，1978，54，37-43。
- [8] 朱广廉等，植物学通报，2 (1984)，47-50。

# The Effects of Free Amino Acids on the Metabolism of Catechins in the Tea Plant

Wang Chuanyou

*(Anhui Agricultural College)*

Huang Yuchu

*(China University of Science and Technology)*

## Abstract

It is concluded that amino acids can plunge into carbon metabolism and promote the whole metabolism or change C/N balance of the tea plant.

We discovered that Glu and lys have right effects, while Ala and phe have negative effects by influence of amino acids on  $^{14}\text{CO}_2$  plunging into catechins.

Contribution of every kind of amino acid to the biosynthesis of catechin is different from each other. The result suggested that, the difference in quantity and metabolism activity of Glu, Phe, Ala and Thr is at least one of the reasons that affect the quantity of catechin in the tea shoots.

**Key Words,** tea (*Camellia sinensis*, L) catechin metabolism, amino acid



# 中国科学技术大学学报编委会

主 编: 龚 昇

编 委: 冯克勤 伍小平 刘耀阳

张懋森 郭自强 钱景仁

杨延龄 袁克林

## 中 国 科 学 技 术 大 学 学 报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(季刊)

(Quarterly)

第 20 卷 第 1 期 (总第 67 期)

Vol.20 No.1 1990

---

编辑出版: 《中国科学技术大学学报》编辑部

(安徽省合肥市金寨路96号)

印 刷: 中国科学技术大学印刷厂

国内总发行: 合 肥 市 邮 局

订 购 处: 全 国 各 地 邮 局

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司

(中国国际书店,北京399信箱)

Edited and Published by,

The Editorial Board of

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY

OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

96 Jinzhai Road of

Heifei, Anhui, China 230026

Distributed by,

China International Bookstore

P.O. Box 399

Beijing, China

---

国内统一刊号: CN34—1054

邮政代号: 26—31

1990年3月出版

邮 政 编 码: 230026

国外代号: Q527

ISSN 0253-2778

# 中国科学技术大学学报

第20卷 第2期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No.2

2

1990





# 中国科学技术大学学报

第 20 卷 第 2 期 (总第 68 期)

## 目 录

关于能量正交板元的形函数空间.....	石钟慈 (127)
关于指数为 $(h+1)$ 的临界 $h$ 棱连通图的最大棱数.....	徐俊明 (132)
Pd/c-Si 界面反应研究.....	沈 波 施一生 赵特秀 许振嘉 (143)
BPGR 积木块自动布局和总体布线系统.....	陈洪亮 王东生 庄镇泉 (149)
锌-钒酸酐固态蓄电池.....	林枫凉 薛立新 朱 斌 俞文海 (159)
H <sub>2</sub> 在 Ni 和 Ni-Mn 催化剂表面吸附的 MS-X $\alpha$ 研究 .....	李俊清 王其武 徐立微 王 俭 (165)
矢量量化中的非二元树搜索算法.....	黄胜华 贝昌达 (171)
睡眠脑电波的计算机分析.....	蔡文英 钟龙云 张作生 (177)
岩石层底部切向应力场及地球大地水准面异常.....	傅容珊 (184)
可能最大降水估算中气象因子放大的数值实验.....	汪钟兴 (191)
等离子体彗尾中的扰动波特性.....	李中元 童 彝 (197)
用可靠性因子 $R$ 确定表面结构.....	胡兹莆 (203)
清洁 Nb(100) 面的结构.....	潘必才 胡兹莆 (208)
聚乙烯的光敏交联.....	徐文英 严 庆 Bengt Rånby (213)
聚对苯二甲酸丁二醇酯-聚 $\epsilon$ -己内酯嵌段共聚物链化学结构研究 .....	罗筱烈 马德柱 蒋文博 (220)

## 研 究 简 报

一台慢正电子束实验装置.....	韩荣典 翁惠民 郭学哲 谢 力 (227)
含氢单晶硅的 ESR 面效应.....	苏 昉 金嗣昭 (232)
$\Sigma$ 树结构与更新最小生成树的并行算法.....	江 正 (239)
有机表面活性剂 DPE-III 和 KR-7 对锌电沉积作用机理的研究 .....	倪光明 吴华强 严怡芹 (249)
一种新型光纤温度传感器.....	徐 育 金泰义 章海鹰 (254)

# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No. 2 (Sum No. 68)

## CONTENTS

- On the Space of Shape Functions of an Energy-orthogonal Plate Element  
..... Shi Zhongci (127)
- On the Maximum Size of Critically  $h$ -Edge-Connected Graphs with Index  
Number  $h+1$  ..... Xu Junming (132)
- A Study of the Interfacial Reaction of Pd/c-si  
..... Shen Bo, Shi Yisheng, Zhao Texiu, C.C. Hsu (143)
- BPGR An Automatic Design System for Building-block Placement and  
Global Routing..... Chen Hongliang, Wang dongsheng,  
Zhuang Zhenquan (149)
- Zn-V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Solid State Storage battery..... Lin Fengliang, Xue lixin  
Zhu Bin, Yu Wenhai (159)
- An MS-X<sub>2</sub> Study of H<sub>2</sub> Hdsorbed on Ni and Ni-Mn Catalyst Surfaces  
..... Li Junqing, Wang Qiwu, Xu Liwei, Wang Jian (165)
- The Non-binary Tree Searching Algorithm for Vector Quantization  
..... Huang Shenghua, Bei Changda (171)
- Automatic Analysis of Human Sleep Electroencephalogram (EEG) with  
Microcomputer..... Cai Wenyong, Zhong Longyun,  
Zhang Zuosheng (177)
- Earth's Geoid Anomalies, Mantle Convection and Stress Field  
Under Lithosphere ..... Fu Rongshan (184)
- A Numerical Experiment on the Enlargements of Meteorological  
Factors for Probable Maximum Precipitation ..... Wang Zhongxing (191)
- A Discussion on Some Non-limear Effects as well as Their Stability in  
the Plasma Comets

.....	Li Zhongyuan, Tong Yi (197)
The Surface Structure Determination by Reliability Factor	
.....	Hu Zipu (203)
The Structure of Clean Nb (100) Surface.....	Pan Bikai,
	Hu Zipu (208)
Photoinitiated Crosslinking of Polyethylene	
.....	Xu Wenying, Yan Qing, Bengt Rånby (213)
Chemical Structure on PBT-PCL Segmented Copolymer Chain	
.....	Luo Xiaolie, Ma Dezhu, Jiang Wenbo (226)

### Research Notes

An Apparatus for Producing A Slow-positrons Beam	
.....	Han Rongdian, Weng Huimin, Guo Xuezhe, Xie Li (227)
The Surface Effect of FZ Single Crystal Silicon Grown in Hydrogen Atmosphere on ESR.....	Su Fang, Jin Sizhao (232)
Sum-tree Structure and Parallel Algorithm for Updating Minimum Spanning Tree.....	Jiang Zheng (239)
Study of Organic Sufactants DPE-III and KR-7 on the Action Mechanism of Electrodeposition of Zinc	
.....	Ni Guangming, Wu Huaqiang, Yan Yiqin (249)
A New Type of Optic-fiber Temperature Sensor	
.....	Xu Yu, Jin Taiyi, Zhang Haiying (254)



## 关于能量正交板元的形函数空间

石钟慈

(中科院计算中心)

### 摘 要

本文证明最近 Bergan 等提出的一种能量正交板元的形函数空间实际上等价于通常的 Zienkiewicz 不完全三次元空间。

**关键词:** 有限元法, 数值分析, 能量正交板元。

**中图法分类号:** O242. 21, 65

Bergan 等<sup>[1]</sup>最近提出一种自由公式能量正交板元, 它是一个九参数元, 以三角形单元顶点上的函数值和两个一阶导数值作为单元参数, 它的形函数空间中的三个高阶模态与六个常应变模态能量正交。但在形成刚度阵时却采用所谓的“自由公式”[2], 与通常的有限元方法形成刚度阵有很大的差别。我们已在文[3]中证明, 这种自由公式能量正交元实际上相当于采用一种特殊的插值方法构造形函数, 而刚度阵的计算仍采用常规方法。文[3]并证明了这种非常规元的收敛性。

另一方面, 张飞在本刊发表的的文[4]中指出, 若对 Bergan 自由公式能量正交元的形函数采用常规的插值方式和常规的刚度阵计算, 而不是按自由公式进行计算, 则他所做的数值实验表明, 这个常规的能量正交元与通常已知的 Zienkiewicz 不完全三次元的计算结果几乎等价, 只对特殊的三平行线网格剖分为收敛。

本短文的目的是证明, 常规的能量正交元的形函数空间实际上与 Zienkiewicz 元是相一致的。因此, 两者的数值计算结果几乎等价是不足为奇的。

设三角形单元  $K$  的三个顶点为  $p_i = (x_i, y_i)$ , 记

$$\xi_1 = x_2 - x_3, \quad \xi_2 = x_3 - x_1, \quad \xi_3 = x_1 - x_2; \quad \eta_1 = y_2 - y_3, \quad \eta_2 = y_3 - y_1, \quad \eta_3 = y_1 - y_2.$$

设三角形  $K$  的重心坐标为  $\lambda_i, i = 1, 2, 3$ 。

Bergan 的能量正交元的形函数空间为

$$\tilde{P}(K) = \text{Span}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_1\lambda_2, \lambda_2\lambda_3, \lambda_3\lambda_1, (\lambda_1 - \lambda_2)^3, (\lambda_2 - \lambda_3)^3, (\lambda_3 - \lambda_1)^3\}.$$

Zienkiewicz 元的形函数空间为

$$\tilde{P}(K) = \text{Span}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_1\lambda_2, \lambda_2\lambda_3, \lambda_3\lambda_1, \lambda_1^2\lambda_2 - \lambda_1\lambda_2^2, \lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_2\lambda_3^2, \lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2\}.$$

两个元的节点参数均为形函数  $v$  在单元三顶点上的函数值  $v_i$  及两个一阶导数值  $v_{i,x}, v_{i,y}$ ,  $i = 1, 2, 3$ . 下面证明, 形函数空间  $P(K) = \tilde{P}(K)$ .

其证明如下. 只量证明  $P(K)$  中的九个基函数可以用  $\tilde{P}(K)$  中的其函数的线性组合唯一地表示, 反之亦然.

$P(K)$  的前六个基函数和  $\tilde{P}(K)$  的相同, 因此唯一表示不成问题. 现在考虑  $P(K)$  的后三个基函数. 经过一番运算可以证明

$$\left. \begin{aligned} (\lambda_1 - \lambda_2)^3 &= \lambda_1 - \lambda_2 + \frac{3}{2}(\lambda_2\lambda_3 - \lambda_3\lambda_1) - 4(\lambda_1^2\lambda_2 - \lambda_1\lambda_2^2) + \\ &\quad + \frac{1}{2}(\lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_2\lambda_3^2) + \frac{1}{2}(\lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2), \\ (\lambda_2 - \lambda_3)^3 &= \lambda_2 - \lambda_3 + \frac{3}{2}(\lambda_3\lambda_1 - \lambda_1\lambda_2) + \frac{1}{2}(\lambda_1^2\lambda_2 - \lambda_1\lambda_2^2) \\ &\quad - 4(\lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_2\lambda_3^2) + \frac{1}{2}(\lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2), \\ (\lambda_3 - \lambda_1)^3 &= \lambda_3 - \lambda_1 + \frac{3}{2}(\lambda_1\lambda_2 - \lambda_2\lambda_3) + \frac{1}{2}(\lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_2\lambda_3^2) \\ &\quad + \frac{1}{2}(\lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

至于这种表示的唯一性, 从  $\tilde{P}(K)$  中的基函数的相互独立性即可推出.

反之,  $\tilde{P}(K)$  中的后三个基函数亦可用  $P(K)$  的基函数表示如下

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^2\lambda_2 - \lambda_1\lambda_2^2 &= \frac{2}{9}(\lambda_1 - \lambda_2) + \frac{1}{3}(\lambda_2\lambda_3 - \lambda_3\lambda_1) - \frac{7}{27}(\lambda_1 - \lambda_2)^3 - \\ &\quad - \frac{1}{27}(\lambda_2 - \lambda_3)^3 - \frac{1}{27}(\lambda_3 - \lambda_1)^3 \\ \lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_1\lambda_3^2 &= \frac{2}{9}(\lambda_2 - \lambda_3) + \frac{1}{3}(\lambda_3\lambda_1 - \lambda_1\lambda_2) - \frac{1}{27}(\lambda_1 - \lambda_2)^3 - \\ &\quad - \frac{7}{27}(\lambda_2 - \lambda_3)^3 - \frac{1}{27}(\lambda_3 - \lambda_1)^3 \\ \lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2 &= \frac{2}{9}(\lambda_3 - \lambda_1) + \frac{1}{3}(\lambda_1\lambda_2 - \lambda_2\lambda_3) - \frac{1}{27}(\lambda_1 - \lambda_2)^3 - \\ &\quad - \frac{1}{27}(\lambda_2 - \lambda_3)^3 - \frac{7}{27}(\lambda_3 - \lambda_1)^3 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

这就证明了  $P(K) = \tilde{P}(K)$ .

已知 Zienkiewicz 元的形函数的系数通过节点参数的表示式为 (参见 [5]):

$$\begin{aligned} v &= a_1\lambda_1 + a_2\lambda_2 + a_3\lambda_3 + a_4\lambda_1\lambda_2 + a_5\lambda_2\lambda_3 + a_6\lambda_3\lambda_1 + a_7(\lambda_1^2\lambda_2 - \lambda_1\lambda_2^2) + \\ &\quad + a_8(\lambda_2^2\lambda_3 - \lambda_2\lambda_3^2) + a_9(\lambda_3^2\lambda_1 - \lambda_3\lambda_1^2) \end{aligned} \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned}
 a_i &= v_i, \quad i=1,2,3, \\
 a_4 &= -\frac{1}{2}[(v_{1x}-v_{2x})\xi_3 + (v_{1y}-v_{2y})\eta_3] \\
 a_5 &= -\frac{1}{2}[(v_{2x}-v_{3x})\xi_1 + (v_{2y}-v_{3y})\eta_1] \\
 a_6 &= -\frac{1}{2}[(v_{3x}-v_{1x})\xi_2 + (v_{3y}-v_{1y})\eta_2] \\
 a_7 &= v_1 - v_2 - \frac{1}{2}[(v_{1x}+v_{2x})\xi_3 + (v_{1y}+v_{2y})\eta_3] \\
 a_8 &= v_2 - v_3 - \frac{1}{2}[(v_{2x}+v_{3x})\xi_1 + (v_{2y}+v_{3y})\eta_1] \\
 a_9 &= v_3 - v_1 - \frac{1}{2}[(v_{3x}+v_{1x})\xi_2 + (v_{3y}+v_{1y})\eta_2]
 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

将(2)式代入(3)式并利用(4)我们可以立即写出 Bergan 能量正交元的形函数通过点节参数的显式表示式为

$$\begin{aligned}
 v &= b_1\lambda_1 + b_2\lambda_2 + b_3\lambda_3 + b_4\lambda_1\lambda_2 + b_5\lambda_2\lambda_3 + b_6\lambda_3\lambda_1 + b_7(\lambda_1 - \lambda_2)^3 + \\
 &\quad + b_8(\lambda_2 - \lambda_3)^3 + b_9(\lambda_3 - \lambda_1)^3 \quad (5) \\
 b_1 &= \frac{13}{9}v_1 - \frac{2}{9}(v_2 + v_3) + \frac{1}{9}[(\xi_2 - \xi_3)v_{1x} - \xi_3v_{2x} + \xi_2v_{3x}] + \frac{1}{9}[(\eta_2 - \eta_3)v_{1y} - \\
 &\quad - \eta_3v_{2y} + \eta_2v_{3y}] \\
 b_2 &= \frac{13}{9}v_2 - \frac{2}{9}(v_3 + v_1) + \frac{1}{9}[\xi_3v_{1x} + (\xi_3 - \xi_1)v_{2x} - \xi_1v_{3x}] + \frac{1}{9}[\eta_3v_{1y} + \\
 &\quad + (\eta_3 - \eta_1)v_{2y} - \eta_1v_{3y}] \\
 b_3 &= \frac{13}{9}v_3 - \frac{2}{9}(v_1 + v_2) + \frac{1}{9}[-\xi_2v_{1x} + \xi_1v_{2x} + (\xi_1 - \xi_2)v_{3x}] + \frac{1}{9}[-\eta_2v_{1y} + \\
 &\quad + \eta_1v_{2y} + (\eta_1 - \eta_2)v_{3y}] \\
 b_4 &= -\frac{1}{3}(v_1 + v_2 - 2v_3) + \frac{1}{6}[(\xi_1 - 2\xi_3)v_{1x} + (2\xi_3 - \xi_2)v_{2x} + (\xi_1 - \xi_2)v_{3x}] + \\
 &\quad + \frac{1}{6}[(\eta_1 - 2\eta_3)v_{1y} + (2\eta_3 - \eta_2)v_{2y} + (\eta_1 - \eta_2)v_{3y}] \\
 b_5 &= -\frac{1}{3}(v_2 + v_3 - 2v_1) + \frac{1}{6}[(\xi_2 - \xi_3)v_{1x} + (\xi_2 - 2\xi_1)v_{2x} + (2\xi_1 - \xi_3)v_{3x}] + \\
 &\quad + \frac{1}{6}[(\eta_2 - \eta_3)v_{1y} + (\eta_2 - 2\eta_1)v_{2y} + (2\eta_1 - \eta_3)v_{3y}] \\
 b_6 &= -\frac{1}{3}(v_3 + v_1 - 2v_2) + \frac{1}{6}[(2\xi_2 - \xi_1)v_{1x} + (\xi_3 - \xi_1)v_{2x} + (\xi_3 - 2\xi_2)v_{3x}] + \\
 &\quad + \frac{1}{6}[(2\eta_2 - \eta_1)v_{1y} + (\eta_3 - \eta_1)v_{2y} + (\eta_3 - 2\eta_2)v_{3y}]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_7 &= -\frac{2}{9}(v_1 - v_2) + \frac{1}{54}[(6\xi_3 - \xi_1)v_{1x} + (6\xi_3 - \xi_2)v_{2x} - \xi_3 v_{3x}] + \\
&\quad + \frac{1}{54}[(6\eta_3 - \eta_1)v_{1y} + (6\eta_3 - \eta_2)v_{2y} - \eta_3 v_{3y}] \\
b_8 &= -\frac{2}{9}(v_2 - v_3) + \frac{1}{54}[-\xi_1 v_{1x} + (6\xi_1 - \xi_2)v_{2x} + (6\xi_1 - \xi_3)v_{3x}] + \\
&\quad + \frac{1}{54}[-\eta_1 v_{1y} + (6\eta_1 - \eta_2)v_{2y} + (6\eta_1 - \eta_3)v_{3y}] \\
b_9 &= -\frac{2}{9}(v_3 - v_1) + \frac{1}{54}[(6\xi_2 - \xi_1)v_{1x} - \xi_2 v_{2x} + (6\xi_2 - \xi_3)v_{3x}] + \\
&\quad + \frac{1}{54}[(6\eta_2 - \eta_1)v_{1y} - \eta_2 v_{2y} + (6\eta_2 - \eta_3)v_{3y}]
\end{aligned}$$

这与文[3]由直接计算所得结果是一致的。

我们知道, 一个完整的三次多项式空间  $P_3(K)$  有十个基函数。除了 Bergan 元或 Zienkiewicz 元所给出的九个基函数外, 尚有一个线性无关的基函数为  $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$ 。将此基函数与前面的一些作成线性组合, 使之与常应变函数能量正交。容易验证, 此即为

$$\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 - \frac{1}{3}(\lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_3 \lambda_1) \quad (6)$$

这样, 三次多项式空间可分解成能量为相互正交的两部份:

$$\begin{aligned}
P_3(K) &= \text{Span}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_1 \lambda_2, \lambda_2 \lambda_3, \lambda_3 \lambda_1, (\lambda_1 - \lambda_2)^3, \\
&\quad (\lambda_2 - \lambda_3)^3, (\lambda_3 - \lambda_1)^3, \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 - \frac{1}{3}(\lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_3 \lambda_1)\}. \quad (7)
\end{aligned}$$

要完全确定这个空间, 除了已给的九个节点参数外, 尚需另一个参数, 通常取形函数在三角形重心上的函数值。

### 参 考 文 献

- [1] Felippa C A, Bergan P G, A triangular bending element based on an energy-orthogonal free formulation, *Computer. Meths. Appl. Mech. Eng.* 61 (1987), 129—160.
- [2] Bergan P G, Nygard M K, Finite elements with increased freedom in cloosing shape functions, *Inter. J. Numer. Meths. Eng.* 20(1984), 643-664.
- [3] 石钟慈, 陈绍春, 张飞, 自由公式能量正交板元的收敛性分析, JCM, 将发表.
- [4] 张飞, 非协调板元, 中国科学技术大学学报. 19(1989), . 417—424.
- [5] Shi Z. C. Convergence of the TRUNC Plate clement, *Compnt. Meths. Appl. Mech. Eng.* 62 (1987), 71—88.



# On the Space of Shape Functions of an Energy-Orthogonal Plate Element

Shi Zhongci

*(Computing Center Sinica Academia)*

## Abstract

It is proved that the space of shape functions of an energy-orthogonal plate element, recently introduced by Bergan et.al, is actually identical with the usual in complete cubic element of Zienkiewicz.

**Key words:** finite-element method, numerical analysis, energy-orthogonal plate element.

# 关于指数为 $(h+1)$ 的临界 $h$ 棱连通图的最大棱数

徐俊明

(数学系)

## 摘 要

令  $N$  是正整数集合. 设  $p, h \in N$ , 令  $\mathcal{G}_h^1(p)$  是其指数不为 1 的  $p$  阶临界  $h$  棱连通图集合,  $f_h^*(p)$  是一个确定的二元函数. 本文证明如下结论: 设  $h, p_0 \in N, p \geq 4h-2, h \geq 4$  且设  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p_0)$  中具有最大棱数且指数为  $h+1$  的图. 如果对任何  $p \in N$  且  $p < p_0$ ,  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中任何图  $H$  的棱数都小于  $f_h^*(p)$ , 那么  $G$  的棱数小于  $f_h^*(p_0)$ .

**关键词:** 图论, 连通度, 临界棱连通性, 极值图.

**中图法分类号:** O157.5, 05C

## 1 引言

设图  $G = (V, E)$  是连通的、有限的、无向的简单图, 其中  $V = V(G)$  和  $E = E(G)$  分别表示  $G$  的顶点集合和棱集合.  $p(G) = |V(G)|$  和  $q(G) = |E(G)|$  分别称为  $G$  的阶数和棱数.

用  $N$  表示正整数集合. 用  $\lambda(G)$  表示  $G$  的棱连通度. 设  $h \in N, \lambda(G) = h$ . 若对任何  $x \in V(G)$  均有  $\lambda(G-x) \leq h-1$ , 则称  $G$  为临界  $h$  棱连通图.  $p$  阶临界  $h$  棱连通图的全体记为  $\mathcal{G}_h(p)$ . 对于  $p, h \in N$

$$f_h(p) = \max \{q(G) : G \in \mathcal{G}_h(p)\}$$
$$\mathcal{G}_h^*(p) = \{G \in \mathcal{G}_h(p) : q(G) = f_h(p)\}$$

一个有趣的问题是: 对于给定的  $p, h \in N, p \geq h+1$ , 确定  $f_h(p)$  的值和  $\mathcal{G}_h^*(p)$  中的所有图.

由于  $\mathcal{G}_1(p) = \{K_2\}$ , 其中  $K_2$  为 2 阶完全图. 所以确定  $f_1(p)$  和  $\mathcal{G}_1^*(p)$  是平凡的.

田丰、张存铨<sup>[1]</sup>和丁颂康<sup>[2]</sup>分别确定了  $f_2(p)$  和  $\mathcal{G}_2^*(p)$ . 作者<sup>[3,4,5]</sup>、丁颂康<sup>[6]</sup>和汪泓<sup>[7]</sup>独立地确定了  $f_3(p)$  和  $\mathcal{G}_3^*(p)$ .

对于一般的  $h \geq 3$ , 作者和田丰<sup>[8]</sup>证明了  $f_h(p) \geq f_h^*(p)$ , 其中

1988年9月19日收到.

$$f_h^*(p) = \begin{cases} \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \frac{1}{2} p & p \equiv 0 \pmod{2h} \\ \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{i}{h^2} + \frac{i+1}{h} - \frac{1}{2}\right) p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{i}{h} + h - i & p \equiv i \pmod{2h}, 1 \leq i \leq h-1 \\ \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{i}{h^2} + \frac{i+2}{h} - \frac{3}{2}\right) p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{2i}{h} + 2h + 2 - i & p \equiv i \pmod{2h}, h \leq i \leq 2h-1 \end{cases} \quad (1.1)$$

设  $x \in V(G)$ , 令  $N_c(x) = \{y \in V(G) : xy \in E(G)\}$ ,  $d_c(x) = |N_c(x)|$  为顶点  $x$  的度数. 度数为  $d$  的顶点称为  $d$  度点.  $G$  中  $d$  度点集合记为  $M_c(d)$ . 设  $X$  和  $Y$  是  $V(G)$  的两个不相交的非空真子集. 令

$$XY = \{xy \in E(G) : x \in X \text{ 且 } y \in Y\}$$

设  $G \in \mathcal{G}_h(p)$ , 于是对每个  $x \in V(G)$  存在  $V(G-x)$  的一个有序划分  $(V'_x, V''_x)$  使  $|V'_x| \geq |V''_x|$  和  $|V'_x V''_x| = \lambda(G-x) \leq h-1$ , 并且  $N_c(x) \cap V'_x \neq \emptyset$ ,  $N_c(x) \cap V''_x \neq \emptyset$ . 用  $\mathcal{D}_c(x)$  表示  $V(G-x)$  的上述有序划分的集合. 令

$$a_c(x) = \min\{|V'_x| : (V'_x, V''_x) \in \mathcal{D}_c(x)\}$$

$$a(G) = \max\{a_c(x) : x \in V(G)\}$$

$a(G)$  称为  $G$  的划分指数, 简称为指数.

**命题 1.1**<sup>[9]</sup> 设  $G \in \mathcal{G}_h(p)$ , 则  $a(G) = 1$  或者  $a(G) \geq h+1$ , 而且  $a(G) = 1$  当且仅当对每个  $x \in V(G)$ ,  $N_c(x) \cap M_c(h) \neq \emptyset$ .

于是  $\mathcal{G}_h(p)$  中图按其指数可以分成两类:

$$\mathcal{G}_h^0(p) = \{G \in \mathcal{G}_h(p) : a(G) = 1\}$$

$$\mathcal{G}_h^1(p) = \{G \in \mathcal{G}_h(p) : a(G) \geq h+1\}$$

在 [10] 中, 作者定义一类图  $\mathcal{H}_h(p) \subset \mathcal{G}_h^0(p)$  ( $h \geq 4$ ), 且对每个  $H \in \mathcal{H}_h(p)$  均有  $q(H) = f_h^*(p)$ . 更进一步地, 我们有

**命题 1.2**<sup>[9, 10]</sup> 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq h+1$ ,  $h \geq 4$ , 如果  $G \in \mathcal{G}_h^0(p)$ , 则  $q(G) \leq f_h^*(p)$  且等号成立当且仅当  $G \in \mathcal{H}_h(p)$ .

**命题 1.3**<sup>[5]</sup> 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $h+1 \leq p \leq 4h-3$ ,  $h \geq 4$ . 如果  $G \in \mathcal{G}_h^1(p)$ , 则  $q(G) < f_h^*(p)$ .

我们力图证明: 当  $h \geq 4$  时,

$$\mathcal{G}_h^1(p) = \mathcal{H}_h(p), \quad f_h(p) = f_h^*(p) \quad (1.2)$$

由命题 1.2 和命题 1.3, 我们只须证明: 当  $h \geq 4$  且  $p \geq 4h-2$  时, 有

$$q(G) < f_h^*(p) \quad (1.3)$$

假定不等式 (1.3) 不成立, 即存在最小正整数  $p_0 \geq 4h-2$  和  $\mathcal{G}_h(p_0)$  中的具有最大棱数的图  $G$ , 使  $q(G) \geq f_h^*(p_0)$ . 在 [11] 中我们已证明  $a(G)$  不可能大于  $h+2$ , 在另文中我们将证明  $a(G) \neq h+2$ . 本文我们将要证明  $a(G) \neq h+1$ , 即证明如下定理:

**定理** 设  $h, p_0 \in \mathbb{N}$ ,  $p_0 \geq 4h-2$ ,  $h \geq 4$  并设  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p_0)$  中具有最大棱数的图且  $a(G) = h+1$ . 如果对任何  $p \in \mathbb{N}$ ,  $p < p_0$  和任何  $H \in \mathcal{G}_h^1(p)$  均有  $q(H) < f_h^*(p)$ , 那么  $q(G) < f_h^*(p_0)$ .

该定理的证明在第3节. 在第2节中我们叙述和证明若干引理. 本文用到而未加说明的记号和术语见 [12].

## 2 若干引理

**引理 2.1<sup>[11]</sup>** 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq h+3$ ,  $h \geq 3$ , 则

$$f_h^*(p) \leq \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \frac{1}{2} p \quad (2.1)$$

**引理 2.2<sup>[11]</sup>** 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq \frac{3}{2}h + \frac{7}{2}$ ,  $h \geq 3$ , 则

$$f_h^*(p) \geq \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{2}\right)p + h + \frac{1}{2} \quad (2.2)$$

**引理 2.3** 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq 4h-2$ ,  $h \geq 4$ , 则

$$f_h^*(p) - f_h^*(p-1) = \begin{cases} \geq h+4, & \text{当 } p \not\equiv 1, h \pmod{2h} \text{ 时} \\ = h-1, & \text{当 } p \equiv 1 \pmod{2h} \text{ 时} \\ = h, & \text{当 } p \equiv h \pmod{2h} \text{ 时} \end{cases} \quad (2.3)$$

**证明** 设  $p = 2kh + i$ ,  $k \geq 1$ ,  $1 \leq i \leq 2h$ .

当  $2 \leq i \leq h-1$  时, 由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{i}{h^2} + \frac{i+1}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{i}{h} + h - i$$

$$\begin{aligned} f_h^*(p-1) &= \frac{(h-1)^2}{2h^2} (p-1)^2 + \left(-\frac{i-1}{h^2} + \frac{i}{h} - \frac{1}{2}\right)(p-1) + \\ &\quad + \frac{(i-1)^2}{2h^2} - \frac{i-1}{h} + h - (i-1) \end{aligned}$$

所以当  $p \geq 4h-2$  时,

$$f_h^*(p) - f_h^*(p-1) = \left(h - \frac{1}{h}\right)p + \frac{i}{h} - 2 \geq 4h + \frac{4}{h} - 8 > h+4$$

当  $h+1 \leq i \leq 2h$  时, 注意 (1.1) 式中当  $p \equiv i \pmod{2h}$ ,  $h \leq i \leq 2h-1$  时  $f_h^*(p)$  的表达式对  $p \equiv 0 \pmod{2h}$  也适用. 因此

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{i}{h^2} + \frac{i+2}{h} - \frac{3}{2}\right)p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{2i}{h} + 2h + 2 - i$$

$$\begin{aligned} f_h^*(p-1) &= \frac{(h-1)^2}{2h^2} (p-1)^2 + \left(-\frac{i-1}{h^2} + \frac{i+1}{h} - \frac{3}{2}\right)(p-1) + \\ &\quad + \frac{(i-1)^2}{2h^2} - \frac{2(i-1)}{h} + 2h + 2 - (i-1) \end{aligned}$$

所以, 当  $p \geq 4h-2$  时,

$$f_h^*(p) - f_h^*(p-1) = \left(1 - \frac{1}{h}\right)p + \frac{i}{h} - 3 \geq 4h + \frac{3}{h} - 8 > h+4$$

当  $i=1$  时, 由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{2}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{1}{2h^2} - \frac{1}{h} + h - 1$$

$$f_h^*(p-1) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} (p-1)^2 + \frac{1}{2} (p-1)$$

所以,  $f_h^*(p) - f_h^*(p-1) = h - 1$ .

当  $i = h$  时, 由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{2}\right)p + h + \frac{1}{2}$$

$$f_h^*(p-1) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{1}{2}$$

所以,  $f_h^*(p) - f_h^*(p-1) = h$ .

引理 2.4 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq 4h - 2$ ,  $h \geq 4$ , 则

$$f_h^*(p) - f_h^*(p-2) \geq 2h + 6. \quad (2.4)$$

证明 设  $p = 2kh + i$ ,  $1 \leq i \leq 2h$ . 由 (2.3) 式知当  $3 \leq i \leq h-1$  和  $h+2 \leq i \leq 2h$  时有

$$f_h^*(p) \geq f_h^*(p-1) + h + 4 \geq f_h^*(p-2) + 2h + 8.$$

下面只须证  $i = 1, 2, h$  和  $h+1$  的情形. 当  $i = 1$  时,  $p \geq 4h + 1$ . 于是由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{2}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{1}{2h^2} - \frac{1}{h} + h - 1$$

$$f_h^*(p-2) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{3}{h} - \frac{3}{2}\right)p + \frac{1}{2h^2} - \frac{2}{h} + 2$$

所以,  $f_h^*(p) - f_h^*(p-2) = \left(1 - \frac{1}{h}\right)p + \frac{1}{h} + h - 3 \geq \left(1 - \frac{1}{h}\right)(4h+1) + \frac{1}{h} + h - 3 \geq 2h + 6$

当  $i = 2$  时,  $p \geq 4h + 2$ . 于是由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{2}{h^2} + \frac{3}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{2}{h^2} - \frac{2}{h} + h - 2$$

$$f_h^*(p-2) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{2}{h^2} + \frac{4}{h} - \frac{3}{2}\right)p + \frac{2}{h^2} - \frac{4}{h} + 1$$

所以,  $f_h^*(p) - f_h^*(p-2) = \left(1 - \frac{1}{h}\right)p + \frac{2}{h} + h - 3 \geq \left(1 - \frac{1}{h}\right)(4h+2) + \frac{2}{h} + h - 3 \geq 2h + 7$

当  $i = h$  时,  $p \geq 5h$ . 于是由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{2}\right)p + h + \frac{1}{2}$$

$$f_h^*(p-2) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(\frac{2}{h} - \frac{3}{2}\right)p + \frac{5}{2}$$

所以,  $f_h^*(p) - f_h^*(p-2) = \left(1 - \frac{1}{h}\right)p + h - 2 \geq \left(1 - \frac{1}{h}\right)5h + h - 2 \geq 2h + 9$

当  $i = h+1$  时,  $p \geq 5h + 1$ . 于是由 (1.1) 式有

$$f_h^*(p) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{2}{h} - \frac{1}{2}\right)p + \frac{1}{2h^2} - \frac{1}{h} + h - \frac{1}{2}$$

$$f_h^*(p-2) = \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{3}{h} - \frac{3}{2}\right)p + \frac{1}{2h^2} - \frac{2}{h} + \frac{3}{2}$$

$$f_h^*(p) - f_h^*(p-2) = \left(1 - \frac{1}{h}\right)p + \frac{1}{h} - 2 \geq \left(1 - \frac{1}{h}\right)(5h+1) + \frac{1}{h} - 2 \geq 2h+6$$

**引理 2.5** 设  $G \in \mathcal{G}_h(p)$ ,  $x \in V(G)$  且  $a_c(x) = h+1$ . 取  $(V'_x, V''_x) \in \mathcal{D}_c(x)$  使  $|V'_x| = h+1$ . 则对任何使  $N_c(z) \cap V'_x = \phi$  的  $z \in V''_x$  和  $(V'_z, V''_z) \in \mathcal{D}_c(z)$  均有  $V'_z V''_z \cap E(G[V'_x]) = \phi$ .

**证明** (反证法) 由于  $|V''_x| \geq |V'_x| = h+1$ ,  $|V'_z V''_z| \leq h-1$ , 所以引理中使  $N_c(z) \cap V'_x = \phi$  的  $z \in V''_x$  是存在的. 设存在  $z \in V''_x$  使  $N_c(z) \cap V'_x = \phi$  和  $(V'_z, V''_z) \in \mathcal{D}_c(z)$  使  $V'_z V''_z \cap E(G[V'_x]) \neq \phi$ . 设  $x \in V'_z$  (若  $x \in V''_z$ , 则证法相同). 令

$$\begin{aligned} A &= V'_z \cap V'_x, & B &= V''_z \cap V'_x \\ C &= V'_z \cap V''_x, & D &= V''_z \cap V''_x \end{aligned}$$

由假定  $A \neq \phi$ ,  $B \neq \phi$ . 由于  $x \in V'_z$  且  $N_c(z) \cap V'_x = \phi$ , 所以  $D \neq \phi$ . 因为  $|V'_z V''_z| = \lambda(G-x)$  且  $|V'_x| = a_c(x) = h+1$ . 所以  $|AB| + |AV''_z| > |AV''_z| + |BV''_z|$ , 即

$$|AB| > |BD| \quad (2.5)$$

另一方面,  $|DV'_z| + |BV'_z| = |V'_z V''_z| = \lambda(G-z) \leq |DV'_z| + |BD|$ , 所以  $|BD| \geq |BV'_z| \geq |AB|$ . 这矛盾于 (2.5) 式. 故引理得证.

**引理 2.6**<sup>[5]</sup> 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $p \geq h+1$  并设  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中具有最大棱数的图. 令

$$X(G) = \{x \in V(G) : a_c(x) \geq h+1 \text{ 且 } \lambda(G-x) = h-1\}, \text{ 则 } X(G) \neq \phi.$$

设  $G \in \mathcal{G}_h^1(p)$ . 令

$$A(G) = \{x \in V(G) : a_c(x) = a(G)\}.$$

则易知  $A(G) \neq \phi$ . 如果对任何  $x \in A(G)$  和任何  $(V'_x, V''_x) \in \mathcal{D}_c(x)$ ,  $V'_x V''_x$  在  $V'_x$  中的端点集合  $U_x \subseteq M_c(h)$ , 则称  $G$  为奇异的. 反之称为非奇异的.

**引理 2.7** 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $h \geq 4$  并设  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中具有最大棱数的图. 如果  $a(G) = h+1$  且  $G$  是奇异的, 那么  $q(G) < f_h^*(p)$ .

**证明** 我们不妨选取  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中具有最大棱数的奇异图  $G$  使  $a(G) = h+1$  且  $|X(G)|$  尽可能地小. 由引理 2.6 知  $X(G) \neq \phi$ , 而且因  $a(G) = h+1$ , 所以  $X(G) \subseteq A(G)$ . 取  $x \in X(G)$  使  $d_c(x)$  尽可能地大, 取  $(V'_x, V''_x) \in \mathcal{D}_c(x)$  使  $|N_c(x) \cap V'_x|$  尽可能地大.

由于  $G$  是奇异的, 所以  $U_x \subseteq M_c(h)$ , 其中  $U_x$  是  $V'_x V''_x$  在  $V'_x$  中的端点集合. 由于  $|V'_x| = h+1$ ,  $|V'_x V''_x| = \lambda(G-x) = h-1$ , 所以  $|V'_x \setminus U_x| \geq 2$ . 取  $u \in V'_x \setminus U_x$  使  $d_c(u)$  尽可能地小, 即对任何  $y \in V'_x \setminus U_x$  均有  $d_c(y) \geq d_c(u)$ .

取  $v \in V''_x \cap N_c(x)$ , 则  $uv \in E(G)$ . 令  $\tilde{G} = G + uv$ . 显然  $\lambda(\tilde{G}) = h$ . 由于  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中具有最大棱数的图, 所以  $\tilde{G}$  失去临界性. 因此存在  $y \in V(\tilde{G}) = V(G)$  使  $\lambda(\tilde{G}-y) = h$ . 显然  $a_c(y) = h+1$ . 若  $\lambda(G-y) \leq h-2$ , 则  $\lambda(\tilde{G}-y) \leq \lambda(G-y) + 1 \leq h-1$ , 这矛盾于  $\lambda(\tilde{G}-y) = h$ . 所以  $\lambda(G-y) = h-1$ . 故  $y \in X(G)$ .

我们通过以下几步来完成对引理的证明:

1°  $y \in \{x\} \cup U_x$

设  $U_x'$  为  $V_x'V_x''$  在  $V_x'$  中的端顶点集合。由于  $V_x' \setminus U_x'$  和  $U_x'$  中点在  $G$  和在  $\tilde{G}$  中都与  $M_c(h)$  的子集  $U_x$  中点相邻, 所以  $y \notin (V_x' \setminus U_x') \cup U_x'$ 。

下设  $y \in V_x' \setminus U_x'$ 。由于  $a_c(y) = h+1$ , 所以存在  $(V_y', V_y'') \in \mathcal{D}_c(y)$  使  $|V_y'| = h+1$ 。又由于  $\lambda(\tilde{G}-y) = h$  且  $\lambda(G-y) = h-1$ , 所以  $u$  和  $v$  分别在  $V_y'$  和  $V_y''$  中。由引理 2.5 知  $V_y', V_y'' \cap E(G[V_x']) = \phi$ , 所以  $V_x' \subseteq V_y'$ 。故  $u \in V_y'$ ,  $v \in V_y''$ 。由于  $G$  是奇异的, 所以  $U_y' \subseteq M_c(h)$ , 其中  $U_y'$  是  $V_y', V_y''$  在  $V_y'$  的端顶点集合。又因为  $N_c(x) \cap M_c(h) = \phi$ , 所以  $x \in V_y'$  且  $x \in M_c(h)$ 。由  $x$  的选取知  $y \in M_c(h)$ 。显然,

$$|N_c(x) \cap V_y'| > |N_c(x) \cap V_y''| \quad (2.6)$$

$$|N_c(x) \cap V_y''| = |N_c(y) \cap V_y''| \quad (2.7)$$

令  $V_x' = (V_y' \setminus \{x\}) \cup \{y\}$ ,  $\tilde{V}_x' = V_y''$ , 则由 (2.7) 式有  $|\tilde{V}_x' \tilde{V}_x''| = \lambda(G-y) = \lambda(G-x)$ 。所以  $(V_x', \tilde{V}_x'') \in \mathcal{D}_c(x)$  且  $|\tilde{V}_x'| = h+1$ 。于是由 (2.6) 式有

$$|N_c(x) \cap \tilde{V}_x'| = |N_c(x) \cap V_y'| > |N_c(x) \cap V_y''| \geq |N_c(x) \cap V_x'|。$$

这矛盾于对  $(V_x', V_x'') \in \mathcal{D}_c(x)$  的选取。故  $y \in \{x\} \cup U_x$ 。令  $Y = \{y \in V(\tilde{G}), \lambda(\tilde{G}-y) = h\}$ , 则  $Y \subseteq \{x\} \cup U_x$ 。

若  $|N_c(x) \cap V_x'| > 2$ , 则  $(N_c(x) \cap V_x') \setminus \{u\} \neq \phi$ ; 若  $|N_c(x) \cap V_x'| = 1$ , 则由  $u$  的选取知  $u \notin N_c(x) \cap V_x'$ , 因此仍有  $(N_c(x) \cap V_x') \setminus \{u\} \neq \phi$ 。取  $w \in (N_c(x) \cap V_x') \setminus \{u\}$ 。令

$$H = \tilde{G} - uw。$$

2°  $H \in \mathcal{G}_h^1(p)$

因为  $\lambda(\tilde{G}) = h$ , 所以  $\lambda(H) \geq h-1$ 。若  $\lambda(H) = h-1$ , 则存在  $V(H) = V(G)$  的划分  $\{B, \bar{B}\}$  使  $|B\bar{B}| = \lambda(H) = h-1$ 。因为  $\lambda(\tilde{G}) = h$ , 所以不妨设  $u \in B$ ,  $w \in \bar{B}$ 。又因  $\lambda(G) = h$ , 故  $uv \notin B\bar{B}$ , 即  $v \in B$ 。由于  $w, v \in N_c(x)$ , 所以若  $x \in B$ , 则  $xw \in B\bar{B}$ ; 若  $x \in \bar{B}$ , 则  $xv \in B\bar{B}$ 。令  $B' = B \cap V_x'$ ,  $\bar{B}' = \bar{B} \cap V_x'$ , 则  $B' \cup \bar{B}' = V_x'$ 。由于在  $G$  中  $w$  与  $V_x' \setminus \{w\}$  中所有顶点相邻,  $u$  与  $V_x' \setminus \{u\}$  中所有顶点都相邻, 所以在  $H$  中有  $|B'\bar{B}'| \geq (|\bar{B}'| - 1) + (|B'| - 1)$ 。于是

$$h-1 = \lambda(H) = |B\bar{B}| \geq |B'\bar{B}'| + 1 \geq |\bar{B}'| + |B'| - 1 = |V_x'| - 1 = h。$$

这不可能。所以  $\lambda(H) = h$ 。

再证  $H$  的临界性。由于  $\tilde{G}$  的非临界点集  $Y \subseteq \{x\} \cup U_x$ 。所以只须验证  $\{x\} \cup U_x$  中点在  $H$  中的临界性。因为  $d_H(w) = h$  且  $\{x\} \cup U_x$  中点都与  $w$  相邻。故  $Y$  中点在  $H$  中具有临界性。因此  $H \in \mathcal{G}_h^1(p)$ 。

由于  $a(G) = h+1$ , 而且  $H[V_x''] = G[V_x'']$ , 所以对每个  $y \in V_x' \setminus U_x'$ , 由引理 2.5 知  $a_n(y) \leq h+1$ 。而  $y \in (V(H) \setminus V_x') \cup U_x'$  均有  $N_n(y) \cap M_n(h) \neq \phi$ 。故由命题 1.1 知  $a_c(y) = 1$ 。所以  $a(H) \leq a(G) = h+1$ 。

若  $a(H) = h+1$ , 则由  $q(H) = q(G)$  知  $H$  也是  $\mathcal{G}_h^1(p)$  中具有最大棱数的图, 而且是奇异的,  $X(H) \subseteq X(G) \setminus \{x\}$ 。因而  $|X(H)| < |X(G)|$ 。这矛盾于  $G$  的选取, 所以  $H \in \mathcal{G}_h^0(p)$ 。

3°  $q(G) \leq f_h^*(p) - 2$ 。

为此只须证明  $q(H) \leq f_h^*(p) - 2$ 。由于  $H \in \mathcal{G}_h^0(p)$ , 所以  $H$  中每点都与  $h$  度点相邻, 故在两个不相邻的非  $h$  度点之间添加棱不影响其临界性。

由于  $U_x \subseteq M_c(h)$ , 所以  $V'_x \subseteq M_{c-x}(h)$ . 于是

$$2q(G[V'_x]) = (h+1)h - (h-1) = h^2 + 1$$

故  $h$  是  $\geq 4$  的奇数, 即  $h \geq 5$ .

若  $|N_c(x) \cap V'_x| = 1$ , 则  $|N_c(x) \cap V'_x| \geq 4$ . 取  $w_1, w_2 \in N_c(x) \cap V'_x$  使  $\{w_1, w_2\} \cap \{u, w\} = \emptyset$ . 于是令  $H' = H + \{w_1v, w_2v\}$ . 由于  $\{w_1, w_2, v\} \cap M_H(h) = \emptyset$ , 所以  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p)$ .

若  $|N_c(x) \cap V'_x| = 2$ , 则  $|N_c(x) \cap V'_x| \geq 3$ . 取  $v_1 \in N_c(x) \cap V'_x$ , 使  $v_1 \neq v$ ; 取  $w_1 \in N_c(x) \cap V'_x$  使  $w_1 \notin \{u, w\}$ . 令  $H' = H + \{w_1v, w_1v_1\}$ . 易验证  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p)$ .

若  $|N_c(x) \cap V'_x| \geq 3$ , 则取  $v_1, v_2 \in N_c(x) \cap V'_x$  使  $v \notin \{v_1, v_2\}$ . 令  $H' = H + \{uv_1, uv_2\}$ . 易证  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p)$ . 注意可能有  $d_H(u) = h$ . 但  $H$  中与  $u$  相邻的点均与  $w$  相邻, 而  $d_H(w) = h$ , 因此  $H'$  中点仍与  $h$  度点相邻.

由于  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p)$  且  $q(G) = q(H') - 2$ . 所以由命题 1.2 有  $q(G) \leq f_h^*(p) - 2$ .

引理证毕.

**引理 2.8** 设  $p, h \in \mathbb{N}$ ,  $h \geq 4$ ,  $p \geq 4h - 2$ ,  $G \in \mathcal{G}_h(p)$ . 如果  $a(G) = h + 1$  且  $G$  是非奇异的, 那么存在  $H \in \mathcal{G}_h(p-1)$  使  $a(H) \leq a(G)$  并且  $q(G) \leq q(H) + h$ . 特别, 当  $H \in \mathcal{G}_h^0(p-1)$  时, 有  $q(G) < f_h^*(p)$ .

**证明** 由于  $G$  是  $\mathcal{G}_h^0(p)$  中的非奇异图, 并且  $a(G) = h + 1$ , 所以存在  $x \in A(G)$  和  $(V'_x, V'_x) \in \mathcal{D}_c(x)$  使  $U_x \not\subseteq M_c(h)$ . 由于  $|V'_x| = h + 1$  而且  $|V'_x V'_x| = \lambda(G - x) \leq h - 1$ , 所以  $V'_x \setminus U_x \neq \emptyset$ . 取  $u \in V'_x \setminus U_x$  使  $d_c(u)$  尽可能地小, 易知  $d_c(u) = h$  或者  $h + 1$ .

若  $d_c(u) = h + 1$ , 则  $u \in N_c(x)$ . 如果  $V'_x \cap M_c(h) \neq \emptyset$ , 那么取  $w \in V'_x \cap M_c(h)$ . 于是  $w \notin N_c(x)$ ; 如果  $V'_x \cap M_c(h) = \emptyset$ , 那么  $x \in M_c(h)$  (否则,  $\lambda(G - u) = h$ ). 于是  $|N_c(x) \cap V'_x| \leq h - 1$ . 所以存在  $w \in V'_x \setminus N_c(x)$  使  $w \neq u$ . 令

$$G_u = \begin{cases} G - u, & \text{当 } d_c(u) = h \text{ 时;} \\ (G - u) + xw, & \text{当 } d_c(u) = h + 1 \text{ 时, 其中 } w \text{ 如上所述.} \end{cases}$$

则

$$q(G) = q(G_u) + h \quad (2.8)$$

我们来构造  $H$ , 若  $M_{c_u}(h-1) = \emptyset$ , 则令  $H = G_u$ . 下设  $M_{c_u}(h-1) \neq \emptyset$ . 令在  $G_u$  中不相邻两  $(h-1)$  度点对之间添加连接棱所得到的图为  $H_1$ . 若  $M_{H_1}(h-1) = \emptyset$ , 则令  $H = H_1$ . 下设  $M_{H_1}(h-1) \neq \emptyset$ . 分两种情形:

**情形 1**  $M_{H_1}(h-1) \setminus U_x \neq \emptyset$ . 取  $t \in M_{H_1}(h-1) \setminus U_x$ .

1° 存在  $r \in U_x$  使  $d_{H_1}(r) \geq h + 1$ . 取  $y \in N_{H_1}(r) \cap V'_x$ . 令  $H_2 = (H_1 - ry) + ty$ .

2° 对任何  $r \in U_x$  均有  $d_{H_1}(r) \leq h$ . 容易证明存在  $w_1, w_2 \in U_x$  使  $w_1 w_2 \notin E(H_1)$ . 取  $w'_i \in N_{H_1}(w_i) \cap V'_x$ ,  $i = 1, 2$ .

若  $w_1$  和  $w_2$  之一, 比如  $d_c(w_2) \geq h + 1$ , 则令

$$H_2 = (H - w_1 w'_1) + \{w_1 w_2, t w'_1\}.$$

下设对  $V_u = V'_x \setminus \{u\}$  中任何不相邻两点  $w_1$  和  $w_2$  均有  $d_c(w_1) = d_c(w_2) = h$ . 由于  $G$  是非奇异的, 所以存在  $v \in U_x$  使  $d_c(v) \geq h + 1$ . 由于  $d_{H_1}(v) \leq h$ , 所以存在  $r \in V_u \cup \{x\}$  使  $rv \notin E(H_1)$ . 由  $w_1$  和  $w_2$  的假定知只可能有  $r = x$ . 则考虑两种子情形:



①存在  $b \in U_x$  使  $|N_{H_1}(b) \cap V_x'| \geq 2$ , 则存在  $s \in V_u \setminus \{t\}$  使  $s \notin U_x$ . 所以  $s \notin \{w_1, w_2\}$ . 若  $d_{H_1}(s) = h-1$ , 则  $s \notin N_{H_1}(x)$ . 令  $H_2 = (H_1 - \{w_1, w_1', w_2, w_2'\}) + \{w_1, w_2, t, w_2', s, w_1'\}$ ; 若  $d_{H_1}(s) = h$ , 则  $s \in N_{H_1}(x)$ . 令  $H_2 = (H_1 - \{xs, w_1, w_1', w_2, w_2'\}) + \{xv, s, w_1', t, w_2', w_1, w_2\}$ .

②对任何  $b \in U_x$  均有  $|N_{H_1}(b) \cap V_x'| = 1$ , 则  $\{w_1, w_2\} \subset N_{H_1}(x)$ . 令  $H_2 = (H_1 - \{xw_1, xw_2\}) + \{w_1, w_2, xt, xv\}$ .

情形 2  $M_{H_1}(h-1) \subseteq U_x$ . 取  $t \in M_{H_1}(h-1)$ . 则  $t \notin N_{H_1}(x)$ . 取  $t' \in V_u \setminus U_x$ . 由于  $d_{H_1}(t') = h$ , 所以  $t' \in N_{H_1}(x)$ . 令  $H'_1 = (H_1 - xt') + xt$ . 则  $t' \in M_{H'_1}(h-1) \setminus U_x \neq \emptyset$ . 用  $H'_1$  替代  $H_1$  转情形 1.

由此构造的  $H_2$  满足  $|M_{H_2}(h-1)| < |M_{H_1}(h-1)|$ . 若  $M_{H_2}(h-1) \neq \emptyset$ , 则再进行上述步骤. 由于  $|M_{H_2}(h-1)|$  是有限的, 所以经有限步以后必得到图  $H$  使  $M_H(h-1) = \emptyset$  且

$$q(G) \leq q(H) + h \quad (2.9)$$

下面证明  $H \in \mathcal{G}_h(p-1)$ .

若  $\lambda(H) \leq h-1$ , 则存在  $V(H)$  的划分  $\{A, B\}$  使  $|AB| = \lambda(H) \leq h-1$ . 由于每个  $v \in V(H)$  均有  $d_H(v) \geq h$ , 所以  $|A| \geq 2, |B| \geq 2$ . 令  $a = |A|$ . 考虑  $\sum_{y \in A} d_H(y)$ . 一方面有

$$\sum_{y \in A} d_H(y) \geq ah; \text{ 另一方面, 由于 } |AB| \leq h-1, \text{ 所以 } \sum_{y \in A} d_H(y) \leq a(a-1) + h-1. \text{ 于是得不}$$

等式  $ah \leq a(a-1) + h-1$ . 解之有  $a \geq h+1$ . 同样可证  $|B| \geq h+1$ .

设  $x \in B$  (若  $x \in A$ , 则证法相同). 令  $A' = A \cap V_u, B' = B \cap V_u, A'' = A \cap V_x', B'' = B \cap V_x'$ , 则  $A' \neq \emptyset, B' \neq \emptyset$ . 令  $m = |A'|$ , 则  $1 \leq m \leq h-1$ . 一方面有  $\sum_{y \in A'} d_H(y) \geq mh$ ,

另一方面  $\sum_{y \in A'} d_H(y) < m(m-1) + 2(h-1)$ . 于是得不等式  $mh < m(m-1) + 2(h-1)$ . 由此得

$m \geq h$  或者  $m \leq 1$ . 由于  $1 \leq m \leq h-1$ , 所以  $m=1$ . 令  $A' = \{w\}$ . 显然  $N_H(w) \cap V_x' \neq \emptyset$ , 而且由于  $|A| \geq h+1, |B| \geq h+1$ , 所以  $A'' \neq \emptyset, B'' \neq \emptyset$ .

令  $e_1 = |B'B''|, e_2 = |B'A'|, e_3 = |A'A''|, e_4 = |A''B''|, e_5 = |B'A''|, e_6 = |A'B''|, e_7 = |\{x\}A'|, e_8 = |\{x\}A''|$ . 因为  $|AB| \leq h-1$ , 所以

$$e_2 + e_5 + e_6 + e_4 + e_7 + e_8 = |AB| \leq h-1 \quad (2.10)$$

因为  $|V_u V_x'| = |V_x' V_x'| = \lambda(G-x)$ , 所以

$$e_1 + e_3 + e_5 + e_6 = \lambda(G-x) \quad (2.11)$$

又因为  $A' = \{w\}, d_H(w) \geq h$ , 所以

$$e_2 + e_3 + e_6 + e_7 = d_H(w) \geq h \quad (2.12)$$

于是由 (2.10) 式— (2.12) 式得

$$e_1 + e_4 + e_6 \leq \lambda(G-x) - 1 \quad (2.13)$$

令  $\tilde{A} = B'', \tilde{B} = V_x' \cup A''$ , 则  $\{\tilde{A}, \tilde{B}\}$  是  $V(G-x)$  的一个划分, 且由 (2.13) 式有

$$\lambda(G-x) \leq |\tilde{A}\tilde{B}| = e_1 + e_4 + e_6 \leq \lambda(G-x) - 1$$

这不可能. 所以  $\lambda(H) \geq h$ . 由  $H$  的构造易知  $M_H(h) \neq \emptyset$ , 所以  $\lambda(H) = h$ . 再由  $H$  的构造和引理 2.5 即知  $H \in \mathcal{G}_h(p-1)$ , 并且  $a(H) \leq a(G)$ .

最后证明当  $H \in \mathcal{G}_h^0(p-1)$  时有  $q(G) < f_h^*(p)$ . 由 (2.3) 式只须证明  $q(H) \leq f_h^*(p-1) - 2$ . 令  $\bar{M} = V(H) \setminus M_H(h)$ ,  $B = \bar{M} \cap V_{x'}$ , 并令  $|\bar{M}| = n$ ,  $p-1 = m$ . 于是当  $n \leq 2h$  时有

$$\begin{aligned} q(H) &= q(H[\bar{M}]) + |M_H(h)\bar{M}| + q(H[M_H(h)]) \\ &\leq \frac{1}{2}n(n-1) + h(m-n) - q(H[M_H(h)]) \leq \frac{1}{2}n(n-1) + \\ &\quad + h(m-n) - \frac{1}{2}(m-n) = \frac{1}{2}n^2 - hn + \left(h - \frac{1}{2}\right)m \leq \left(h - \frac{1}{2}\right)m \\ &\leq \left(\frac{(h-1)^2}{2h^2}m^2 + \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{2}\right)m + h + \frac{1}{2}\right) - 2 \\ &\leq f_h^*(m) - 2 = f_h^*(p-1) - 2 \end{aligned}$$

其中最后不等式成立是根据引理 2.2.

当  $n \geq 2h+1$  时, 则  $|B| \geq h+1$ . 所以  $|B \setminus U_{x'}| \geq 2$ . 取  $y_1, y_2 \in B \setminus U_{x'}$ .

① 若存在  $v \in V_u$  使  $p_H(v) \geq h+1$ , 则令

$$H' = H + \{vy_1, vy_2\}.$$

由于  $H$  中每点都与  $h$  度点相邻, 所以在不相邻的非  $h$  度点之间添加棱不影响其临界性, 于是  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p-1)$ . 由命题 1.2 有  $q(H') \leq f_h^*(p-1)$ . 所以  $q(H) = q(H') - 2 \leq f_h^*(p-1) - 2$ .

② 下设  $V_u \cap \bar{M} = \phi$ . 若  $|N_c(x) \cap V_{x'}| \geq 2$ , 则取  $v \in N_H(x) \cap V_u$  令  $H' = H + \{vy_1, vy_2\}$ , 如同①中的说明知  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p-1)$ . 设  $|N_c(x) \cap V_{x'}| = 1$ . 令  $\{w\} = N_c(x) \cap V_{x'}$ . 此时  $H[V_u] = K_h$ .  $|B \setminus U_{x'}| \geq h+3$ . 取  $v \in V_u$  使  $v \neq w$  并取  $y_1, y_2, y_3 \in B \setminus U_{x'}$ . 令

$$H' = (H - \{xw, wv\}) + \{xv, wy_1, wy_2, wy_3\}$$

易知  $H' \in \mathcal{G}_h^0(p-1)$ , 因而由命题 1.2 有  $q(H') \leq f_h^*(p-1)$ . 于是  $q(H) = q(H') - 2 \leq f_h^*(p-1) - 2$ . 引理得证.

### 3 定理的证明

在本节中, 我们将用反证法来证明定理. 假设

$$q(G) \geq f_h^*(p_0) \quad (3.1)$$

因为  $G$  是  $\mathcal{G}_h^1(p_0)$  中具有最大棱数的图且  $a(G) = h+1$ , 所以由引理 2.7 知  $G$  必是非奇异的. 于是由引理 2.8 知存在  $H \in \mathcal{G}_h^1(p_0-1)$  使得  $a(H) \leq a(G)$  且

$$q(G) \leq q(H) + h \quad (3.2)$$

由定理的假定知  $q(H) < f_h^*(p_0-1)$ .

1° 若  $q(H) \leq f_h^*(p_0-1) - 2$ , 则由 (3.1)、(3.2) 式有  $f_h^*(p_0) \leq f_h^*(p_0-1) + h - 2$ . 这矛盾于 (2.3) 式.

2° 若  $q(H) = f_h^*(p_0-1) - 1$ , 则  $H$  是  $\mathcal{G}_h^1(p_0-1)$  中具有最大棱数的图, 而且由  $a(H) \leq a(G) = h+1$  知  $a(H) = h+1$ . 因此由引理 2.7 和引理 2.8 有  $H' \in \mathcal{G}_h^1(p_0-2)$  使  $q(H) \leq q(H') + h$ . 由命题 1.2 和对  $p_0$  的假定知  $q(H') \leq f_h^*(p_0-2)$ . 于是由 (3.1)、(3.2) 式有

$$f_h^*(p_0) \leq q(H') + 2h \leq f_h^*(p_0-2) + 2h$$

这矛盾于 (2.4) 式.

定理得证.

本文得到李乔教授和李炯生教授的指导, 在此表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] 田丰、张存铨,  $p$  阶临界 2 边连通图的最大边数, 系统科学与数学, **3** (1983), No. 1, 55—61.
- [2] 丁颂康, 最大临界 2 边连通图的结构, 数学年刊, **6A** (1985), No. 4, 447-453.
- [3] 徐俊明, 临界 3 棱连通图的最大棱数, 新疆大学学报, **2** (1985), No. 4, 123.
- [4] 徐俊明, 每点都与 3 度点相邻的最大临界 3 棱通连图的结构, 中国科学技术大学学报, **17** (1987), No. 4, 441-447.
- [5] 徐俊明, 临界  $h$  棱连通图的最大棱数及其极值图的结构 (Ⅲ), 新疆大学学报, **6** (1989), No. 1, 4-12.
- [6] 丁颂康, 最大临界 3 边连通图的结构, 长沙铁道学院学报, **4** (1986), No. 3, 47-55.
- [7] 汪泓,  $n$  阶临界 3 边连通图的最大边数, 数学杂志, **6** (1986), No. 4, 381-384.
- [8] 徐俊明、田丰, 关于临界  $h$  棱连通图和临界  $h$  连通图最大棱数的下界, 华中工学院学报, **14** (1986), No. 2, 147-151.
- [9] 徐俊明, 临界  $h$  棱连通图的结构特征, 工程数学学报, **3** (1986), No. 2, 165-168.
- [10] 徐俊明, 临界  $h$  棱连通图的最大棱数及其极值图 (I), 高校应用数学学报, **3** (1988), No. 4, 537-542.
- [11] 徐俊明, 临界  $h$  棱连通图的最大棱数及其极值图 (Ⅲ), 华中理工大学学报, **17** (1989), No. 4, 137-144.
- [12] Bondy J A, Murty U S R, Graph Theory with Applications, MacMillan Press LTD, London and Basingstoke, 1976.

## On the Maximum Size of Critically $h$ -Edge-Connected Graphs with Index Number $h+1$

Xu Junming

(Department of Mathematics)

### Abstract

Let  $p, h$  be integers and  $\mathcal{G}_h^1(p)$  the set of critically  $h$ -edge-connected graphs of order  $p$  and index number  $\geq h+1$ . In this paper, the following result is

given: Let  $h, p_0$  be integers with  $p < p_0, p_0 \geq 4h - 2, h \geq 4$ , and  $G$  a graph with maximum size in  $\mathcal{G}_h^1(p_0)$ . If the index number of  $G$  is  $h+1$  and the size of  $H$  is not more than  $f_h^*(p) - 1$  for any  $H \in \mathcal{G}_h^1(p)$ , the size of  $G$  is not more than  $f_h^*(p_0) - 1$ , where

$$f_h^*(p) = \begin{cases} \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \frac{1}{2} p & p \equiv 0 \pmod{2h}; \\ \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left( -\frac{i}{h^2} + \frac{i+1}{h} - \frac{1}{2} \right) p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{i}{h} + h - i & p \equiv i \pmod{2h}, 1 \leq i \leq h-1 \\ \frac{(h-1)^2}{2h^2} p^2 + \left( -\frac{i}{h^2} + \frac{i+2}{h} - \frac{3}{2} \right) p + \frac{i^2}{2h^2} - \frac{2i}{h} + 2h + 2 - i & p \equiv i \pmod{2h}, h \leq i \leq 2h-1 \end{cases}$$

**Key words:** graph, connectivity, critical edge-connectedness, extremal graph.

# Pd/c-Si 界面反应研究\*

沈波 施一生 赵特秀

(中国科技大学)

许振嘉

(中科院半导体所)

## 摘 要

运用X射线衍射(XRD)、Auger电子能谱(AES)等方法研究了不同晶面取向的Si衬底对Pd硅化物薄膜形成的影响。在Si(111)衬底上,形成外延生长的Pd<sub>2</sub>Si;在Si(100)衬底上,Pd<sub>2</sub>Si为择优取向的多晶。实验结果表明,在这两种Si衬底上,Pd硅化物有不同的形成温度和相转变温度。文中讨论了退火温度对Pd<sub>2</sub>Si的结构、组分和电阻率的影响,并应用热力学规律及界面作用过程解释了实验结果。

**关键词:** 金属-半导体界面, 硅化物, 金属化薄膜。

**中图法分类号:** O484-1

## 1 引言

过渡金属硅化物在超大规模集成电路(VLSI)制造工艺中具有广泛的应用前景<sup>[1]</sup>。Pd硅化物形成温度低,形成的硅化物物相单一、稳定,且与制造工艺有较好的相容性,近年对Pd/Si界面反应及Pd<sub>2</sub>Si, PdSi结构和性能的研究非常活跃<sup>[2-4]</sup>。

本文用X射线衍射(XRD), Auger电子能谱(AES)等技术对常用的Si(111)和Si(100)两种单晶衬底上Pd硅化物的形成过程及不同取向的差异进行了观测比较;同时分析了不同退火温度对Pd<sub>2</sub>Si结构、成分和电阻率的影响。

## 2 实验

本实验所用硅片为掺磷n型单晶硅,电阻率2—5Ω·cm,硅片采用常规化学方法清洗。金属Pd淀积采用钨丝热蒸发,蒸发台预真空约为 $1.5 \times 10^{-5}$  torr。蒸发厚度由称重法测定,样

1989年4月7日收到。

本工作为中国科学院中国科技大学结构分析开放实验室基金资助项目。

品采用真空退火, 退火真空度约 $1\sim 2\times 10^{-5}$  torr.

XRD实验在Eigerflex D/MAX-rA转靶X射线衍射仪上进行, Cu靶( $\lambda_{\text{Cu}}=1.54\text{ \AA}$ ), 40kV, 150mA. AES测量在ESCA LAB MK-II型电子能谱仪上进行. 深度剖析时,  $\text{Ar}^+$ 离子枪电压为5kV, 电流为7 nA; 电子枪电压为3 kV, 电流为130nA.

### 3 结果

图1是不同退火温度下Pd/Si(111)和Pd/Si(100)界面反应的XRD谱, 左边是Pd/Si(111)的情况, 右边是Pd/Si(100)的情况. 退火前的XRD谱表明淀积薄膜由Pd多晶组成.

由图可看到: 对Pd/Si(111)系统, 经 $180^\circ\text{C}$ . 60分钟退火, 出现了 $\text{Pd}_2\text{Si}(002)$ 衍射峰. 随退火温度提高, 衍射峰增强而半宽度减小, 并不出现其他衍射峰. 这说明在Si(111)衬底上, 只形成一种取向的 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 晶粒, 并且随退火温度提高,  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 结晶状态越来越好. 当退火温度增至 $800^\circ\text{C}$ 时,  $\text{Pd}_2\text{Si}(002)$ 峰强度开始下降. 经 $850^\circ\text{C}$ 退火,  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 衍射峰消失, 代之以一组PdSi多晶衍射峰. PdSi并不稳定, 在较低温下退火会重新转变为 $\text{Pd}_2\text{Si}$ . 经 $700^\circ\text{C}$ , 2小时退火后, XRD谱中PdSi和 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 衍射峰共存, 重新出现的 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 已不存在择优取向.

对于Pd/Si(100)界面反应, 总趋势与Pd/Si(111)界面反应基本相似, 但也存在一些明显区别. 首先, 经 $180^\circ\text{C}$ 退火, XRD谱上无 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 衍射峰,  $200^\circ\text{C}$ 退火后出现很弱的 $\text{Pd}_2\text{Si}(111)$ 峰, 经 $250^\circ\text{C}$ 退火后, 才开始出现较强的 $\text{Pd}_2\text{Si}(002)$ 峰, 但 $\text{Pd}_2\text{Si}(111)$ 峰同时存在. 这表明, 在Si(100)衬底上,  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 的形成温度比Si(111)衬底上至少低 $20^\circ\text{C}$ ;  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 晶粒沿(0001)方向有较强的择优取向, 同时也存在其他取向的 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 晶粒. 经 $750^\circ\text{C}$ 退火, 在 $\text{Pd}_2\text{Si}(002)$ 峰继续存在的同时, XRD谱上开始出现PdSi衍射峰.  $800^\circ\text{C}$ 退火后, PdSi峰略有增强, 而相应温度退火后的Pd/Si(111)系统中无PdSi相出现. 因此可以认为: Si(100)衬底上,  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 向PdSi转变的温度要低于Si(111)衬底 $50\sim 100^\circ\text{C}$ .

在进行以上分析的同时, 我们发现: 无论是Pd/Si(111)系统, 还是Pd/Si(100)系统,  $\text{Pd}_2\text{Si}$ 晶面间距随退火温度升高而下降. 如表1所示: 对Pd/Si(111)系统,  $180^\circ\text{C}$ 退火后,  $d_{\text{Pd}_2\text{Si}}=1.742\text{ \AA}$ .  $800^\circ\text{C}$ 退火后,  $d_{\text{Pd}_2\text{Si}}=1.689\text{ \AA}$ , 共下降了 $0.05\text{ \AA}$  (以上 $d$ 值均指(002)晶面间距).

表1 不同退火温度下 $\text{Pd}_2\text{Si}$ 晶面间距的变化 (均指 $\text{Pd}_2\text{Si}(002)$ 晶面间距)

		退 火 温 度 ( $^\circ\text{C}$ )					
		180	200	250	600	750	800
Pd/Si(111)	$2\theta(^\circ)$	52.48	52.52	52.89	53.75	54.10	54.25
	$d(\text{ \AA})$	1.742	1.740	1.730	1.703	1.693	1.689
Pd/Si(100)	$2\theta(^\circ)$	/	/	53.08	53.85	53.91	53.96
	$d(\text{ \AA})$	/	/	1.717	1.700	1.699	1.698

退火温度不同也导致样品导电性能的变化. 如图2所示; 退火温度从 $300^\circ\text{C}$ 变到 $500^\circ\text{C}$ 时,

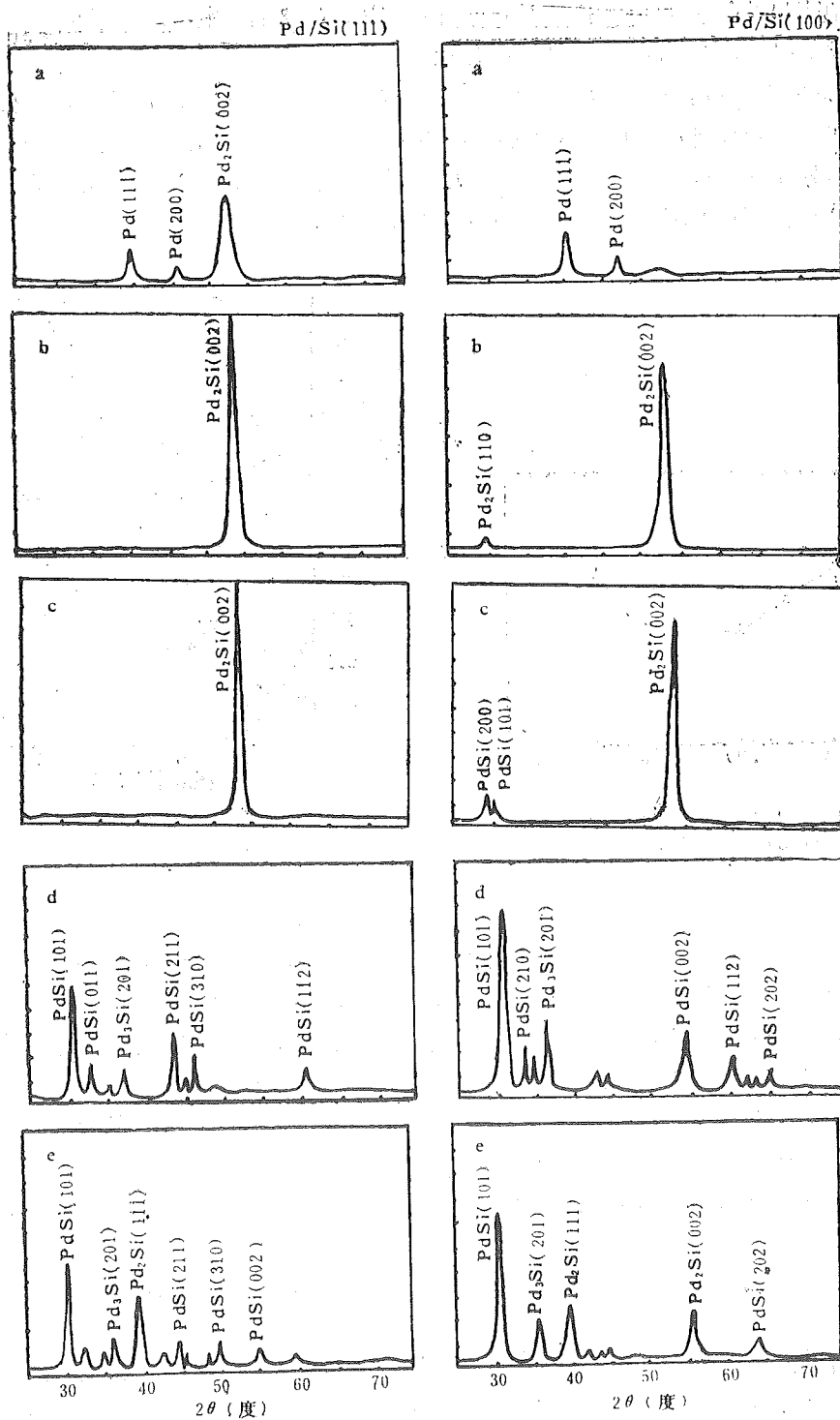


图 1 不同退火温度下Pd/Si(111)和Pd/Si(100)界面反应的XRD谱。  
 退火条件: (a) 180°C, 60min (b) 600°C, 30min (c) 750°C, 30min (d) 850°C, 30min  
 (e) 850°C, 30min + 700°C, 120min

表面方块电阻 $R_{\square}$ 呈下降趋势。这是因为界面反应使样品表面导电层厚度增加,从而使 $R_{\square}$ 减小。但500°C以后, $R_{\square}$ 随退火温度升高而增大。

针对以上现象,我们对不同退火温度的Pd/Si(111)样品做了AES成分深度剖析。如图3所示:经250°C,30分钟退火后,硅化物层中的Pd/Si原子组分比基本为2:1;而样品经650°C,30分钟退火后,Si成分比明显上升,Pd/Si组分比接近1:1。因此,退火温度的提高导致硅化物层中Si的成分增多。使薄膜导电能力下降。

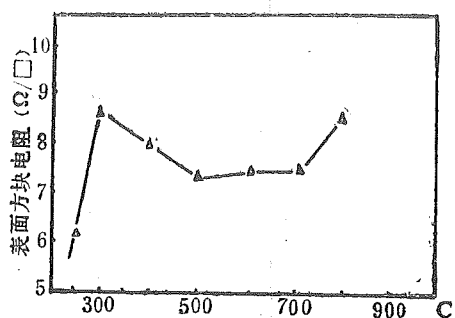


图2 Pd/Si(111)表面方块电阻随退火温度的变化  
退火时间30分钟,Pd淀积厚度为300Å

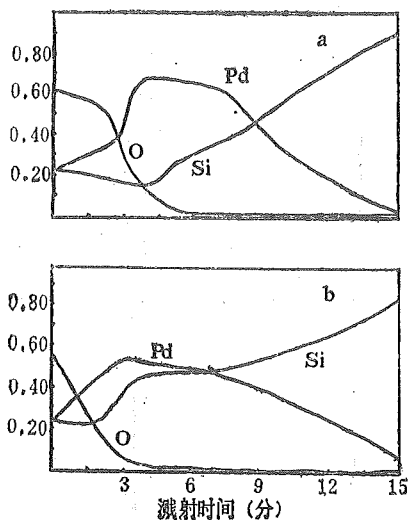


图3 不同退火温度的Pd/Si(111)成分深度剖析  
(a) 250°C,30分钟 (b) 650°C,30分钟

#### 4 讨论

Tu等曾报道<sup>[6]</sup>: Pd<sub>2</sub>Si晶体是六方结构,(0001)底平面与Si(111)晶面有良好的匹配,因此,在Pd/Si(111)界面退火形成Pd<sub>2</sub>Si的外延生长,外延取向关系是:〈111〉Si||〔0001〕Pd<sub>2</sub>Si,〈110〉Si||〈1010〉Pd<sub>2</sub>Si。从XRD谱看,我们的结果是与此相符合的,即Pd<sub>2</sub>Si沿〔0001〕方向的外延生长导致很强的(002)衍射峰((001)峰因消光不出现)。但在Si(100)衬底上,XRD谱表明Pd<sub>2</sub>Si存在较强的〔0001〕方向择优取向,同时,还存在其他取向的Pd<sub>2</sub>Si晶粒。因此,Si(100)衬底上不形成Pd<sub>2</sub>Si的外延生长。

对于Si(111)和Si(100)两种衬底上硅化物形成和相变温度的差异,我们从热力学角度作出定性解释。

硅化物的形成分为成核和晶核长大两过程。考察成核过程,按经典成核理论:

$$u_i - iu_1 = \sigma A + \Delta\epsilon_v V$$

$u_i$ 为*i*个原子(或分子)构成的原子(或分子)团的化学势, $u_1$ 为单个原子(或分子)的化学势, $\sigma$ 为表面或界面自由能, $\Delta\epsilon_v$ 是体自由能的变化,即相变驱动力, $A,V$ 分别是面积和体积。

根据上式,可求出晶核的临界半径或临界体积。晶核超过该体积将会不断继续生长,形成新相。显然, $\sigma$ 和 $\Delta\epsilon_v$ 是成核过程的两个重要参数。



成核几率  $N \propto \exp[-f\sigma^3/(\Delta\epsilon_v)^2 KT]$ , ( $f$  是形状因子)。我们认为: 造成 Si(111) 和 Si(100) 两种衬底上 Pd<sub>2</sub>Si 形成温度不同的原因在于  $\sigma$  (表面或界面自由能) 的不同。在 Pd/Si(111) 界面, 由于 Pd<sub>2</sub>Si 是外延生长, 因此成核阶段的 Pd<sub>2</sub>Si 晶核表面自由能应较小, 使其成核几率较大, 并且, 在 Pd<sub>2</sub>Si 的生长阶段, Pd<sub>2</sub>Si/Si(111) 界面自由能也很小。因此, Si(111) 衬底上 Pd<sub>2</sub>Si 的形成温度较低。

对于 Pd<sub>2</sub>Si 向 PdSi 转变温度的差别, 则需从能量角度考虑: Si(111) 衬底上 Pd<sub>2</sub>Si 的外延生长使 Pd<sub>2</sub>Si/Si(111) 界面自由能很小, 要打破 Pd<sub>2</sub>Si 晶格就要更多的能量。因此, Si(111) 衬底上 Pd<sub>2</sub>Si 转变为 PdSi 的温度要高于 Si(100) 衬底。

对于不同退火温度下 Pd<sub>2</sub>Si 晶面间距的下降及电阻率的提高, 是与硅化物中 Pd/Si 成分比的变化相联系的。由 AES 深度剖析可知, 在 Pd<sub>2</sub>Si 薄膜形成以后, 随着退火温度的升高, Si 原子继续向 Pd<sub>2</sub>Si 层中扩散, 导致 Pd<sub>2</sub>Si 中 Si 原子的相对富余, 使 Pd<sub>2</sub>Si 晶面间距变小, 电阻率上升。

但是, 从 XRD 分析看到, 直至 800°C 退火, Pd<sub>2</sub>Si 衍射花样基本未变。这表明尽管样品中 Pd/Si 成分比产生了明显变化, 但 Pd<sub>2</sub>Si 点阵依然存在。因此, 我们必须考虑扩散进入 Pd<sub>2</sub>Si 中的 Si 原子以什么方式存在。显然, Si 原子不能作为间隙杂质占据 Pd<sub>2</sub>Si 中的空位缺陷或 Pd<sub>2</sub>Si 结构中本身的空洞位置, 因为这样只能导致晶面间距的增大。可能的情况是 Si 原子替换 Pd 原子, 占据了点阵中部分 Pd 原子的位置, 即富余的 Si 原子以替位形式存在。由于 Si 原子半径小于 Pd 原子 (Si: 1.17 Å, Pd: 1.28 Å) 导致面间距减小, 同时, Si 的替位使部分 Pd-Si 键被 Si-Si 键取代, 导致硅化物金属性减弱, 电阻率上升。

## 5 结论

(1) 对于 Pd/Si 系统, 实验证明, 在 Si(111) 衬底上形成 Pd<sub>2</sub>Si 的外延生长; 在 Si(100) 衬底上, Pd<sub>2</sub>Si 为择优取向的多晶体。正是这样结晶状态的差别使 Pd<sub>2</sub>Si/Si(111) 和 Pd<sub>2</sub>Si/Si(100) 系统界面自由能等热力学参数存在差异, 从而使两种 Si 衬底上 Pd<sub>2</sub>Si 的形成温度及 Pd<sub>2</sub>Si 向 PdSi 转变的温度不同。

(2) Pd 在 Si 衬底上形成 Pd 硅化物后, 进一步提高退火温度会使 Si 原子继续向硅化物层中扩散, 导致 Pd<sub>2</sub>Si 中 Si 成分较化学配比相对富余。这些富余的 Si 原子以替位形式存在于晶格中, 使 Pd<sub>2</sub>Si 晶面间距减小, 金属性减弱, 电阻率上升。

## 参 考 文 献

- [1] Murarka S P, *Silicide for VLSI Application*, Academic Press, New York, 1983, p2.
- [2] Hiraki A, *Surf. Sci. Rept.*, **3** (1984), 357.
- [3] Nemanich R J, Thompson M J, Tsai C C, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 3** (1985), 1142.
- [4] Nava F, Majni G, Ottaviani G, *Thin Solid Films*, **79** (1981), 319.
- [5] Tu K N, *J. Vac. Sci. Technol.*, **11** (1974), 86.

# A Study of the Interfacial Reaction of Pd/c-Si

Shen Bo Shi Yisheng Zhao Texiu

(USTC)

Hsu Chenchia

(*Institute of Semiconductor Sinica Academia*)

## Abstract

By means of XRD, AES and others we investigated the formation of Pd silicides on Si(111) and Si(100) substrates, compared different interfacial performances and the formed silicides between Pd/Si(111) and Pd/Si(100) systems. It is shown that the Pd silicides have different formation temperatures and different phase change temperatures. We also analysed the effect of a variety of annealing temperatures on the structure, stcichiometry, and resistivity of the Pd silicide. All the results are explained in the light of thermodynamics and interfacial process.

**Key words:** metal-semiconductor interface, silicide, metallized thin film.

# BPGR 积木块自动布局和总体布线系统

陈洪亮 王东生 庄镇泉

(电子技术基础部)

## 摘 要

超大规模集成电路 (VLSI) 的积木块布局布线是一个非常复杂的问题。本文介绍了我们自行研制的 VLSI 积木块布局和总体布线系统 BPGR。该系统包括积木块划分、布局优化、通道划分、总体布线、交互式布局布线调整等过程。BPGR 系统能最有效地利用芯片资源和最大限度地提高芯片性能。编程和实验证明, BPGR 系统是 VLSI 积木块布局布线设计的有效工具。

**关键词:** VLSI 设计, 布局, 总体布线。

**中图法分类号:** TP391.7

## 1 引言

众所周知, 在 VLSI 自动布图 (包括布局和布线) 设计方法中, 主要有门阵列法、标准单元法、PLA 法和积木块法<sup>[1]</sup>。到目前为止, 前三种布图方法已有不少成熟的软件系统在运行, 但积木块布图方法还很少用于 VLSI 设计之中。这主要是积木块布图较之前三种方法难度较大, 是 VLSI 设计领域的难题之一。尽管如此, 积木块布图法却以其独特的优点而成为热门的研究课题:

(1) 积木块形状是任意矩形, 这在积木块设计阶段能既灵活又合理地设计其形状, 使得积木块面积达到尽可能小的程度。

(2) 积木块的尺寸是任意的, 在不超越芯片边界的约束条件下, 使得积木块布图设计的自由度增大, 便于积木块占用芯片的总面积尽可能减小。

(3) 积木块在芯片中的几何位置是随意的, 利于设计者尽可能多地考虑积木块间的联接关系, 从而使总的连线长度减少。

本文就是从上述思想出发, 进行了 VLSI 积木块布局和总体布线的研究, 并研制了相应的软件系统 BPRG。

## 2 BPGR 系统概述

BPGR 是一个用于 VLSI 设计的积木块布图系统。它主要包括数据预处理、积木块划分、布局优化（包括取向优化和线长优化）、确定通道结构、总体布线、改善布线和交互式布图调整等过程。

另外还有一个应用子程序库。程序框图如图 1 所示。数据预处理过程接收输入数据，并进行必要的计算、分类，整理出 BPGR 系统所要求的数据格式。积木块划分过程利用修改的最小切割算法，将积木块进行二划分，以构造一个初始布局。取向优化过程用来调整积木块的放置方式，使得积木块所占芯片面积最小；线长优化过程用来部分调整积木块的位置，使各积木块的连线总长度最短。布局完成之后，就可初步确定通道结构。采用改进的标号算法寻找线网的最短路径树，加快了初始布线速度，提高了初始布线的效率。在芯片尺寸允许的前提下以通道布线密度均匀为目标，采用调整积木块位置及旋转矩形积木块方向等一系列局部优化策略来改善布线，并在此基础上进行了通道定序。交互式布图调整过程把布局和总体布线图在图形显示器上画出来，利用人工干预，调整积木块的布局和部分布线路径。应用子程序库提供了一些服务子程序，供其它程序调用。

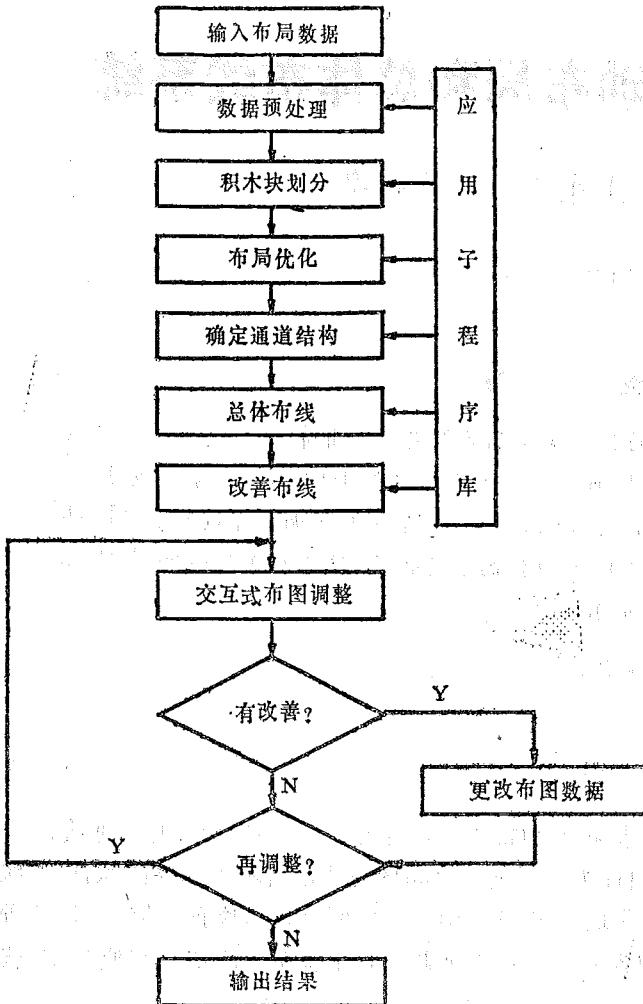


图 1 BPGR 系统框图

一些服务子程序，供其它程序调用。

## 3 BPGR 系统的主要过程及特点

### 3.1 积木块划分算法

由于积木块问题的特殊性（其尺寸是不确定的），因此需要用一些较为简单又行之有效的算法构造一个初始布局。本文采用的算法是基于最小切割算法的思想<sup>[2]</sup>，考虑积木块尺寸的约束，形成一种适合于积木块布局的构造性算法。设：

$b_n$  为积木块数目； $n_o$  为线网数目； $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$  为积木块集合， $N = \{n_1, n_2, \dots, n_o\}$  为线网集合； $h_i, w_i$  为积木块  $b_i$  的长和宽； $S_i = h_i + w_i$  为积木块的尺寸； $P_i$  为

线网 $n_i$ 上的积木块集合;  $P$ 、 $Q$ 为两个划分集合,称划分段; $S_p = \sum_{b_i \in P} S_{b_i}$ 为划分集 $P$ 中积木

块尺寸之和;  $S_q = \sum_{b_i \in Q} S_{b_i}$ 为划分集 $Q$ 中积木块尺寸之和;  $\alpha_p(n_i) = |P \cap P_{n_i}|$ 为既在线网

$n_i$ 上又在划分集内的积木块数目;  $\alpha_q(n_i) = |Q \cap Q_{n_i}|$ 为类似 $\alpha_p(n_i)$ 。

**定义 1** 线网 $n_i$ 的权定义为

$$wt_{n_i} = b_{n_i} + \left( \sum_{k \in n_i} S_k \right)^2 / \left[ 100 \max_{n_j \in N} \left( \sum_{k \in n_j} S_k \right) \right]$$

**定义 2**  $P = P_f \cup P_L$ , 其中 $P_f$ 称为自由积木块集合,其元素是初始划分后集合 $P$ 内的积木块;  $P_L$ 称为锁定积木块集合,其元素是从集合 $Q$ 移至集合 $P$ 的积木块。

**定义 3**  $Q = Q_f + Q_L$  其中, $Q_f$ 和 $Q_L$ 的意义类似 $P_f$ 和 $P_L$ 。

根据上述假设和定义,积木块划分算法可描述为:

输入:  $B = \{b_1, b_2, \dots, b_{b_n}\}$ ,  $N = \{n_1, n_2, \dots, n_{n_0}\}$   
 $P_{n_i}, j = 1, 2, \dots, b_n, S_{b_i}, i = 1, 2, \dots, b_n$

输出: 一个划分  $(P, Q)$

过程:

(1) 求  $wt_{n_i}, n_i \in N$ ;

(2) 按  $wt_{n_i}$  的降序排列 $N$ 中各线网;

(3)  $P = \phi, Q = \phi, S_p = 0, S_q = 0$ ;

(4)  $N = N - n_i$ ;

(5) 若  $S_p \leq S_q$ , 则

$$S_p = S_p + \sum S_{b_i}, \quad b_i \in P_{n_i} \text{ 且 } b_i \notin P \cup Q$$

$$P' = \{b_i | b_i \in P_{n_i} \text{ 且 } b_i \notin P \cup Q\}$$

$$P = P \cup P'$$

若  $S_p > S_q$ , 则

$$S_q = S_q + \sum S_{b_i}, \quad b_i \in P_{n_i} \text{ 且 } b_i \notin P \cup Q$$

$$Q' = \{b_i | b_i \in P_{n_i} \text{ 且 } b_i \notin P \cup Q\}$$

$$Q = Q \cup Q'$$

(6) 若  $N \neq \phi$  则返回 (4);

(7)  $j = 0$ ;

(8)  $j = j + 1$ , 计算  $\alpha_p(n_j)$  和  $\alpha_q(n_j)$ ;

(9) 若  $\alpha_p(n_j) = 1$  且  $\alpha_q(n_j) > 0$  则

$$P = P - (P \cap P_{n_j})$$

$$Q = Q + (P \cap P_{n_j})$$

若  $\alpha_p(n_j) > 0$  且  $\alpha_q(n_j) = 1$  则

$$P = P + (Q \cap P_{n_j})$$

$$Q = Q - (Q \cap P_{n_j})$$

(10) 若  $j \leq n_0$ , 则返回 (8);

(11) 计算  $S_P$  和  $S_Q$ ;

(12) 若  $|S_P - S_Q| \leq \frac{1}{2} \min(S_P, S_Q)$  则结束,

若  $|S_P - S_Q| > \frac{1}{2} \min(S_P, S_Q)$ , 则

若  $S_P < S_Q$ , 则  $Q = Q - b_i, P = P + b_i, b_i \in Q_F$

若  $S_P > S_Q$ , 则  $P = P - b_i, Q = Q + b_i, b_i \in Q_F$

返回 (11) .

上述积木块划分算法过程具有以下特点:

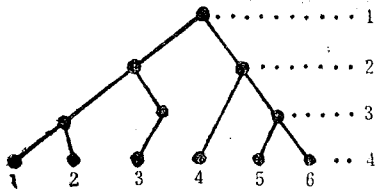


图 2 划分树

(1) 利用最小切割算法思想, 构造了一个初始布局, 较好地处理了积木块之间的连接关系;

(2) 在构造初始布局的过程中, 考虑积木块形状的不确定性, 以积木块尺寸为依据, 适当调整积木块的位置, 使得布局均匀.

经过积木块划分过程, 形成了一个划分树. 树的每一个顶点表示一个积木块或划分段, 树又分为若干级,

第一级为积木块顶点, 其它级的顶点均表示划分段. 图 2 给出了一个划分树的例子, 这个树分为 4 级, 含 6 个积木块.

### 3.2 取向优化过程

所谓取向是指积木块的放置方式. 在 BPGR 中矩形积木块只有两种放置方式: 取向为 1, 表示积木块的长边在水平方向; 取向为 2, 表示积木块的长边在垂直方向. 划分段的形状也为矩形, 段内的积木块 (或子划分段) 要么在水平方向一字排开, 称该划分段的取向为 1; 要么在垂直方向一字排开, 称该划分段的取向为 2.

由于积木块和划分段都是矩形, 因此, 在划分树中, 同一父节点的两个子节点的相对位置关系有如下八种, 如图 3 所示.

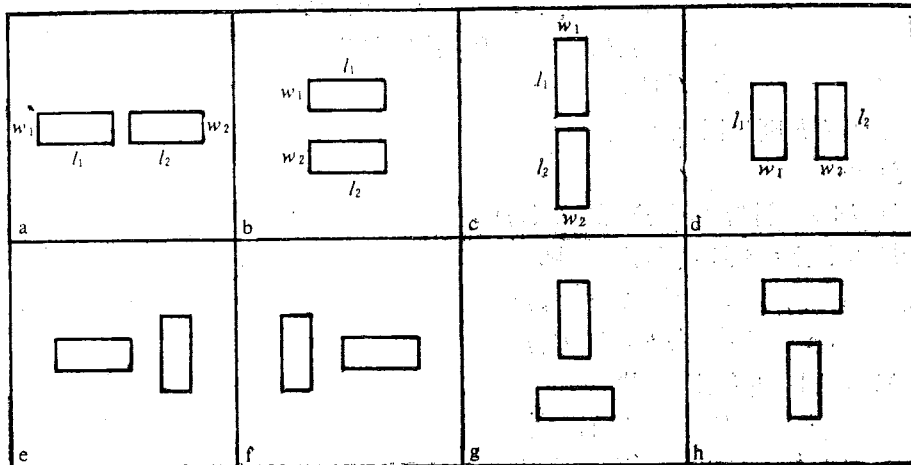


图 3 子节点的相对位置关系

取向优化过程的主要目标是使积木块与芯片的总面积最小，这就必须使每个划分段的面积尽量小。其过程分为两步：

第一步：对于图3中 e、f、g、h 四种情形，调整其中某积木块（或划分段）的取向，使它们变成 a、b、c、d 四种情形之一；

第二步：对于图3中的 a、b、c、d 四种情形，若  $l_1 + l_2 + \max(w_1, w_2) \geq w_1 + w_2 + \max(l_1, l_2)$ ，则取 b 或 d 所示的位置关系；

若  $l_1 + l_2 + \max(w_1, w_2) < w_1 + w_2 + \max(l_1, l_2)$ ，则取 a 或 c 所示的位置关系。

### 3.3 线长优化过程

线长优化过程的主要目标是使各线网连线总长度最短。其方法是：对于图2所示的划分树，试交换同一父节点的两个子节点的位置，若交换后总线长减少，则认可该交换，否则放弃该交换。各线网连线总长度的估算方法如下<sup>[3]</sup>：

设  $m_k$  为线网数， $m_k$  为第  $k$  个线网上的积木块数， $x_i, y_i, i = 1, 2, \dots, m_k$  为各积木块的中心坐标。那么，第  $k$  个线网的重心坐标为

$$\bar{x}_k = \frac{1}{m_k} \sum_{i=1}^{m_k} x_i \quad \bar{y}_k = \frac{1}{m_k} \sum_{i=1}^{m_k} y_i$$

第  $k$  个线网的长度  $w_k$  可估算为

$$w_k = \sum_{i=1}^{m_k} [(x_i - \bar{x}_k)^2 + (y_i - \bar{y}_k)^2]^{1/2}$$

各线网总线长为

$$w = \sum_{k=1}^{m_s} w_k = \sum_{k=1}^{m_s} \sum_{i=1}^{m_k} [(x_i - \bar{x}_k)^2 + (y_i - \bar{y}_k)^2]^{1/2}$$

### 3.4 确定通道结构

对给定的积木块布局图：

**定义 1** 相邻积木块间的空隙称为布线通道。

**定义 2** 布线通道的交点称节点。

**定义 3** 相邻节点之间的布线通道称子通道，简称通道。通道又可分为垂直通道和水平通道两种。

图4所示的一组线段就是表示这些通道的一个集合。通道的这种表示称为通道结构<sup>[4]</sup>。

在上述定义中，必须在布局图中避免图5(a)中阴影部分所示的“虚通道环”的出现。由于BPGR系统对矩形积木块的划分是运用修改的最小切割法，或者说，是在群块划分的基础上获得最佳布局的。按上述方法，图5中的4个矩形积木块将首先被划分成A、B两个群块，如图5(b)所示。然后再划分成积木块布局图5(c)。由图(c)所得的通道结构，将不再出现“虚通道环”。

在通道结构中，节点出现在布线通道的L型交接点，T型交接点或十字型交叉点上。

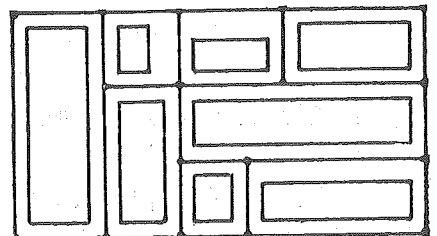


图4 通道结构

由于通道本身具有宽度，节点将并非一个点，而是一个区域，如图6所示。在布线时该区域

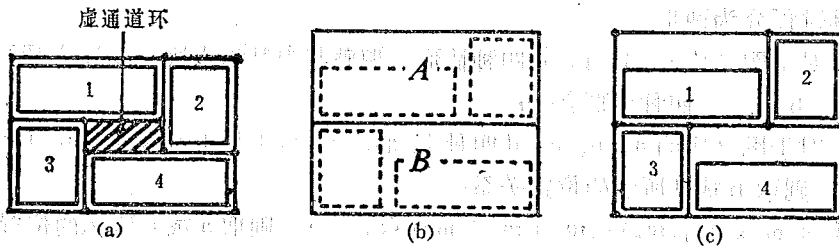


图5 虚通道环

按“开关盒” (switch box) 问题进行处理。

### 3.5 总体布线策略

初始总体布线以连线总长最短为目标，即对每个线网求出连接它的最短路径<sup>[5]</sup>。BPGR系统中采用朝向目标的标号算法予以实现：

有初始总体布线的带权拓朴结构图  $G = (V, E)$ ，其中  $V$  表示顶集， $E$  表示边集。顶点

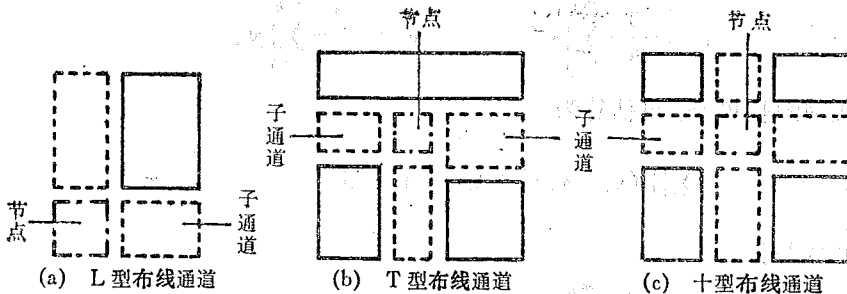


图6 节点

$V_i \in V$  对应于节点  $x_i$ ， $G$  中边  $(x_i, x_j)$  的权代表通道长度，记作  $w(x_i, x_j)$ 。自顶点  $x$  到  $y$  的最短距离记为  $d(x, y)$ 。

第一步，对于每个线网  $N_i$ ，定义一个顶点集合  $V(i)$ 。

第二步，对于  $V(i)$  中的两个顶点  $x, y$ ，在  $V - x = \bar{s}$  中找到  $x_1$ ，使  $w(x, x_1)$  在向  $y$  的方向上达到极小，即使

$d(x, \bar{s}) = w(x, x_1) = \min\{w(x, u) \mid u \in \bar{s}\}$  其中  $d(x, \bar{s})$  表示由点  $x$  到点集  $\bar{s}$  中向  $y$  方向的点的最短距离。于是得到集合  $s_1 = \{x, x_1\}$ 。

第三步，设已找到  $s_i = \{x, x_1, x_2, \dots, x_i\}$ ，在  $V - s_i = \bar{s}$  中找到点  $y'$ ，使得

$d(x, \bar{s}_i) = d(x, y') = d(x, x_k) + w(x_k, y') = \min\{d(x, x_i) + w(x_i, y') \mid x_i \in s_i, y' \in \bar{s}_i\}$  并将所得到的顶  $y'$  作为  $x_{i+1}$  加进  $s_i$  得  $s_{i+1}$ 。

第四步，重复第三步，直到  $y' = y$  为止。

第五步，若  $V(i)$  中除  $x, y$  外，有第三个顶点  $z$ ，则重复第二步，方向则朝向已找到顶集  $s_i$  中的最短路径顶点。在确定顶点集  $s_i$  时的策略如下：

如图7所示，由顶  $x$  向顶  $y$  走线，可走路径为  $x-a-y$ ，也可以走  $x-b-y$ 。究竟取  $a$  还是  $b$ ，取决于  $a$  和  $b$  朝向  $z$  的距离（垂直距离与水平距离之和）。很自然，图7中则取  $x-b-y$ 。

因此，对于多顶点集线网  $N_i$ ，重复第二步，第三步和第四步。



### 3.6 改善布线策略

初始布线以连线总长最短为目标, 必将导致局部布线区域的走线过于拥挤, 加之确定通道结构时所引起的布线通道宽度不一, 使得布线区域中单位面积内的走线长度疏密不均。这种布线密度不匀现象主要反映在两个方面: ①垂直通道或者水平通道之间的线网走线差异较大, 以致在相同面积的通道中, 线网走线长度不等; ②垂直通道总的走线拥挤度与水平通道总的走线拥挤度的不均。

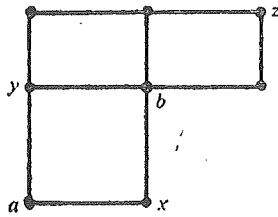


图 7 走线策略

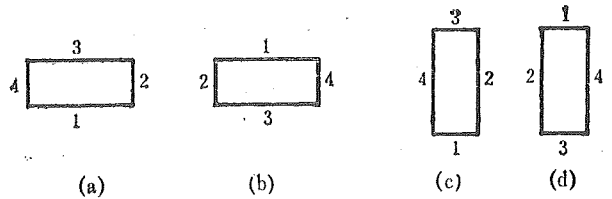


图 8 积木块放置方式及旋转放置

就第一个问题而言, 芯片中积木块几何位置的可平移度大, 给布线通道走线均匀带来了方便, 第二个问题, 则采用旋转积木块等局部优化策略, 给布线以进一步的改善。

如图 8 所示, 矩形积木块在芯片中的放置呈 (a)、(c) 两种情况, 即水平放置和垂直放置两种, 若对它们的四条边分别标有 1、2、3、4 四个记号, 在不改变水平或垂直放置的情况下, 还可旋转成 (b) 和 (d) 两种。由于积木块上线网的端接要求不同, 它们的旋转, 必然引起线网走线的变动, 并给局部调整走线格局提供了可能。

对通道布线图  $G$ , 有  $x_1, x_2, \dots, x_i$  为其  $i$  个垂直子通道布线区。令  $l_{x_i}$  为  $x_i$  中的布线长度,  $s_{x_i}$  为子通道  $x_i$  的面积。

同样, 存在  $j$  个水平通道区域  $y_1, y_2, \dots, y_j$ , 令  $l_{y_j}$  中的布线长度为  $l_{y_j}$ ,  $y_j$  的面积为  $s_{y_j}$ 。

则垂直子通道布线密度定义为垂直子通道单位布线面积中的走线长度, 记为

$$\text{den}(x_i) = \frac{l_{x_i}}{s_{x_i}}$$

可以看出,  $\text{den}(x_i)$  越小, 表明  $x_i$  子通道的布线越疏;  $\text{den}(x_i)$  越大, 布线越密, 越拥挤。

同样可以定义水平子通道布线密度

$$\text{den}(y_j) = \frac{l_{y_j}}{s_{y_j}}$$

且可得垂直布线密度:  $\text{den}(x) = \frac{1}{i} \sum_{k=1}^i \frac{l_{x_k}}{s_{x_k}}$

水平布线密度:  $\text{den}(y) = \frac{1}{j} \sum_{k=1}^j \frac{l_{y_k}}{s_{y_k}}$

于是有垂直子通道密度变量:  $\alpha \triangleq \frac{\text{den}(x_i)}{\text{den}(x)}$

水平子通道密度变量:  $\beta \triangleq \frac{\text{den}(y_i)}{\text{den}(y)}$

纵横布线密度变量:  $\delta \triangleq \frac{\text{den}(x)}{\text{den}(y)}$

具体算法是

第一步, 对垂直子通道的布线区域和水平通道的布线区域进行修正:

若  $\alpha > 1$ , 垂直通道面积的正修正量

$$\Delta s_{x_i} = \frac{l_{x_i}}{\text{den}(x)} - s_{x_i}$$

若  $\alpha < 1$ , 垂直通道面积的负修正量

$$\Delta s_{x_i} = s_{x_i} - \frac{l_{x_i}}{\text{den}(x)}$$

同理, 若  $\beta > 1$ , 水平通道面积的正修正量

$$\Delta s_{y_i} = \frac{l_{y_i}}{\text{den}(y)} - s_{y_i}$$

若  $\beta < 1$ , 水平通道面积的负修正量

$$\Delta s_{y_i} = s_{y_i} - \frac{l_{y_i}}{\text{den}(y)}$$

第二步, 通过旋转积木块局部调整线网走线路径。

若  $\delta > 1$ , 调整前的  $\delta$  与调整后的  $\delta'$  的差须大于零; 若  $\delta < 1$ , 调整前的  $\delta$  与调整后的  $\delta'$  的差须小于零; 且调整后的走线总长小于或等于调整前的走线总长, 则调整。否则不作调整。

#### 4 实验结果

美国加利福尼亚大学伯克利分校于 1985 年研制了 BBL.2 系统<sup>[6]</sup>, 它也是一个用于积木块布局布线的系统。本文所用实例就是选自 BBL.2 系统所用的布图数据。该例是一个含

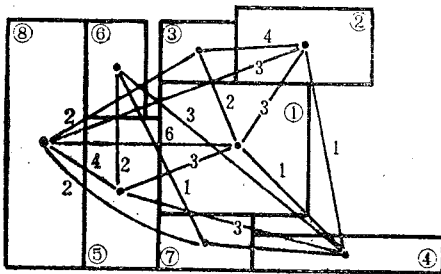


图 9 BPGR 的结果

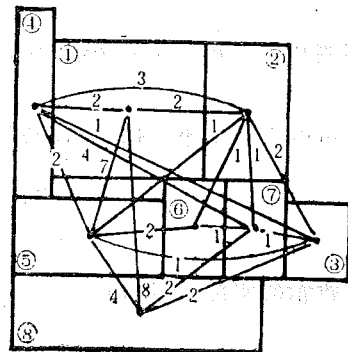


图 10 BBL.2 的结果

有 8 个积木块, 38 个线网, 固定芯片边界的积木块布图问题。BPGR 系统和 BBL.2 系统对该例的运行结果如图 9 和图 10 所示, 图中的 8 个矩形分别为 8 个积木块, (i) 则是第 i 个

积木块的编号, 它们间的相对位置表明了布局情况。各积木块中心点间的连线表示各积木块

表 1 实验数据的对比

程序名	占芯片总面积 (长×宽)	总线长 ( $W$ )
BBL.2	34,200 (190×180)	956.16
BPGR	32,200 (230×140)	1056.4

间线网的联接关系, 连线旁的数字为权, 反映出连线的长度、条数及布线概况。表 1 给出了该例的实验数据的对比。

## 5 结论

通过本文的讨论, 可得出如下结论:

(1) VLSI 积木块布图问题是一个复杂的问题。BPGR 系统较好地解决了这一问题, 其性能与美国加州大学伯克利分校的 BBL.2 系统相当。

(2) BPRG 系统的积木块划分算法较好地兼顾了积木块占芯片总面积与线网总长度这两个目标函数。

(3) 由于采用了朝向目标的标号算法, 提高了布线速度, 采取了平移积木块位置及旋转积木块方向等局部优化策略, 改善了布线均匀度。

(4) BPGR 系统的交互式布图调整子系统, 能充分发挥人的智能, 使布图效果更为理想。

## 参 考 文 献

- [1] Soukup J, *Proc. IEEE.*, 69 (1981), 1281—1304.
- [2] Balakrishnan, Krishnamurthy, *IEEE Trans on Computer*, c—33 (1984), No. 5, 438—446.
- [3] Lu Sha, Dutton R W, 22nd D.A. Conf., IEEE Computer Society Press New York, 1985.
- [4] Chiba T, *Proc. 18th. D.A. Conf.*, IEEE Computer Society Press, New York, 1981, p820—827.
- [5] Gary W C, 21st. D. A. Conf, IEEE Computer Society Press, New York, 1984, p45—51.
- [6] Chen N P, Chen C C, Hsu C P, *et al*, University of California, Berkeley, 1985, p1—28.

# BPGR An automatic Design System for Building-block Placement and Global Routing

Chen Hongliang    Wang dongsheng    Zhuang Zhenquan

*(The Department of Electronic Engineering)*

## Abstract

The VLSI building-block placement and routing is a very complex problem. In this paper, a VLSI building-block placement and global routing system BPGR, which is developed by ourselves, is introduced. System BPGR includes the following subroutines, building-block partition, placement optimization, assignment of routing channel, global routing interactive improvements for placement and routing, and so on. BPGR can effectively utilize chip sources and raise the chip's properties as much as possible. It has proved by programming and experiments that system BPGR is an effective tool for VLSI building-block placement and routing design.

**Key words,** VLSI design, placement, global routing.

# 锌—钒酸酐固态蓄电池

林枫凉 薛立新 朱斌 俞文海

(近代化学系)

(材料科学与工程系)

## 摘 要

本文报道锌蒙脱石 (montmorillonite) 作为固体电解质组装的锌—钒酸酐固态蓄电池, 其开路电压为 1.4—1.5V, 在 82k $\Omega$  负载下, 截止电压 0.9V 时, 单次放电容量为 5.7mA·h, 比能量 11.4W·h/kg, 在 37.7 $\mu$ A/cm<sup>2</sup> 电流密度下, 十小时率充放电循环 25 次。还对部分内容进行简单讨论。

**关键词:** 矿物, 固态蓄电池, 复合阴极。

**中图法分类号:** O646.21

## 1 引言

天然矿物蒙脱石, (以下用 Mont) 因其开放的层状结构, 为离子传导提供了良好的二维通道, 是一种具有开发前景的固体电解质材料。以氢、锂、镁 Mont 作为固体电解质组装的固态电池<sup>[1-3]</sup> 已有人报道, 而以锌改性 Mont 的报道甚少。本文以 Zn—Mont 组成锌—钒酸酐固态蓄电池, 其电压稳定, 贮存性能及充放电性能良好, 有较大的放电容量。Mont 矿物资源丰富, 价格低廉, 这种电池的制造工艺简单, 因此对它的开发应用具有实际意义。

## 2 实验

### 2.1 改性 Zn—Mont 的研制

以安徽某厂提供的天然钙基 Mont (其主要化学组成见表 1) 为原料, 称 30g 试样浸在 150ml 锌盐溶液 (0.5M) 中, 调 pH2.5—3, 在 100 $^{\circ}$ C 下保持 2h 倾出上层清液, 用同量的上述溶液, 重复操作 3—4 次, 然后用蒸馏水清洗数次, 抽滤, 沉淀物在 100—120 $^{\circ}$ C 下烘干, 即为改性 Zn—Mont。其化学组成列于表 1。

### 2.2 Zn—Mont 的电性能测试

**交流电导** 以石墨|样品|石墨为试验电池, 其中“样品”为 Zn—Mont (200 目) 在 3—3.5t/cm<sup>2</sup> 压力下压成  $\phi$ 13 $\times$ 2mm 的圆片, 用 CD—6 型导纳电桥, UD—20 型选频电平表

为电桥的平衡指示器,以UX-16A型交流振荡器为信号源,频率100kHz,信号小于100mV.

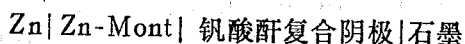
**直流电导** 电池 Zn|Zn-Mont|Zn,以YJ-56型双路直流稳压源提供直流电压,测量电压0.7V.用微安表记录电流,美国产Fluke数字多用表测电压(输入阻抗 $10^{10}\Omega$ ,灵敏度 $1\mu\text{V}$ ).

**电子电导** 按Wayner极化法,电池: Zn|Zn-Mont|石墨,以PF-28型数字静电计(最小量程 $10^{-16}\text{A}$ )测量电流.

**激活能** JWK-702精密控温仪和管式炉配合使用,在 $30^{\circ}\text{C}$ — $80^{\circ}\text{C}$ 温度区间测量电导,结果以 $\ln\sigma$ 对 $1/T$ 作图用最小二乘法拟合出直线(相关系数=0.975),从斜率推求激活能.以上各项测试结果列于表2.

### 2.3 电池的组装

将阳极锌片剪成合适尺寸,填于模具底部,然后依次装入Zn-Mont固体电解质、复合阴极材料、石墨,在 $3\text{t}/\text{cm}^2$ 压力下成型 $\phi 13\times 2\text{mm}$ ,重约0.5g,密封于特制的有机玻璃夹具内,电池的结构:

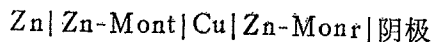


其中复合阴极由 $\text{V}_2\text{O}_5$ :Zn-Mont:石墨=4:4:1.5,随阴极组分不同,电池的开路电压略有变化.

### 2.4 电池性能的测试

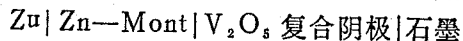
**充放电性能** 以稳压源提供电压,可变电阻调节电流为 $50\mu\text{A}$ ,以x-y函数记录仪记录充放电曲线.恒阻放电(一定负载放电)记录端电压随时间的变化.

**电极极化** 测量方法类似文献[4],实验电池:



其中作为参考电极的铜丝应尽可能细( $\phi 0.05\text{mm}$ ),使之不致影响电解质之间的接触,在不同的放电电流强度下,测求阴、阳极的极化曲线.

**阴极利用率** 称 $\text{V}_2\text{O}_5$ 含量不同的阴极材料各100mg,组装如下电池:



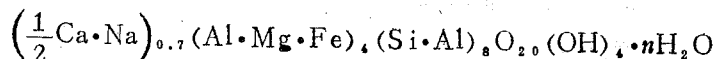
在 $39\text{k}\Omega$ 的负载下放电,记录各电池的放电曲线,并加以比较.

**贮存性能** 密封在特制夹具内的电池,经不同放置时间,用数字多用仪测电池的开路电压以及在 $110\text{k}\Omega$ 的外负载下闭路电压,并推算出内阻.

## 3 结果与讨论

### 3.1 从结构上探讨锌改性Mont的可能性

Mont的通式为:



结晶学参数为  $a=0.523\text{nm}$ ,  $b=0.900\text{nm}$ ,  $c$ 可变, $a=1.48\sim 1.61$ ,  $\beta=1.50\sim 1.64$ ,  $\gamma=150\sim 1.64$ .它是单斜晶系的层状晶体,每一晶层单位由两片顶角朝里的Si-O四面体,中间夹一层Al-(O,OH)八面体组成,因四面体中的Si和八面体中的Al均能发生同型置换(即 $\text{Si}^{4+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ 离子被其它低价阳离子所置换),结果导致单位晶胞带负电荷,因静电

作用,晶层之间吸附了一些低价离子如  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  等,而且其层间还吸附有极性分子 ( $\text{H}_2\text{O}$ ),有利于阳离子的迁移。

表 1 Mont 的 X 荧光分析化学组成

	$\text{Zn}^{2+}$	CaO	$\text{SiO}_2$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{Fe}_2\text{O}_3$	MgO	$\text{K}_2\text{O}$	其它
天然Mont Wt%	<0.03	1.10	77.04	12.07	2.66	0.67	0.75	5.68
Zn—Mont Wt%	4.32	0.06	79.53	8.92	2.25	0.22	0.50	4.20

X 荧光分析结果(见表 1)表明,改性后的 Mont,其化学组成发生一定的变化,锌离子含量明显增多,而  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  等含量有所减少。这是由于  $\text{Zn}^{2+}$  与层间的  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  发生了交换。此外,在酸性介质中部分骨架铝被溶解<sup>[5]</sup>,锌离子也可能进入骨架铝的空位,产生同型置换。以上实验足以表明  $\text{Zn}^{2+}$  改型 Mont 是可行的。

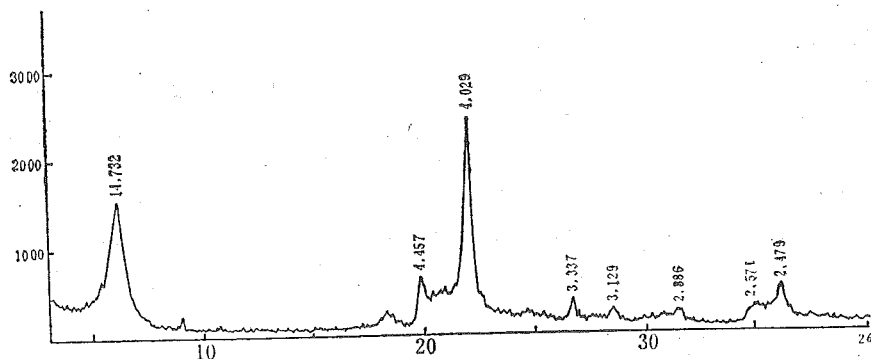


图 1 Mont 的 XRD 图

X 射线衍射看出,改性后 Mont 的图谱与天然 Mont 图谱(图 1)相同,说明改性前后 Mont 的结构并没有发生变化,仍保持层状开放性结构,提供了离子迁移畅通的通道。

### 3.2 Zn—Mont 中 $\text{Zn}^{2+}$ 的电迁移

表 2 Mont 的电性能

	交流电导率 ( $\Omega\text{cm}$ ) <sup>-1</sup>	直流电导率 ( $\Omega\text{cm}$ ) <sup>-1</sup>	激活能 (eV)	电子电导率 ( $\Omega\text{cm}$ ) <sup>-1</sup>
天然Mont	$1.6 \times 10^{-5}$	$1.3 \times 10^{-7}$	—	—
Zn—Mont	$4.8 \times 10^{-4}$	$3.2 \times 10^{-4}$	0.53	$3.0 \times 10^{-6}$

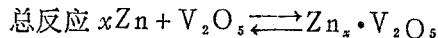
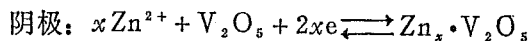
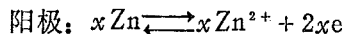
由表 2 看到,Zn—Mont 的电子电导小于总电导的 1%,在 30℃ 下离子电导率为  $4.8 \times 10^{-4} \text{scm}^{-1}$ ,是一种优良的离子导体。改性后的 Mont 其交、直流电导率均有显著提高,这是由于 Zn—Mont 的层间可迁移离子 ( $\text{Zn}^{2+}$ ) 的含量增加所引起。在 Zn|Zn—Mont|Zn 电池的两端长时间通直流电,发现有微粒状的金属锌沉积在 Zn—Mont 界面上,这充分验证了锌在 Mont 中发生电迁移。

### 3.3 电池反应

$\text{V}_2\text{O}_5$  为层状结构的氧化物,文献指出在常温下,随着锂嵌入量的增加,形成了嵌入化合物  $\text{Li}_x\text{V}_2\text{O}_5$ <sup>[6]</sup>,锌的离子半径 (0.074nm) 和锂离子半径 (0.068nm) 相近,它的外层 3d

电子使之有较大的变形性, 尤其  $Zn^{2+}$  离子具有较大的离子势, 进入  $V_2O_5$  晶格内生成产物的晶格能较大, 这都说明锌离子可能更容易嵌入  $V_2O_5$  晶格中。基于上述情况, 我们认为:

$Zn|Zn-Mont|V_2O_5$  复合阴极|石墨, 电池反应属于拓扑反应, 即



这个反应是客体阳离子进入主体骨架的拓扑化学反应过程, 它不破坏主体晶格结合的化学键, 伴随着点阵的连续膨胀, 在一定范围内是可逆的。这类反应被应用于电化学分析, 蓄電池阴极等, 特别是在层状硫化物、氧化物等阴极材料中。在 Rigaku 产 D/Max-ra 旋转阳极 X 衍射仪上, 多次观测分片组装的阴极  $V_2O_5$  晶格, 均发现在放电过程可使  $V_2O_5$  晶格膨胀。表 3 给出经过 2mAh 放电容量,  $d$  值的变化。

表 3 放电前后阴极中  $V_2O_5$  的 XRD 峰  $d$  值

晶面指数	200	001	101	110	200	011
放电前阴极	5.758	4.372	4.087	3.403	2.880	2.962
放电后阴极	5.825	4.409	4.112	3.422	2.890	2.777

### 3.4 电池性能

**开路电压** 由图 1 看到电池的开路电压随阴极中  $V_2O_5$  含量的减少而降低, 以纯  $V_2O_5$  为阴极时, 电池的开路电压为 1.51V, 可推算每摩尔锌和五氧化二钒反应自由能变化为  $-291.8kJ/mol$  ( $30^\circ C$ )。

当阴极中  $V_2O_5$  含量减少时, 电解质和  $V_2O_5$  的接触面减少, 相对地与石墨的接触面增

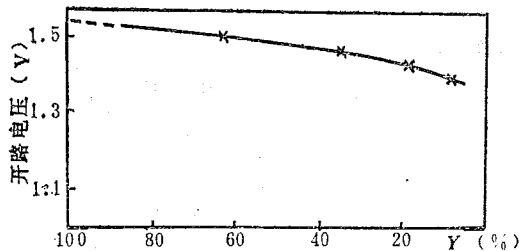


图 2 开路电压与阴极中  $V_2O_5$  组成的关系

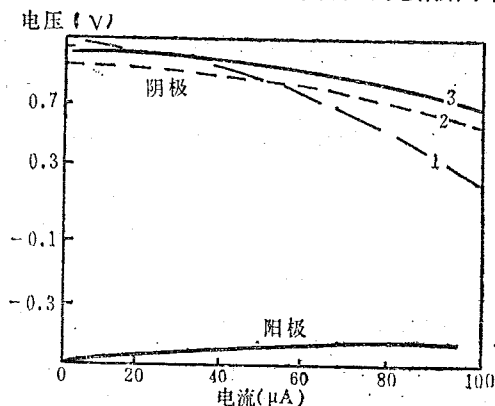


图 3 电池的极化曲线 (1,2,3 分别为阴极中  $V_2O_5$  含量 100%, 30%, 50%)

加, 而从电解质中传递到阴极的部分  $Zn^{2+}$  离子在电解质和石墨界面可能发生不作电功的副反应 ( $Zn^{2+} + 2e \rightarrow Zn$ ), 使实际的自由能变化减少, 开路电压降低。锌离子被还原与前面讨论的锌在  $Zn-Mont$  界面上的沉积, 本质上是相同的, 当阴极中  $V_2O_5$  只有 10% 时, 开路电压仅 1.36V, 可推算只有 90% 的锌与  $V_2O_5$  结合。

**电极极化** 从图 3 可见, 纯  $V_2O_5$  阴极因其电导率较低, 极化严重(曲线 1)。在复合阴极中石墨起了增加电子电导的作用。而  $Zn-Mont$  的作用实际上是增加电解质与阴极活性



物质的接触面，减小放电电流密度，从而改善电极极化现象。

实验表明，当复合阴极中  $V_2O_5$  含量 50% 时，极化现象相对减弱（曲线 3），这与其中  $V_2O_5$  和电解质保持了适当的接触面有密切关系。所以只要选择合适的阴极组分及优良的阳极材料，合理的组装工艺，电池的极化将得到一定的改善。

表 4 阴极中  $V_2O_5$  的含量与其利用率

阴极中 $V_2O_5$ (wt%)	10	30	50	70	100
容量 (mA·h)*	6.50	9.80	7.82	3.20	2.90
相对利用率*	22.4	11.3	5.38	1.58	1.00
容量 (mA·h)^	1.40	4.62	5.00	2.60	2.45
相对利用率^	5.71	6.28	4.03	1.52	1.00

\* 截止电压 0.5V

^ 截止电压 0.7V

**阴极活性物质的利用率** 表 4 给出  $V_2O_5$  在不同复合阴极中的相对利用率（以 100%  $V_2O_5$  阴极利用率为单位）。

在充分混合条件下，复合阴极中  $V_2O_5$  含量越少，其分散性越好，利用率越高（表 4\*）。然而  $V_2O_5$  含量减少，使电池的开路电压降低，放电时电压平台缩短。从计算可知（表 4 Δ），并非  $V_2O_5$  含量越低其利用率越高，而是在百分三十左右的  $V_2O_5$  组成的阴极其利用率最高。 $V_2O_5$  含量不同的阴极组装的电池，在 39kΩ 外负载下放电曲线见图 4。

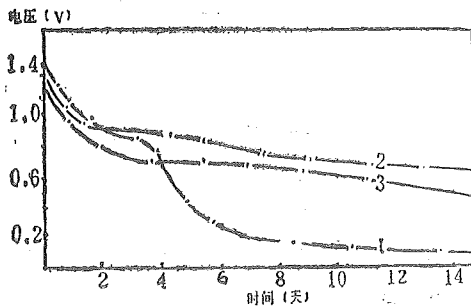


图 4 电池在 39kΩ 负载下放电曲线  
(1, 2, 3 分别为阴极中  $V_2O_5$  含量 100%, 30%, 50%)

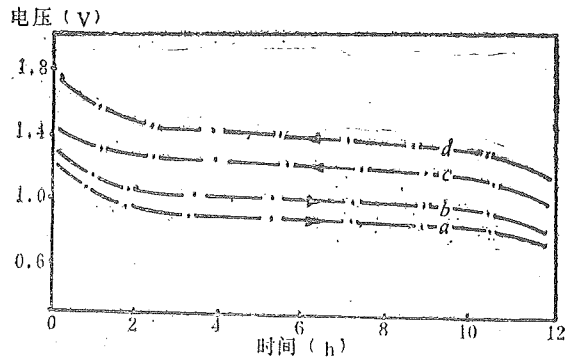


图 5 30%  $V_2O_5$  复合阴极电池的充放电曲线  
(a, b 分别为 15, 5 周期放电曲线; c, d 分别为 5, 15 周期充电曲线)

此外，从表 4 还可看出，当截止电压为 0.7V 时，50%  $V_2O_5$  的复合阴极组装的电池容量最高，而截止电压 0.5V，则 30% 的放电容量较高。

综上所述，经全面权衡，我们认为是 30%  $V_2O_5$  为最佳复合阴极。用此种阴极材料组装的电池其充放电性能良好，图 5 给出第 5 和 15 次充放电循环曲线。在  $37.7\mu A/cm^2$  下，充放电各 12h 经过充放电循环后电池的内阻略有增大，但充放电性能影响不大。

当外负载为 82kΩ 时，截止电压 0.9V，电池单次放电容量为 5.7mAh，比能量 11.4Wh/kg。由于电池结构设计较合理，组装工艺严密，阴、阳极材料性能好，故电池的自放电很小，在密封条件下，一般贮存 2-3 个月，开路电压变化范围在 0.05V。这说明电池的贮存性能较好。

## 参 考 文 献

- [1] Sheffield S H, Howe A T, *Mat. Res. Bull.*, 14 (1979), 929.
- [2] 黄振辉、苏明迪等, *地质科学*, 4(1984), 464.
- [3] 朱斌、薛立新等, *无机材料学报*, 2 (1987), 176.
- [4] Kawabara k, *et al.*, *J Applied Electrochemistry*, 14 (1984), 373.
- [5] 王鹤禧, 彭润土, *地质出版社*, 北京, 1980, p46, 112.
- [6] Monsha B, *et al.*, *Solid State Ionics*, 18—19 (1986), 902.

## Zn-V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Solid State Storage Battery

Lin Fengliang    Xue lixing

*(Department of Modern Chemistry)*

Zhu bin    Yu Wenhai

*(Department of Material Science and Engineering)*

### Abstract

Solid cells Zn-V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> are built up with montmorillonite as electrolyte. Their OCVs are between 1.51-1.37V and vary with the V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> concentration in cathodes. Their properties for 25 times charge-recharge cycles under the currents of 50 $\mu$ A (37.7  $\mu$ A/cm<sup>2</sup>). When the load is 82 k $\Omega$  and is cut off at 0.9V, capacity of 5.7mAh is obtained. Their energy density is 11.4 Wh/kg.

**Key words:** mineral, solid state storage battery, composite cathode.

# H<sub>2</sub>在Ni和Ni-Mn催化剂表面 吸附的MS-X $\alpha$ 研究

李俊清 王其武 徐立微 王 俭

(近代化学系)

## 摘 要

本文用多重散射X $\alpha$  (MS-X $\alpha$ ) 方法计算了Ni和Ni-Mn催化剂原子簇模型的单电子波函数、能级和态密度。从轨道电负性、轨道对称性和态密度等方面比较了两种催化剂的差异,探讨了H<sub>2</sub>在这类催化剂上吸附的机理,阐述了Ni催化剂吸附H<sub>2</sub>的活性高于Ni-Mn催化剂的原因。本文所采用的计算方法避开了繁杂的吸附势能面的计算,可望成为催化剂吸附活性的理论研究的实用方法之一。

**关键词:** 表面吸附, 催化剂吸附活性, 量子化学。

**中图法分类号:** O641.121

## 1 引言

金属催化剂对气相分子催化过程的研究,不论在学术上还是在生产上都具有重要意义,长期以来一直是一个活跃的研究领域。一般认为,这种催化过程是以金属催化剂吸附气相分子为其第一步,因此探讨吸附机理就自然成为研究催化作用本质的重要课题。而催化剂的吸附活性与催化剂和吸附分子的电子结构紧密相关。计算催化剂和吸附分子的能量和波函数的各种理论方法已成为研究吸附机理的有力工具。用量子化学方法研究吸附问题,是采用小的催化剂的原子簇模型来模拟实际催化剂以进行理论计算。常用的量子化学计算方法是EHMO、CNDO、ab initio和X $\alpha$ 方法<sup>[1-7]</sup>。所计算的体系大都是纯金属催化剂。

对H<sub>2</sub>在金属催化剂表面上吸附的研究,有很多实验工作的报导<sup>[8]</sup>。我们也曾做过H<sub>2</sub>在金属Ni催化剂和双金属Ni-Mn催化剂等表面上催化与吸附性能的比较实验。实验结果表明, H<sub>2</sub>在纯Ni催化剂表面的吸附较强,而随着金属Mn的掺入,则Ni催化剂对H<sub>2</sub>的吸附减弱。

本文采用了纯 Ni 和 Ni-Mn 催化剂的原子簇模型,用多重散射  $X\alpha$  (MS- $X\alpha$ ) 方法计算了这两种原子簇的电子结构。比较了这两种原子簇的态密度和 Fermi 能级,进而阐述了这两种催化剂对  $H_2$  吸附活性的差异。力图在分子作用水平上探讨这类催化剂吸附  $H_2$  的机理。

## 2 计算方法

从分子轨道的观点看来,催化剂能否有效地吸附气相分子,取决于下面三个因素:

(1) 催化剂的前线轨道(即固体催化剂 Fermi 能级附近的单电子波函数)与气相分子的前线轨道的对称性相一致。只有这一条件满足时,催化剂与气相分子的前线轨道间才能重迭,吸附才能发生,吸附分子与催化剂间的电子转移才有可能进行。

(2) 催化剂 Fermi 能级附近要有较大的态密度。当这一条件满足时,催化剂就能提供较多的轨道与吸附分子的轨道重迭。这可使吸附有效地发生,并可使吸附分子与催化剂间的电子转移充分地进行。催化剂 Fermi 能级附近的态度是决定催化剂吸附活性的重要参数<sup>[1]</sup>。

(3) 催化剂和吸附分子的前线轨道间的轨道电负性相近。一般可以用原子的电负性来粗略判断原子间电子转移的方向。但对于催化剂和吸附分子间的电子转移,严格地说,这种电子转移是在轨道之间进行的。为了精确描述电子转移的方向和对吸附的影响,应该采用轨道电负性的概念。在  $X\alpha$  方法中,轨道  $i$  的轨道电负性  $X_i$  定义为<sup>[10]</sup>

$$X_i = -\frac{\partial E}{\partial n_i}$$

式中  $E$  为体系的总能量,  $n_i$  为轨道  $i$  的电子占据数。体系的  $X\alpha$  总能量  $E$  与轨道  $i$  的  $X\alpha$  能量  $\epsilon_i$  和轨道  $i$  的电子占据数  $n_i$  的关系为<sup>[10]</sup>

$$\epsilon_i = \frac{\partial E}{\partial n_i}$$

即在  $X\alpha$  方法中,轨道能量的负值的就是该轨道的电负性。轨道电负性是轨道接受电子能力的量度。从催化剂和吸附分子前线轨道间电负性的差可以判断电子转移的方向以及对吸附的影响。而且按照分子轨道理论,只有能量相近(在  $X\alpha$  方法中即电负性相近)的轨道间才能有效地重迭和形成化学键。

因此,为了用  $X\alpha$  方法研究催化剂对气相分子的吸附问题,应该计算催化剂的轨道、态密度和轨道电负性。为此应选取催化剂的原子簇模型。

Ni 金属晶体为面心立方结构,其 (111) 晶面的 Ni 原子球呈密堆积型,因而面密度最大,其相应的面间距也应最大,(111) 晶面之间更容易断裂而暴露在催化剂表面。故选择 (111) 晶面作为对表面吸附的研究应是合理的。在  $X\alpha$  计算中,我们选取了 (111) 晶面的相邻四个 Ni 原子  $Ni_i$  作为原子簇,其几何构型为图 1(a) 所示。Ni 的原子球半径取为  $1.25 \text{ \AA}$ 。

对于 Ni-Mn 双金属催化剂的计算,采用了  $Ni_2Mn_2$  原子簇模型,如图 1 (b) 所示。Mn 原子球半径取为  $1.37 \text{ \AA}$ 。Ni-Mn 催化剂是在 Ni 金属中加入一定量的 Mn 所制成。为研究 Mn 的作用,选取两个 Mn 原子放在相切的位置,而两个 Ni 原子则相距较远。这种模型的选取基于两点考虑:一是 Mn 的表面能比 Ni 小,应首先在表面偏析而聚在一起;二是 Mn 的原子半径比 Ni 大,半径大的原子呈相互靠近的排列,而半径小的原子置于其空隙中,

这种排布方式应是合理的。

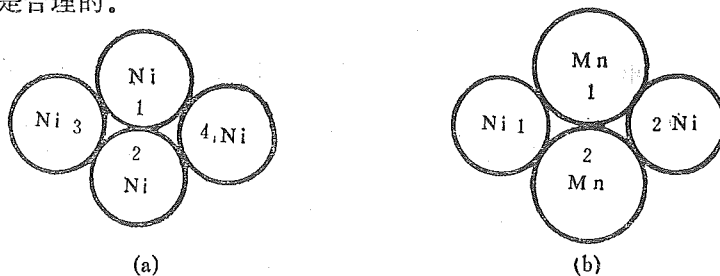


图 1 原子簇的几何构型

在多重散射  $X\alpha$  计算中, 采用了重迭球近似<sup>[1,1]</sup>, 并用 Norman 规则<sup>[1,2]</sup>选取了各原子球的半径。各原子的  $\alpha$  值选用了 Schwarz 优化的数值<sup>[1,3]</sup>, 球间区域和外球以外区域的  $\alpha$  值采用了各原子  $\alpha$  值的价电子权重平均。波函数的球谐函数部分的最大  $L$  值, 金属原子取为 2, 外球取为 4。SCF 轨道能量收敛于  $10^{-5}$  Rydberg。

### 3 结果和讨论

图 2 是  $Ni_4$ ,  $Ni_2Mn_2$  和  $H_2$  的能级, 其中  $E_f$  是 Fermi 能级。

当  $H_2$  被吸附在催化剂的表面时,  $H_2$  被活化, 这意味着 H-H 键被削弱了。H-H 键被削弱应由两种可能的电子转移所引起: 一是  $H_2$  的  $\sigma_g$  (HOMO) 与催化剂的 LUMO 重迭, 部分电荷从  $H_2$  的  $\sigma_g$  转移到催化剂的 LUMO, 其结果是  $H_2$  的成键  $\sigma_g$  轨道失去部分电荷而使 H-H 键变弱; 二是  $H_2$  的反键  $\sigma_u$  轨道与催化剂的 HOMO 重迭, 部分电荷从催化剂的 HOMO 转移到  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道, 反键  $\sigma_u$  轨道得到部分电荷从而削弱了 H-H 键。

图 2 表明,  $H_2$  的成键  $\sigma_g$  轨道的能量与催化剂的 LUMO 轨道能量相差约为  $0.7 Ry$ , 因而重迭比较困

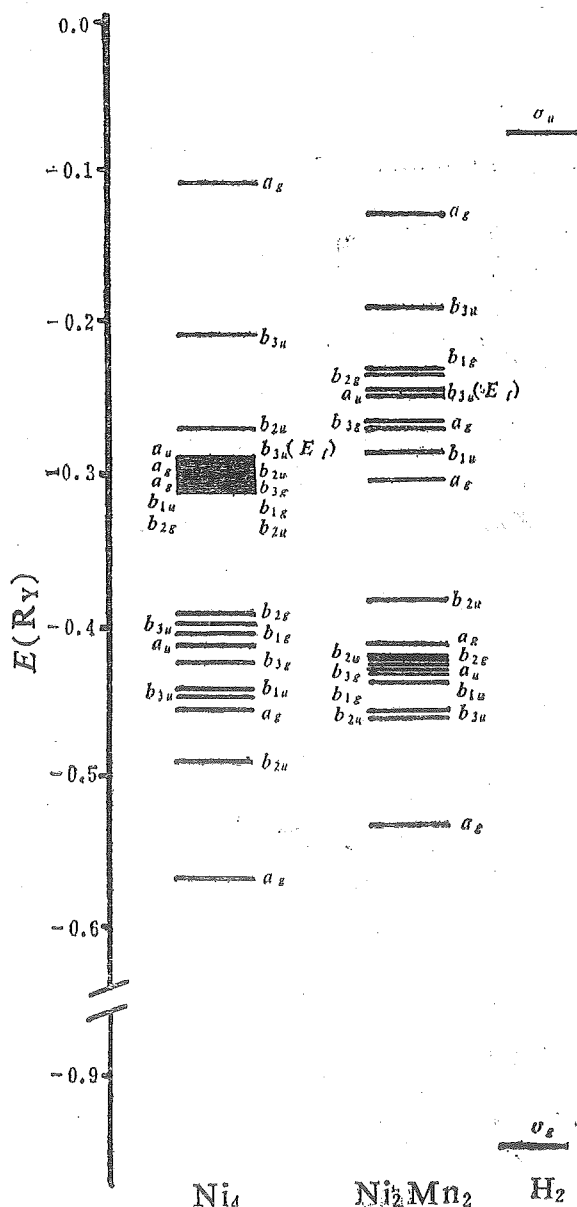


图 2 催化剂原子簇和  $H_2$  的能级

难，而  $H_2$  的反键  $\sigma_u$  轨道能量与催化剂的HOMO轨道能量（即  $E_f$ ）相差约为  $0.3Ry$ ，因而其重迭相对比较容易。即根据本文的计算结果，H-H键被削弱的主要原因是  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道与催化剂的HOMO相互重迭，以致电荷从催化剂转移到  $H_2$  所引起的，Fassaert 等<sup>[14]</sup>曾指出，Ni 金属吸附H后，其功函数升高，且H上带少量负电荷。这与本文的计算结果相一致。下面我们主要讨论  $H_2$  的反键  $\sigma_u$  轨道与两种催化剂的HOMO的相互作用情况，而说明其对  $H_2$  的吸附活性的差异。

Ni 催化剂原子簇的HOMO能量为  $-0.2956Ry$ ，而 Ni-Mn 催化剂原子簇的HOMO能量为  $-0.2364Ry$ ，其差值为  $0.0592Ry$ （即  $0.8eV$ ）。如果单从吸附分子  $H_2$  的LUMO（即  $\sigma_u$ ）与催化剂的HOMO（即图2的  $E_f$ ）间电负性差的因素来考虑前线轨道间的重迭程度，这两种催化剂HOMO的电负性差仅为  $0.8eV$ ，这种小的差值不致造成两种催化剂吸附活性的很大差别。这就是说，因两种催化剂Fermi 能级间的差值很小，不足以构成影响催化剂相对吸附活性差别的主要原因。

影响催化剂吸附活性的第二个因素是吸附分子  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道与催化剂 HOMO 的对称性匹配情况。由图2可知，Ni<sub>4</sub> 原子簇HOMO为  $b_{3u}$ ，其主要原子轨道成分为（其中Ni的下标是图1中原子的编号）

$$\psi_{b_{3u}} = 0.528[4s(Ni_3) - 4s(Ni_4)] + 0.298[3d_{-2}(Ni_1) - 3d_{-2}(Ni_2)] \\ + 0.275[4p_1(Ni_1) + 4p_1(Ni_2)]$$

显然，这个轨道与  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道的对称性相一致，可与  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道有效重迭。而且， $\psi_{b_{3u}}$  中即含有  $Ni_1$  和  $Ni_2$  的成分，又含有  $Ni_3$  和  $Ni_4$  的成分。当H-H在与  $Ni_3-Ni_4$  平行的方向被催化剂吸附时， $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道与  $Ni_3-Ni_4$  的  $4s$  轨道重迭；当H-H在与  $Ni_1-Ni_2$  平行的方向被催化剂吸附时， $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道与  $Ni_1-Ni_2$  的  $3d$  和  $4p$  轨道重迭。即无论H-H与  $Ni_1-Ni_2$  平行还是与  $Ni_3-Ni_4$  平行，吸附都可有效发生。

由图2可知，原子簇  $Ni_2Mn_2$  的HOMO也是  $b_{3u}$  轨道，其主要原子轨道成分为

$$\psi_{b_{3u}} = 0.464[3d_z(Mn_1) - 3d_z(Mn_2) + 3d_0(Mn_1) - 3d_0(Mn_2)] \\ + 0.254[4s(Mn_1) - 4s(Mn_2)]$$

这个轨道的对称性与  $H_2$  的  $\sigma_u$  轨道的对称性一致，故可与  $H_2$  的轨道有效重迭。但由于这个轨道仅含有Mn的轨道成分，这就要求  $H_2$  被吸附时，H-H与Mn-Mn平行。而且只有在这个单一方向上吸附才能发生。

吸附过程是一个动力学过程。 $H_2$  在吸附前的角度分布应是随机的。从轨道的对称性考虑，Ni-Mn 催化剂对  $H_2$  分子的吸附要求H-H与Mn-Mn平行；而Ni催化剂对  $H_2$  的吸附则只要求H-H平行于Ni<sub>4</sub> 所构成的平面。因此，Ni-Mn 催化剂对  $H_2$  的吸附速率应低于Ni催化剂。这可能是Ni-Mn 催化剂吸附  $H_2$  的活性低于Ni催化剂的原因之一。

按照轨道重迭的对称性要求，这类催化剂在(111)面上吸附  $H_2$  分子均为平行吸附，即H-H平行地接近(111)面。本文的这一结论与我们先前的工作<sup>[3]</sup>相一致。

优良催化剂所必须具备的条件之一是其Fermi 能级附近的态密度要大<sup>[9]</sup>。因此，为了比较两种催化剂的吸附活性，还应计算催化剂原子簇的态密度。我们采用了Gaussian 函数集来模拟分立能级的态密度  $N(E)$ ；

$$N(E) = \sum_i \frac{d_i}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{(E-E_i)^2}{2\sigma^2}\right]$$

式中  $d_i$  为轨道能量  $E_i$  的简并度,  $\sigma$  为可调参数, 本文取为 0.01。把图 2 中的 MS—X $\alpha$  能级数据作为  $E_i$  代入上式, 可算出两种催化剂原子簇的态密度。图 3 是态密度曲线。

由图 3 可知, Ni<sub>4</sub> 原子簇在 Fermi 能级附近的态密度约为 Ni<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub> 原子簇在 Fermi 能级附近的态密度的三倍。态密度大的催化剂可提供足够多的对称性匹配的轨道, 这些轨道可与方向随机分布的吸附分子的轨道重叠。态密度越大, 分子被吸附的几率应越大, 催化剂的吸附活性应越高。Ni 催化剂 Fermi 能级附近的态密度比 Ni—Mn 催化剂大得多, 所以 Ni 催化剂对 H<sub>2</sub> 的吸附活性应高于 Ni—Mn 催化剂。这与我们用 LEPS 势函数研究这类催化剂吸附活性的结论相一致<sup>[3]</sup>。

最后还应指出, 固体催化剂与吸附分子的轨道间重叠的判据应有别于分子间轨道重叠的判据。这是因为对应于分子的 HOMO 和 LUMO, 在固体中则相应地是两个能带, 即 HOMO 与其它占据轨道以及 LUMO 与其它空轨道的能级间隔在固体中一般都很小, 只要固体 Fermi 能级附近的态密度足够大, 一般 HOMO 和 LUMO 的能级间隔也不大, 这样总会存在对称性匹配的轨道与吸附分子的轨道重叠。因此对于催化剂吸附活性的判据, 除了轨道电负性差之外, Fermi 能级附近的态密度就成为最重要的参数。

#### 4 结论

- (1) Ni 催化剂和 Ni—Mn 催化剂在 (111) 面上吸附 H<sub>2</sub> 主要是平行吸附。
- (2) H—H 键在吸附时被削弱主要是催化剂的电荷转移到 H<sub>2</sub> 的反键  $\sigma^*$  轨道所致。
- (3) 催化剂 Fermi 能级附近的态密度是判断催化剂吸附活性的最重要参数。
- (4) MS—X $\alpha$  的计算结果表明, Ni 催化剂吸附 H<sub>2</sub> 的活性高于 Ni—Mn 催化剂。

#### 参 考 文 献

- [1] Blyholder, G *J Chem. Phys.* **62** (1975), 3192.
- [2] Anderson A B and Hoffmann R *J Chem. Phys.* **61** (1974) 4545.
- [3] 王其武、李俊清、姜明、江平, 化学物理学报, **1** (1988), 32
- [4] Johnson K H and Messmer R P *J. Vac. Sci. Techn.*, **11** (1973), 236.
- [5] Li J He T Wang J Wang Q and Pan Y K, *J. Elec. Related Pheno.* **42** (1987), 293.

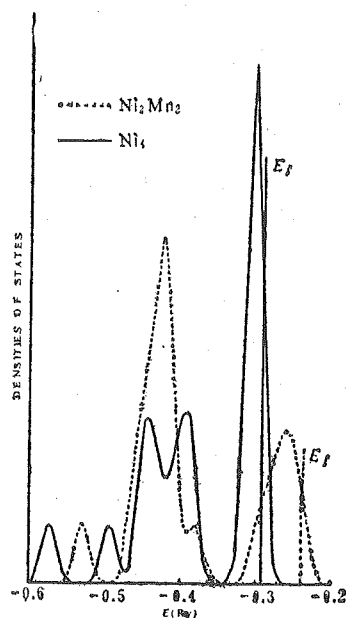


图 3 态密度曲线

- [6] 沈德林、金俗谦、刘若庄, 化学物理学报, 1 (1988), 13.
- [7] 潘毓刚、李俊清、祝继康、李笃, *X $\alpha$ 方法的理论和应用*, 科学出版社, 1987, p211—277.
- [8] Geusic M E, Morse M D and Smalley R E, *J. Chem. Phys.* **82** (1985), 590.
- [9] Messmer R P, Knudson S K, Johnson K H, Diamond J B and Yang C Y, *Phys. Rev.* **13** (1976), 1396.
- [10] 李俊清, 量子化学中的 *X $\alpha$* 方法及其应用, 安徽科技出版社, 1984, p151.
- [11] Rosch N, Klemperer W and Johnson K H, *Chem. Phys. Lett.* **23**(1973), 149.
- [12] Norman J G Jr, *Mol Phys.* **31** (1976), 1191.
- [13] Schwarz K, *Phys. Rev.* B5 (1972), 2466.
- [14] Fassaert D J M, Verbeek H and Van Der Avoird A, *Serf. Sci.* **29**(1972), 501.

## An MS—*X $\alpha$* Study of H<sub>2</sub> Adsorbed on Ni and Ni—Mn Catalyst Surfaces

Li Junqing Wang Qiwu Xu Liwei Wang Jian

(Department of Modern Chemistry)

### Abstract

One-electron wave functions, energy levels and state densities of the clusters abstracted from Ni and Ni-Mn catalysts have been calculated by MS-*X $\alpha$*  method. The mechanism of H<sub>2</sub> adsorbed on the catalysts has been studied theoretically and the different adsorption activities of the two catalysts have been interpreted by comparing the calculation results.

**Key words:** surface adsorption, adsorption activities of catalysts, quantum chemistry.



# 矢量量化中的非二元树搜索算法

黄胜华 贝昌达

(无线电电子学系)

## 摘 要

在矢量量化 (VQ) 系统中, 搜索算法是实现编码的关键技术。本文介绍非二元树搜索矢量量化系统的码本设计和搜索算法。计算机模拟实验结果表明, 非二元树搜索矢量量化在失真性能和存储量方面明显优于二元树搜索矢量量化, 而计算量只有全搜索矢量量化的几分之一。

**关键词:** 编码、量化、数据压缩。

**中图法分类号:** TN 912.3

## 1 引言

矢量量化 (Vector Quantization, 简称VQ) 就是将信号波形的每 $K$ 个相继样本或信号的每一组 ( $K$ 个) 特征参数作为一个 $K$ 维矢量进行整体量化<sup>[1]</sup>。对于输入矢量 $X = [X_1, X_2, \dots, X_K]$ , 按预先给定的失真测度计算与码本中码字 $Y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) 间的失真 $d(X, Y_i)$ 。若有 $d(X, Y_j) \leq d(X, Y_i)$ , 对所有 $i \neq j, i = 1, 2, \dots, N$ , 则编码器根据 $Y_j$ 即得到相应的信道符号 $j$ 。接收端译码器根据接收到的信道符号 $j$ , 从码本中找出相应的码字作为发端矢量的恢复矢量 $\hat{X} = Y_j$ 。设信道符号 $j$ 的编码位数为 $R$ , 则平均每个样本 (或参数) 的码位数为 $r = R/K$ 。

在VQ系统中, 把输入矢量转换为输出码字的符号是由搜索算法来实现的。搜索算法的任务就是在给定的码本中找到一个最佳或接近最佳的码字。评价一个搜索算法的好坏, 一是算法找到最佳码字的程度 (用平均失真测量); 二是算法的复杂度。常见实用的搜索算法有全搜索算法与二元树型搜索算法<sup>[2]</sup>。全搜索算法就是按给定的失真测度依次计算输入矢量 $X$ 与码本中每一个码字的失真, 取其中具有最小失真的码字 $Y_j$ 作为输入矢量 $X$ 的恢复矢量。这种搜索算法的计算量随矢量维数 $K$ 按指数律增长 ( $N_j = N = 2^{Kr}$ )。因此限制了矢量维数的增加, 从而限制了系统性能的提高。同时也使这种算法难以实时实现。例如当 $K = 16$ ,  $r = 1 \text{ bit/sample}$ 时, 搜索量为 $2^{16 \times 1}$ 。二元树搜索算法能显著减少搜索计算量。图1为3层二元树结构示意图。二元树的特点是: 进入树的每一层时各节点的分支数均为2, 即 $m_1 = m_2 = \dots = m_M = 2$ ,  $M$ 是树的层数。第 $M$ 层的节点所对应的码字构成码本 $C_M$ 即 $C$ 。在编码

器中除码本  $C_M$  外, 还有由每层节点构成的辅助码本:  $C_1 = \{Y_{(1)1}, Y_{(1)2}\}$ ;  $C_2 = \{Y_{(2)1}, Y_{(2)2}, Y_{(2)3}, Y_{(2)4}\}$ ; ...;  $C_{M-1} = \{Y_{(M-1)1}, Y_{(M-1)2}, \dots, Y_{(M-1)2^{M-1}}\}$ . 所有码字间的联系由树的分支结构约束. 对于输入矢量  $X$ , 按最小失真准则依次与树的第 1 层、第 2 层... 第  $M$  层的有关联的两个码字进行比较, 最后在第  $M$  层找到  $Y_{(M)i} = Y_i$  作为  $X$  的恢复矢量. 由于在每一层只与有关联的两个码字进行比较, 故二元树搜索的计算量减少为  $N_s = 2M = 2 \log_2 N = 2R = 2Kr$ , 与矢量维数  $K$  成线性关系. 但另一方面, 编码器码字存储量 (包括辅助码本) 上升为  $\sum_{i=1}^M 2^i = 2(N-1)$ , 比全搜索矢量量化器增加近一倍, 而且失真性能比全搜索有所下降. 因为按二元树结构在码本中找到的码字不一定是整个码本中的最佳码字.

## 2 非二元树结构与码本设计

所谓非二元树, 是指进入树的各层时, 节点分支数不限定为  $2^{[1]}$  图 2 所示为一种 3 层非二元树结构示意图. 可以看出, 进入树的第 1 层, 第 2 层, 第 3 层时, 各节点分支数分别为  $m_1 = 4, m_2 = 2, m_3 = 4$ . 我们称这种结构的非二元树为  $4 \times 2 \times 4$  型树. 一般我们将  $M$  层非二元树称为  $m_1 \times m_2 \times \dots \times m_M$  型树. 在非二元树搜索 VQ 系统中, 第  $M$  层的节点所对应的码字构成码本  $C$  (即  $C_M$ ). 而与树的其它各层节点所对应的码字分别构成辅助码本  $C_1, C_2, \dots, C_{M-1}$ . 其中  $C_1$  有  $m_1$  个码字,  $C_2$  有  $m_1 \times m_2$  个码字, 可分成  $m_1$  个子码本, 每个子码本由与第 1 层的某个节点相联的  $m_2$  个节点所对应的码字所组成; 依此类推,  $C_{M-1}$  有  $m_1 \times m_2 \times \dots \times m_{M-1}$  个码字, 它有  $\prod_{i=1}^{M-1} m_i$  个子码本, 每个子码本中有  $m_{M-1}$  个码字. 而码本  $C$  中的码字个

数为  $N = \prod_{i=1}^M m_i$ , 可分成  $\prod_{i=1}^{M-1} m_i$  个子码本, 每个子码本中有  $m_M$  个码字.

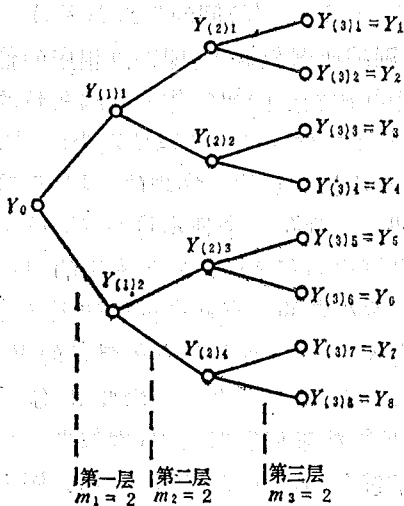


图 1 二元树结构

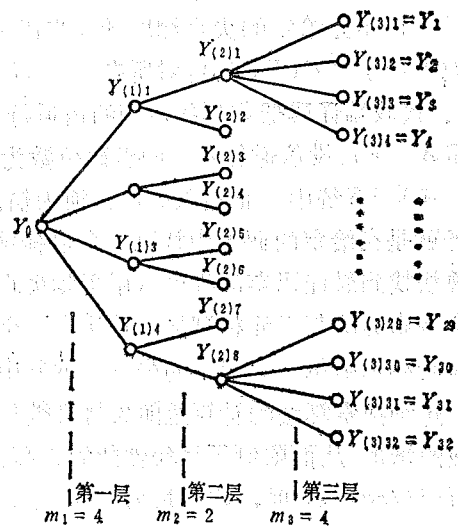


图 2  $4 \times 2 \times 4$  型非二元树结构

非二元树VQ系统中的码本设计方法仍可采用LBG算法, 但要根据树的结构作一些适当的修改。非二元树码本设计算法的基本过程如下:

(1) 对给定信源的训练序列  $S = \{X\}$ , 用LBG算法设计出码字数为  $m_1$  的  $K$  维全搜索VQ的码本作为辅助码本  $C_1$ 。

(2) 用辅助码本  $C_1$  按最小失真准则将  $S$  划分为  $m_1$  个子训练序列  $\{S_{(1)1}, S_{(1)2}, \dots, S_{(1)m_1}\}$ , 其中

$$S_{(1)j_1} = \{X | d(X, Y_{(1)j_1}) \leq d(X, Y_{(1)j_1}), j_1 \neq j_2, j_1 = 1, 2, \dots, m_1\}, \\ j_1 = 1, 2, \dots, m_1.$$

(3) 对子训练序列  $S_{(1)j_1}, j_1 = 1, 2, \dots, m_1$ , 再用LBG算法设计出码字数为  $m_2$  的  $K$  维全搜索VQ的子码本, 共  $m_1$  个, 从而得到辅助码本  $C_2$ 。

(4) 与 (2), (3) 类同, 直到设计出第  $M$  层的码本  $C_M$  (即  $C$ ) 中的  $\prod_{i=1}^{M-1} m_i$  个子码本, 每个子码本的码字数为  $m_M$ 。码本设计完成。

### 3 非二元树搜索算法

非二元树的搜索过程与二元树基本相同。区别在于, 非二元树搜索在树的每一层要与某个子码本 (第1层即辅助码本  $C_1$ ) 中的  $m_i$  个码字进行比较 ( $i = 1, 2, \dots, M$ )。非二元树搜索算法主要步骤如下:

(1) 对输入矢量  $X$ , 先在第1层辅助码本  $C_1$  的  $m_1$  个码字中进行全搜索, 按最小失真准则找到与  $X$  具有最小失真的码字  $Y_{(1)j_1}, j_1 \in \{1, 2, \dots, m_1\}$ 。

(2) 从码字  $Y_{(1)j_1}$  出发, 进入辅助码本  $C_2$  的与  $Y_{(1)j_1}$  相联的子码本中, 用全搜索算法从其  $m_2$  个码字中找到与  $X$  具有最小失真的码字  $Y_{(2)j_2}, j_2 \in \{(j_1 - 1) \times m_2 + 1, \dots, (j_1 - 1) \times m_2 + m_2\}$ 。

(3) 从码字  $Y_{(2)j_2}$  出发, 按与 (2) 类同的方法进行搜索。如此继续下去直到在码本  $C_M$  (即  $C$ ) 中的某个子码本的  $m_M$  个码字中找到与  $X$  具有最小失真的码字  $Y_{(M)j_M}, j_M \in \{(j_{M-1} - 1) \times m_M + 1, \dots, (j_{M-1} - 1) \times m_M + m_M\}$ , 也就是码字  $Y_i, j \in \{1, 2, \dots, N\}$ 。搜索完毕。

对于  $m_1 \times m_2 \times \dots \times m_M$  型非二元树搜索来说, 其搜索量为  $N_s = \sum_{i=1}^M m_i$ , 而编码器的码

字存储量为  $\sum_{j=1}^M \prod_{i=1}^j m_i$ 。显然, 当  $M = 1$  时, 这种搜索算法就是全搜索算法。而当  $M = \log_2 N$

而且  $m_1 = m_2 = \dots = m_M = 2$  时, 这种搜索算法就是二元树搜索算法。容易证明非二元树搜索算法的搜索量与码本所需的存储量均介于全搜索算法和二元树搜索算法之间。令人感兴趣的是, 实验结果表明非二元树搜索算法的平均失真性能一般都优于二元树搜索算法。当取  $M = 2$ , 且  $m_1 = m_2 = N$  时失真性能非常接近于全搜索算法。

#### 4 模拟实验及实验结果

我们在 IBM-PC 微机上对语音 LPC 参数采用非二元树搜索的 VQ 系统进行设计与模拟。并作了与全搜索 VQ、二元树搜索 VQ 的对比实验。所用语音数据为 320000 个 8bit 采样值，每 128 个样本作为一帧。图 3 所示为语音 LPC 参数 VQ 编码器框图。

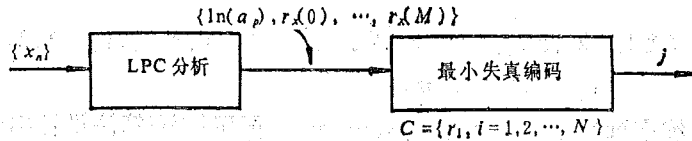


图 3 语音 LPC 参数 VQ 编码器框图

语音 LPC 参数 VQ，就是将语音数据帧  $\{x_n, n=1, 2, \dots, N_f\}$  (其中  $N_f$  为帧长度) 的 Z 变换  $X(Z)$  与作为码字的  $N$  个全极点滤波器  $G(Z) = \sigma/A(Z)$  的参数进行比较，其中  $A(Z) = \sum_{i=1}^P a_i Z^{-i}$ ， $P$  为滤波器的阶数， $a_i$  为预测系数， $\sigma$  为增益。比较结果找到一个“最接近的”  $G_i(Z)$ ， $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ 。  $X(Z)$  与  $G(Z)$  的接近程度，或者说系统的失真性能，可采用 Itakura-Saito 失真测度来衡量。

Itakura-Saito 失真测度定义为：

$$d(|X|^2, |G|^2) = \frac{\Delta}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [ |X/G|^2 - \ln(|X/G|^2) - 1 ] d\theta \quad (1)$$

可以证明：

$$d(|X|^2, |G|^2) = \alpha/\sigma^2 + \ln(\sigma^2) - \ln(\alpha_\infty) - 1$$

式中  $\alpha$  为残差能量， $\alpha_\infty = \lim_{P \rightarrow \infty} \alpha_P$ ，对于给定的语音帧， $\alpha_\infty$  为确定值。因此，上面的失真计算可改为：

$$d(|X|^2, |G|^2) + \ln(\alpha_\infty) + 1 = \alpha/\sigma^2 + \ln(\sigma^2)$$

而

$$\alpha = r_x(0)r_a(0) + 2 \sum_{i=1}^P r_x(i)r_a(i)$$

其中自相关系数  $r_x(i)$  和  $r_a(i)$  分别表示为：

$$r_x(i) = \sum_{n=0}^{N_f-i-1} x_n x_{n+i} \quad i=0, 1, \dots, P$$

$$r_a(i) = \sum_{m=0}^{p-i} a_m a_{m+i} \quad i=0, 1, \dots, P$$

对输入的语音帧，求出其 0— $P$  阶自相关系数  $r_x(0), r_x(1), \dots, r_x(P)$ 。然后与码本中的码字  $Y_i = [\ln(\alpha^2), r_x(0)/\alpha^2, \dots, r_x(P)/\alpha^2]$  进行比较以找出使  $\alpha/\sigma^2 + \ln(\sigma^2)$  最小的码字  $Y_i$ 。这里码本中存放的码字  $Y_i$  不用  $[\alpha, r_x(0), \dots, r_x(P)]$  而用上述形式，是为了减少不必要的计算量。

我们采用了两种尺寸的码本  $N=128$  和  $N=256$ ，各自分别采用几种不同结构的非二元

树搜索算法。各种情况下的实验结果及其与全搜索、二元树搜索的对比列表如下。

表 1  $N = 128$

树形	搜索量	存储量	SNR
二元树	14	254	13.083
$2 \times 4 \times 4 \times 4$	14	170	13.299
$4 \times 4 \times 8$	16	148	13.515
$8 \times 16$	24	136	13.798
全搜索	128	128	14.041

表 2  $N = 256$

树形	搜索量	存储量	SNR
二元树	16	510	13.497
$4 \times 4 \times 4 \times 4$	16	340	13.962
$2 \times 4 \times 4 \times 8$	18	298	13.739
$4 \times 8 \times 8$	20	292	14.088
$16 \times 16$	32	272	14.176
$8 \times 32$	40	264	14.204
全搜索	256	256	14.560

表中存储量和搜索计算量均以码字数表示。而信噪比 SNR 按下式定义

$$\text{SNR} = 10 \lg (\bar{D}_0 / \bar{D})$$

其中

$$\bar{D}_0 = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I d(X_i, Y_0)$$

$$\bar{D} = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I d(X_i, Y_i)$$

式中  $I$  为训练序列帧数,  $Y_0$  是整个训练序列的质心,  $j \in \{1, 2, \dots, N\}$ 。

由表中所列结果可以看出:

- (1) 非二元树搜索的失真性能优于二元树搜索, 有的很接近全搜索时的失真性能。
- (2) 不同结构的非二元树搜索 VQ 的码字存储量不同, 均显著低于二元树时的存储量, 与全搜索时的存储量基本相当。
- (3) 不同结构的非二元树搜索 VQ 的计算量不同, 一般比二元树搜索计算量有所增加。树的层数越多, 其计算量与二元树搜索相比增加越少, 但与全搜索相比, 仍只相当于其若干分之一。

总之, 非二元树搜索 VQ 其计算量显著低于全搜索 VQ; 其存储量显著低于二元树搜索 VQ; 而其性能优于二元树搜索 VQ, 且相当接近于全搜索 VQ。因此, 非二元树搜索是 VQ 的一个很有实用意义的搜索算法。

## 参 考 文 献

- [1] Buzo A, *et al.*, Speech coding based upon vector quantization, *IEEE Trans. ASSP*—28, 1980. 562—573.
- [2] Gray R M, *et al.*, Full search and tree-searched vector quantization of speech waveforms Proc. ASSP, 1982.
- [3] Wang D, *et al.*, An 800 bit/s vector quantization LPC vocoder, *IEEE Trans. ASSP*—30, 1982. 770—779.

# The Non-binary Tree Searching Algorithm for Vector Quantization

Huang Shenghua and Bei Changda

(Department of Radio and Electronics)

### Abstract

The searching algorithm is a key to encoding in vector quantization (VQ) systems. This paper describes a non-binary tree search VQ and its codebook design algorithm and searching algorithm. The experimental results show that the distortion performance of non-binary tree search VQ is better than that of binary tree search VQ. While its storage requirement is lower than the latter's, and that the computation for non-binary tree search is only a fraction of that for full search VQ.

**Key word:** Encode, Quantization, Data compress.

# 睡眠脑电波的计算机分析

蔡文英 钟龙云 张作生

(基础物理中心)

## 摘 要

利用微型计算机对七名健康人和一名帕金森氏综合症病人的睡眠脑电图的能量—频率分布曲线进行分析,发现帕金森症患者的睡眠各期能量与正常组相比有较大的差异。由此,我们提出睡眠脑电波的能量和幅度大小有可能作为临床诊断的两项指标。

**关键词:** 睡眠, 脑电波, 微型计算机

**中图法分类号:** Q616

## 1 引言

人类用于睡眠的时间占人一生中的三分之一。然而迄今我们对这一重要的生理现象的认识还微乎其微,对睡眠进行科学的研究只有短短的五十年历史。1937年, Loomis, Harvey 和 Hobart 注意到,睡眠不是处于一种稳定状态,而是要发生一系列非常有规律的周期性变化。在此之前,脑电波的研究已有较大的进展,脑电图学的发展把人们引导到利用脑电波变化对睡眠进行分期的工作上来。人们创建了多导睡眠描记术 (polysommography),使睡眠研究进入新的阶段。为方便各人研究结果的比较, Dement 和 Kleitman 于 1957 年提出一个关于睡眠分期的划分标准<sup>[1]</sup>。此后十年中,人们采用这个标准进行研究,取得了显著的成果。1986年, Rechtschaffen 等人重新肯定了 Dement 和 Kleitman 的分期标准,并根据十年来的经验作了一些必要的修改和补充<sup>[1]</sup>,使之更趋完善。人们至今还一直采用 Rechtschaffen 的睡眠分期标准进行研究。总之,应用脑电图、眼动电图、肌电图等的同步记录进行睡眠研究已经取得睡眠分期的客观指标。睡眠时人体器官活动、神经系统工作情况、各生理参数变化以及行为思维等情况的研究也相继有所发展。

随着计算机技术的发展,将计算机用于睡眠研究中的信号采集、数据处理、自动分析和实时监控等方面在国外已经盛行。整夜睡眠时间长、信息量多、各种生理参数(如脑电、心电、肌电、眼动电、血压、呼吸、体温等)的变化情况都希望能够记录下来,并对之进行处理分析,这些工作由计算机来完成最合适。国外研究人员多采用大、中型计算机进行睡眠研

1989年3月10日收到。

究，一些发达国家还专门成立了睡眠研究中心。在我国从事睡眠研究的人很少，且受客观条件限制，在方法上也只限于目测观察，这无疑会带有观察者的主观因素<sup>[2]</sup>。将计算机用于睡眠研究是很有前途的工作，也是今后睡眠研究的发展方向。

作为用计算机分析睡眠脑电波研究的起步，我们采用微型计算机（IBM—PC 或兼容机）进行这项研究。通过七名正常人和一名帕金森氏综合症患者睡眠脑电图的分析处理和比较，探讨区分正常人和脑疾患者的睡眠差异的客观指标，验证实验系统的可靠性及数据处理方法的可行性，这是非常有益的尝试。今后还要完善记录系统，继续增加实例，扩大病类的检测范围，并总结有关分类标准，为进一步推广到临床上应用提供可靠的依据。

## 2 实验系统、实验方法和对象

图 1 是睡眠脑电波计算机分析系统的框图。一导脑电（EEG）、二导眼动电图（EOG）和一导肌电图（EMG）信号经过放大（利用八导生理仪或自制的生物放大器），接四导磁带记录仪进行记录，同时在八导生理仪的显示屏上显示波形。重放磁带时输出 EEG 至电平转换器（或者 EEG 经放大后直接送电平转换器的输入端），再送 AD/DA 接口板上进行模拟数字转换。采集的数据存于磁盘，随时可用微机进行处理分析。我们所记录的八例睡眠脑电波，就是用上述方法实现的。

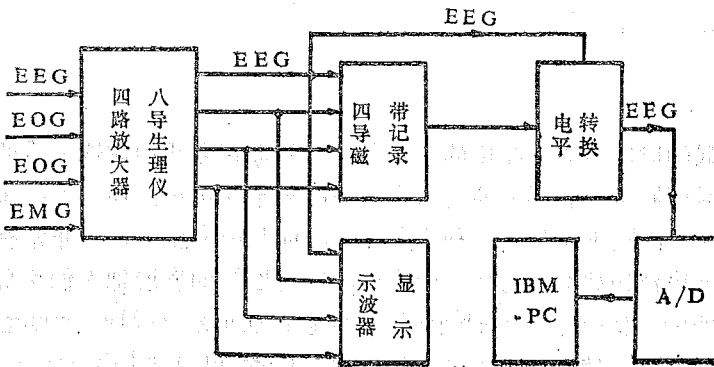


图 1 实验系统框图

图 2 是电极安装图，电极为直径 1 cm 的盘状电极。一导 EEG 从左顶区 ( $C_3$ ) 引导，二导眼动电图 (EOG) 的电极分别安放在左眼外眦上外侧 1 cm 和右眼外眦下外侧 1 cm 处，与 EEG 共用右耳垂 ( $A_2$ ) 作参考电极，鼻根部为接地电极。在二导 EOG 曲线上可记录到波形相同而位相差  $180^\circ$  的眼动电图，这样记录的 EOG 可以与 EEG 或其它干扰信号区分开来。一导肌电图 (EMG) 的引导电极安放在颞肌上，双极引导，其中一个电极接地，两电极间距为 2 cm 左右。电极均涂上导电膏后，除  $C_3$  点采用 5% 火棉胶固定外，其余各点均用普通胶布固定。安装好电极后，让受试者平卧自由选择最适体位，关灯后开始记录。磁带记录仪的走带速度选最低档——2.4 cm/s，各导联滤波范围：EEG 和 EOG 为 0.5~100 Hz，EMG 为 10~1 kHz，50 Hz 斩波；各导增益均调至使磁带记录仪能记录最佳质量的信号（在不失真情况下记录的信号最大），本实验每导增益均调为 51 dB。



受试者为7名睡眠较好的自愿者 (volunteer)，男5，女2，年龄为22~25岁，健康状况良好；一名帕金森综合症病患者 (女)，44岁，已有三年病史，术前做睡眠图记录。全部受试均在实验室进行通宵多导睡眠图记录。所作记录若不能反映受试者平时的睡眠情

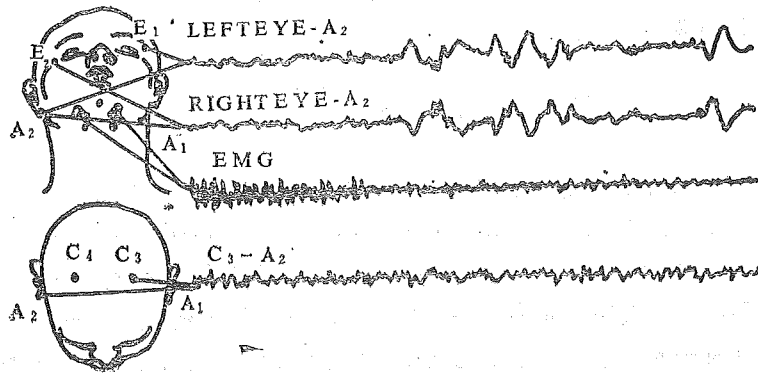


图2 电极安装图

况，则第二晚重做一次；若睡眠情况依然较平时有很大差异，则资料舍弃不用（我们这批实验已舍弃三人的记录）。本实验共记录15人次。

### 3 信号采集、数据处理及程序设计

根据 Rechtschaffen 分期标准，我们综合分析 EEG, EOG, EMG 的记录波形，划分各期睡眠时间。分期后，我们对其中二例正常人的睡眠各期分布情况作出曲线图，如图3。横轴为睡眠记录时间（以小时为单位），纵轴为睡眠各期的出现，依次按4期、3期、2期、1期、快眼动期 (REM) 和醒觉期 (wake) 从下往上排列。我们的记录与正常人睡眠的公认模式一致，反映了正常成人的睡眠模式，由此证明我们的记录系统是可靠的。

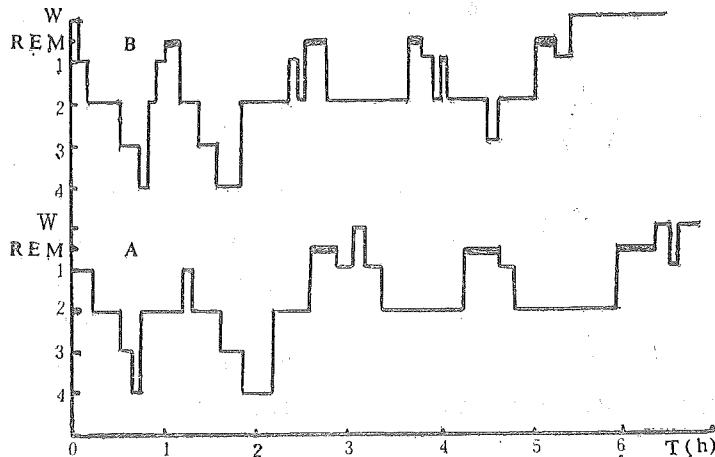


图3 正常人夜间睡眠各期分布情况

由于睡眠记录时间较长 (6~8小时)，采用 IBM-PC 微机采集数据，我们只能有选择地取其中的一部分。据此每个实例采样1~1.5小时，保证各个睡眠时相的信号均能采集到。脑电信号的频率通常低于100Hz，睡眠时脑电信号以4~7Hz的 $\theta$ 波和0.5~3Hz的 $\delta$

波为主，故采用 256 点/秒的采样率是适宜的。图 4 为以 256 点/秒的采样率所采集的数据并用绘图仪恢复的脑电波，它仍保留了其原波的形状。

由于八导生理仪的放大器滤波效果不佳，磁带记录也会引入一些高频噪声，影响了记录信号的质量。为此，我们设计一个低通数字滤波器滤除高频噪声，作为一项预处理。此低通滤波器的频率响应函数为

$$H(\omega) = -\frac{1}{8}\cos 2\omega + \frac{1}{2}\cos \omega + \frac{5}{8}$$

其中， $\omega = 2\pi f$ 。经滤波预处理后得到的结果令人满意。

滤波预处理 EEG 信号后，作了如下计算处理：（1）频域内的自功率谱计算；（2）统计一个分段单元（30 秒）内脑电各频段（ $\delta, \theta, \alpha, \beta$ ）能量占总能量（ $\delta + \theta + \alpha + \beta$ ）的平均百分比，并用绘图仪绘制分段单元内的平均功率（能量）——频率分布曲线，如图 5、图 6；（3）计算各时相的功率——频率曲线中， $\alpha$  波段峰值（次高峰）与最高峰值之比，各实例的结果及 7 例正常人的统计结果如表 1；（4）计算分段单元内各期 EEG 的幅度平均值，结果如表 2；（5）绘制睡眠模式的分布曲线，如图 3；（6）对正常组的统计平均，计算同一睡眠时相的 EEG 功率平均值，图 5 (a, b, c) 是其平均功率——频率曲线。其次，我们对 7 例正常人在同一睡眠时相的 EEG 的平均幅度也作了统计平均，结果如表 2。功率谱的计算采用快速付里叶变换 (FFT) 算法，每次计算 2 秒 (512 点) 的数据，频率分辨率（谱线间隔）为  $\Delta f = 0.5\text{Hz}$ 。

睡眠 EEG 的计算机处理中，有关的程序包括：（1）采样子程序；（2）建立数据文

表 1 能量—频率曲线上  $\alpha$  波段峰值与最高峰值之比

正常组	睡眠各期					
	wake	1	2	3	4	REM
1	0.345	0.243	0.213	0.123	0.088	0.286
2	0.386	0.238	0.195	0.106	0.075	0.302
3	0.395	0.232	0.180	0.127	0.080	0.340
4	0.396	0.252	0.200	0.130	0.088	0.338
5	0.389	0.250	0.183	0.125	0.073	0.324
6	0.346	0.254	0.160	0.119	0.089	0.299
7	0.369	0.234	0.172	0.120	0.080	0.311
平均	0.38±0.02	0.24±0.01	0.19±0.01	0.12±0.01	0.8±0.01	0.31±0.02
帕金森综合症患者	0.128	0.118	0.102	0.083	0.089	0.067

件及存盘子程序；（3）低通滤波器设计及滤除高频噪声程序；（4）FFT子程序；（5）计算功率谱、统计分段单元（30秒）内的平均功率并将其存成数据文件的子程序；（6）功率—频率曲线绘图程序；（7）计算 $\alpha, \beta, \theta, \delta$ 各波段能量百分比程序；（8）统计分段单元内 EEG 的平均幅度和平均频率程序；

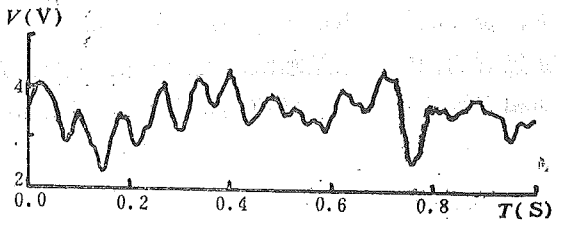


图 4

（9）对正常组的结果求统计平均的程序。（各程序的流程图从略）

表 2 分段单元（30s）内的平均幅度

正常组	睡 眠 各 期					
	wake	1	2	3	4	REM
1	84.7	125.1	224.2	247.3	296.5	97.1
2	88.7	120.6	228.4	242.7	292.6	115.9
3	115.6	126.1	226.0	245.9	304.0	115.8
4	118.4	176.3	216.7	242.7	296.8	119.0
5	95.6	166.7	225.9	297.9	330.0	129.3
6	90.5	142.5	246.4	289.7	293.9	153.1
7	80.0	143.8	253.0	283.0	299.2	131.6
平均	96±12	143±17	232±10	264±22	302±7	123±13
帕金森综合症患者	69.4	98.9	170.7	220.4	283.0	70.4

#### 4 结果讨论

首先，从二例正常人睡眠各期分布情况（图 2）证实我们的实验系统是可靠的，实验方法是可行的。其次，由能量—频率分布曲线（图 5、6）上可看出：（1）随着睡眠深度的加深（醒觉期 wake，图略）→1 期→2 期→3 期（图略）→4 期（图略），REM 除外），EEG 的低频成分能量越来越大，因此睡眠深度越深，其 EEG 的频率越低，幅度越高，而 REM 期的能量大小及分布情况接近于慢波睡眠 1 期；（2）各期能量—频率分布曲线的最高峰均出现在频  $f = 0.5\text{Hz}$  处，且  $0.5 \sim 8.0\text{Hz}$  这一段曲线所围的面积占主要部分，证实睡眠时的 EEG 确是以  $\delta, \theta$  波为主。（3）次高峰均出现在  $\alpha$  波段（ $8 \sim 13\text{Hz}$ ）内，说明本文受试者均为 EEG 以  $\alpha$  节律为主的类型；（4）比较帕金森氏综合症患者与正常人的睡眠 EEG 能量—频率分布曲线（wake、3 期、4 期的图略），发现帕金森氏综合症患者的各期 EEG 能量大小均明显较正常人的相应低很多，但其  $\delta, \theta, \beta$  波段的功率其百分比与正常人的无明显差异。表 1 是  $\alpha$  波段峰值与最高峰之比，随着睡眠深度的加深（除 REM 外），两峰之比越来越小。可见深睡时的 EEG 中  $\alpha$  节律较少，代之以高幅度的低频分量（ $\delta$  波）为

主, 表 2 的结论也证实这一点。这个结果与人们目测脑电图得到的结果相符<sup>[5]</sup>帕金森氏综合症患者的两峰之比随睡眠深度的变化不似正常人那样有规律, 且在醒觉期、1 期、2 期、3 期和 REM 期, 其两峰值比正常人的较低, 在 4 期时接近于正常人。可见, 帕金森氏综合症

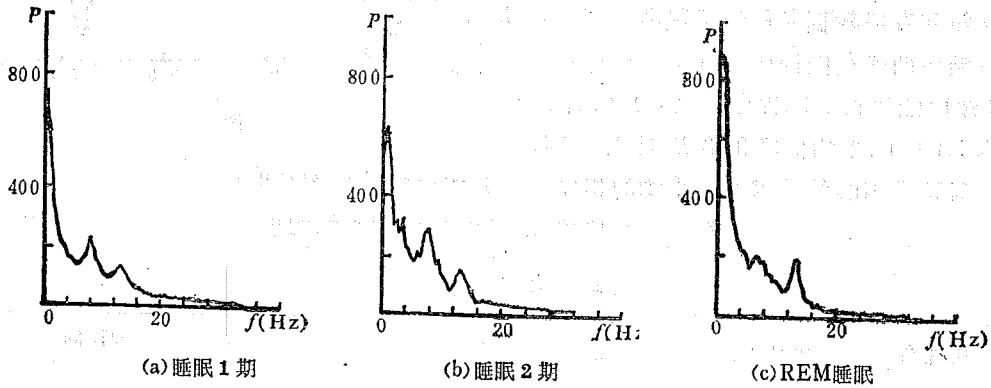


图 5 正常组平均能量—频率分布曲线

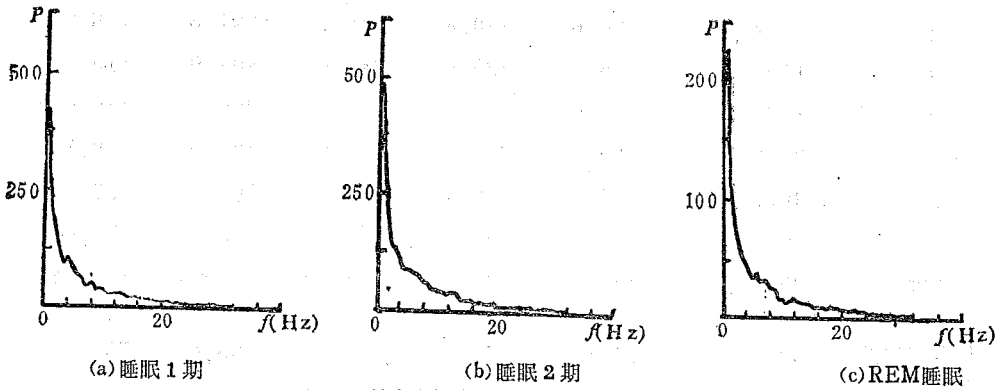


图 6 帕金森综合症患者能量—频率分布曲线

患者的脑电  $\alpha$  波比正常人的少,  $\delta$ 、 $\theta$  波的幅度和能量也较正常人的低。一般认为, 丘脑、网状结构和  $\alpha$  节律的产生有较大的关系。以上结果提示帕金森氏综合症患者病变的部位可能与网状结构和丘脑有关。对睡眠脑电波的能量和幅度大小的研究亦可作为区分正常人和患有脑部疾病患者的判断指标之一。

对睡眠的研究可以从微机分析睡眠脑电波信号特征延伸到分析睡眠时的呼吸、心电、血压、体温等变化规律。目前世界上虽然在心理学上对梦的产生做了种种解释, 然而, 做梦的生理学机理尚处于探索阶段, 对做梦的神经元机制, 还是未知的。于是, 研究人类睡眠时的梦境产生、对梦的记忆程度以及做梦与人的智力水平、性格的关系等<sup>[4, 5]</sup>, 成了许多睡眠研究者颇感兴趣的问题, 今后的研究在这方面有望得到进一步的发展。我们的工作是为进一步的研究奠定基础, 力图用先进的计算机技术为这项研究服务, 让更多的人投入这项有意义的研究工作, 加速我国对睡眠研究的步伐。

本文中的睡眠实验是在安徽省立医院脑立体定向研究所的实验室里进行的, 实验过程中得到董以健副主任医师、喻廉和李劲松等同志的大力支持和帮助。另外, 自愿参加实验的潘海涛、姜晓明、赵越超等同志也给予大力协作, 在此谨表示衷心的感谢。

### 参 考 文 献

- [ 1 ] Rechtschaffen A, Kales A, A Manual of Standardized Terminology, Technique and Scoring System for Sleep Stages of Human Subjects, Public Healthscience, U.S. Government Printing Office, Washington DC., 1968.
- [ 2 ] 张远惠等, 中国神经精神疾病杂志, 12(1986), 30.
- [ 3 ] Carman G J *et al.*, Patterns in the Distribution of REM Sleep in Normal Human Sleep, *Sleep*, 7(4): 347--355.
- [ 4 ] Crosvenor A, Lack L C, The Effect of Sleep Before or After Learning on Memory, *Sleep*, 7(2): 155--167
- [ 5 ] Trelease R B, *et al.*, Use of Heart Rate Analysis for Differentiation of Sleep Disorders, IEEE/Eight Annual Conference of the Engineering in Medicine and Biology Society, ch2368--9/86: 1203--1206.

## Automatic Analysis of Human Sleep Electroencephalogram(EEG) with Microcomputer

Cai Wenying    Zhong Longyun    Zhang Zuosheng  
(*Fundamental Physics Center*)

### Abstract

Automatic sleep EEG analysis with microcomputer was performed on seven healthy subjects and a patient of Parkinsonism. The curves of power-frequency were drawn and analysed. Our conclusions indicate that the EEG power spectrum and amplitude of the Parkinsonis patient were significantly different from those of the healthy subjects at all sleep stages. So we suggest that power spectrum and amplitude of sleep EEG may be employed as two parameters for clinical use.

**Key words:** sleep, electroencephalogram, microcomputer.

# 岩石层底部切向应力场及地球大地水准面异常

傅容珊

(地球和空间科学系)

## 摘 要

比较了两种不同方法,即Runcorn方程和地幔对流模型,计算了作用于岩石层底部的切向应力场。讨论了在三种不同的边界模型下,核-幔边界对于地球大地水准面的贡献。结果表明:模型I(自由核-幔边界,摩擦岩石层-地幔边界)和模型III(刚性核-幔边界,摩擦岩石层-地幔边界)中,核幔边界对于地球大地水准面的贡献随球谐函数系数的增加而减少,在 $n \geq 2$ 时可以忽略下边界的影响。而模型II(摩擦核-幔边界,自由表面)中下边界影响不容忽视。证明使用Runcorn方程计算岩石层底部的切向应力场是一个合理的近似。

**关键词:** 地球大地水准面,地幔对流,应力,岩石层

**中图法分类号:** P313. [5]

## 1 前言

在全球范围内探讨地幔对流和大地水准面异常之间的关系,最早是由Runcon完成的<sup>[1,2]</sup>。在他一系列工作中推导出了著名的大地水准面异常和地幔对流的相关方程,并在此基础上给出了计算由地幔对流产生的作用于岩石层底部的切向应力场公式,同时他还计算了低阶球谐函数2—11阶对应的全球应力场。在此基础上Liu等<sup>[3,4]</sup>计算了高阶球谐函数系数12—25阶对应的全球各区域的应力场。黄培华、傅容珊<sup>[5,6]</sup>又计算讨论了2—30阶球谐函数对应的全球及亚洲地区应力场。这一系列工作不仅提供了由地幔对流产生的作用于岩石层底部的应力场模式,而且还为讨论板块驱动机制提供了深部动力学背景。同时也为直接计算岩石层内部应力场提供了边界条件<sup>[7,8]</sup>。但是Runcorn应力公式的推导,除了对于实际地球模型的简化之外,还有一重要的猜测,即可以忽略大地水准面异常—地幔对流相关方程中下边界(核—幔边界)的贡献。这是因为在该项前面有 $(b/a)^{n+1}$ 因子,考虑地球实际该因子约为 $(0.551)^{n+1}$ 。长期以来人们对于Runcorn的猜测持怀疑态度,当然也对其方程计算的应力场的可靠性产生疑虑。但是,在建立能够直接联系大地水准面异常的地幔热对流模式之前,上述的疑虑是无法消除的。

1988年11月15日收到。

一个简单的联系大地水准面异常的地幔热对流模型是由傅容珊<sup>[9]</sup>建立起来的。本文的目的就是要在该模型基础上,探讨各种不同的边界模型下,核—幔边界对于地球大地水准面异常的贡献,讨论Runcorn应力方程的应用范围,以及讨论地幔对流产生的作用于岩石层底部应力场的地球动力学意义。

## 2 地球大地水准面异常及岩石层底部应力场

与大地水准面异常相联系的地幔对流及由此产生的作用于岩石层底部的切向应力场是由Runcorn<sup>[2]</sup>求得的。假定地幔为一均匀的、粘滞系数为常数的球层,其内部为不可压缩的牛顿粘滞流体。其流体运动满足Navaer-Stocks方程在忽略了方程中的科利奥力和惯性力之后,方程可以改写为

$$-\mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla P + \rho \mathbf{g} \quad (1)$$

其中 $\mu$ 为粘滞系数, $v$ 为流体的速度场, $P$ 为压力, $g$ 为重力加速度, $\rho$ 为由热对流产生的温度变化而形成的密度偏差。地球的引力位 $V$ 满足泊松方程

$$\nabla^2 V = 4\pi G\rho \quad (2)$$

这里 $G$ 为万有引力常数。而地球大地水准面异常对应的地球的外部引力位(特别是低阶系数)可由两部分组成,一部分来自地幔内部密度分布的不均匀(由热对流引起的),另一部分则来自由于热对流所产生的边界形变(如核—幔边界,岩石层—地幔边界等)。对(1)

(2)式经过适当处理后,Runcorn得出了著名的大地水准面异常和地幔对流的相关方程:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{d^2 W_n}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dW_n}{dr} \right) \Big|_{r=a} - \left( \frac{b}{a} \right)^{n+1} \left( \frac{d^2 W_n}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dW_n}{dr} \right) \Big|_{r=b} \\ &= \sum_{m=0}^n \frac{Mg}{4\pi\mu a^2} \left( \frac{a'}{a} \right)^{n+1} \frac{2n+1}{n+1} \{C_n^m \cos m\phi + S_n^m \sin m\phi\} P_n^m(\cos\theta) \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $W_n$ 为速度位, $a, b$ 分别为对流层的上下边界半径, $a'$ 为地球半径, $M$ 为地球质量, $C_n^m, S_n^m$ 为扣除标准椭球系数之后的地球大地水准面异常的球谐函数系数,而 $P_n^m(\cos\theta)$ 为综合勒让德函数。

Runcorn假定对流层的上、下边均为刚性边界。考虑到因子 $(b/a)^{n+1}$ 在 $n$ 加大时( $n \geq 2$ )远小于1,因而可忽略方程左端第二项,即下边界对于地球大地水准面的贡献。由此得出由对流产生的作用于岩石层底部的切向应力,其东向和北向应力分别为:

$$\begin{aligned} \sigma_E &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{Mg}{4\pi a^2} \left( \frac{a'}{a} \right)^{n+1} \frac{2n+1}{n+1} \frac{1}{\sin\theta} \{ -mC_n^m \sin m\phi + mS_n^m \cos m\theta \} P_n^m(\cos\theta) \\ \sigma_N &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{Mg}{4\pi a^2} \left( \frac{a'}{a} \right)^{n+1} \frac{2n+1}{n+1} \{ C_n^m \cos m\phi + S_n^m \sin m\phi \} \frac{d}{d\theta} P_n^m(\cos\theta) \end{aligned} \quad (4)$$

## 3 大地水准面异常和地幔热对流的物理—数学模型

与地球大地水准面异常相关联的地幔热对流模型是由傅容珊<sup>[9]</sup>提出的。考虑地幔为一均匀的不可压缩牛顿粘滞流体,其粘滞系数处处相等,且均匀分布放射性热源。此时流体热运动在Boussinesq近似下遵从流体力学基本方程:

$$\text{运动方程 } \frac{\partial U_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left( \frac{\delta \rho}{\rho} \right) + \alpha g X_i \theta + \nu \nabla^2 U_i$$

$$\text{能量方程 } \frac{\partial \theta}{\partial t} = -U_i \frac{\partial T}{\partial X_i} + K \nabla^2 \theta \quad (5)$$

$$\text{连续性方程 } \frac{\partial U_i}{\partial X_i} = 0 \quad i = 1, 2, 3$$

其中,  $\alpha$  是体涨系数,  $\theta$  是温度扰动,  $\delta \rho$  是压力扰动,  $\nu$  是动力粘滞系数,

$U_i$  是速度矢量,  $K$  是热导性,  $X_i$  是位置矢量,  $\rho$  是扰动密度分布。

同样地球的引力位满足泊松方程 (2)。

经过与 Chandrasekhar<sup>[10]</sup> 类似的处理后, 考虑到若无边界附加环型场条件时对流中的环型场分量  $Z = 0$ 。由此可以将地幔对流流场的速度位写为:

$$\bar{W} = \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{l=1}^6 B_l W_l^n \{ C_n^m \cos m\varphi + S_n^m \sin m\varphi \} P_n^m(\cos \theta) \quad (6)$$

式中:  $B_l$  是由边界条件决定的常数, 而  $W_l^n$  则是由半阶贝塞尔函数构成的基本解。其边界条件包括: 上、下边界上温度为常数, 流体径向速度为零; 在刚性边界上切向速度为零, 而在自由边界上切向应力为零。我们引入一个摩擦边界条件, 在此边界上同时存在着切向速度和由速度径向梯度产生的粘滞力。如此, Runcorn 的大地水准面异常与地幔对流的相关方程<sup>[12]</sup> 就可作为一边界条件用于确定常数  $B_l$ , 从而计算出整个地幔对流的流场  $W$  以及其他与其有关的场, 例如作用于岩石层底部的粘滞应力可以写为:

$$\begin{aligned} \sigma_N &= \mu \left. \frac{d}{d\theta} \frac{d^2 W}{dr^2} \right|_{r=a} \\ \sigma_E &= -\mu \left. \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\varphi} \frac{d^2 W}{dr^2} \right|_{r=a} \end{aligned} \quad (7)$$

并可直接计算对流上边界和下边界对于大地水准面异常的贡献比:

$$R = \frac{\left( \frac{b}{a} \right)^{n+1} \left( \frac{d^2 W}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dW}{dr} \right) \Big|_{r=b}}{\left( \frac{d^2 W}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dW}{dr} \right) \Big|_{r=a}} \quad (8)$$

#### 4 计算及结果分析

与大地水准面异常相关联的地幔热对流的研究表明<sup>[9]</sup>: 其流场既受流体的 Rayleigh 数控制, 又受边界条件的影响。表 1 中列举了本文计算中所使用的三种边界模型和 Rayleigh 数。其计算使用的地球参数如下:

表 1 计算模型

模 型	边 界 条 件	瑞 利 数
模型 I	L—M 摩擦 C—M 自由	1.0E5



续表

模型	边界条件	瑞利数
模型 II	自由表面 C—M摩擦	5.0E4
模型 III	L—M摩擦 C—M刚性	1.6E5

地球半径为6371km,核—幔边界(C—M)半径 $b = 3480\text{km}$ ,岩石层—地幔边界(L—M)边界 $a = 6280\text{km}$ ,地幔平均粘滞性 $\mu = 10^{22}$ 泊。而地球大地水准面异常球谐函数系数则引用Lerch<sup>[11]</sup>等1979年的结果。

计算是在IBM—PC机上进行的。图1给出了由方程(7)计算的模型I所对应的2—12阶全球岩石层底部的切向应力场。图2给出了模型III对应的2—8阶中国及邻区岩石层底部切向应力场。图中用C表示会聚板块边界,D表示发散板块边界。图1和图2表明:(1)其应力场与Runcorn<sup>[2]</sup>1967年计算的切向应力场在方向上吻合;(2)应力场的强度最大值约为 $10^8$  dyn/cm<sup>2</sup>,两种方法计算的结果有大体相同。例如,在中国及邻区范围(东经70°—142°,北纬20°—50°)Runcorn方程计算的最大应力值为 $5.4 \times 10^7$  dyn/cm<sup>2</sup>,而模型计算的最大应力值为 $6.0 \times 10^7$  dyn/cm<sup>2</sup>,两者之间的相对误差约为0.1;(3)图1中所示应力场的方向和板块运动的会聚和发散边界基本吻合,这也进一步说明其应力场的方向与板块运动有一定的相关性。

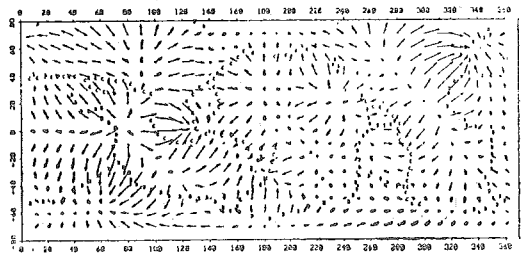
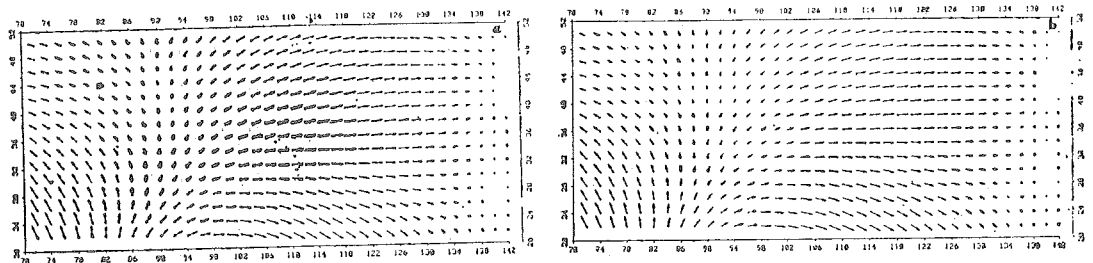


图1 全球岩石层底部应力场



(a) 热对流模型 I 结果

(b) Runcorn方程计算结果

图2 中国及邻区岩石层底部应力场

三种边界模型中上边界(L—M)和下边界(C—M)对于大地水准面异常的贡献之比 $R$ 方程(8)由表2列出,同时图3提供了此比值随阶数的变化。从表2可以清楚看出:(1)对于模型I和III而言,比值 $R$ 均小于1且随阶数 $n$ 的增加而减小,这说明下边界对大地水准面异常的贡献远远小于上边界。特别是模型I,在 $n = 2$ 时, $R \approx 0.05$ ,而 $n = 15$ 时,其 $R$ 已降至

$10^{-8}$  左右。(2) 模型 III 与 Runcorn<sup>[2]</sup> 所选取的对流上下边界均为刚性边界的条件近似, 正如他所估计的那样, 其  $R$  值也大至按  $(b/a)^{n+1}$  规律衰减。(3) 模型 II 则呈现出现了与上面两种完全不同的规律, 除了  $n=7$  之外, 很难忽略下边界的影响。当然这是由地幔热状态及边界条件决定的。至于为什么在  $n=7$  的点上出现此种现象仍值得讨论。

表 2 下边界和上边界对于大地水准面异常的贡献之比

阶 数	模型 I	MODEL II	MODEL III
2	.48680E - 01	.10530E + 01	.24830E + 00
3	.16600E - 01	.11230E + 01	.88840E - 01
4	.72210E - 02	.79650E + 00	.41930E - 01
5	.33910E - 02	.46020E + 00	.21000E - 01
6	.16660E - 02	.19340E + 00	.10730E - 01
7	.85180E - 03	.20110E - 02	.53900E - 02
8	.49660E - 03	.14530E + 00	.28040E - 02
9	.44750E - 03	.25130E + 00	.15120E - 02
10	.27760E - 03	.33190E + 00	.92710E - 03
11	.24730E - 04	.39690E + 00	.88530E - 03
12	.47500E - 05	.44620E + 00	.52340E - 03
13	.11000E - 05	.48770E + 00	.50700E - 04
14	.27700E - 06	.52140E + 00	.10210E - 04
15	.73100E - 07	.54850E + 00	.24690E - 04

表 3 速度和速度梯度对大地水准面异常的贡献 (模型 III, 上边界)

阶 数	$\frac{d^2W}{dr^2}$	$\frac{1}{r} \frac{dW}{dr}$
2	2.29995	0.0048682
3	1.91459	0.0054897
4	1.87390	0.0037698
5	1.88967	0.0025901
6	1.92588	0.0018153
7	1.97305	0.0012819
8	2.02825	0.0008934

表 3 给出了模型 III 中  $d^2W_n/dr^2$  和  $dW_n/rdr$  在上边界处的取值随阶数的变化, 不难看出, 其速度梯度对于地球大地水准面异常的贡献比速度场本身大 (约 2-3) 数量级, 这说明控制大地水准面异常的主导因素是上边界 (岩石层—地幔) 处的速度梯度, 而不是速度场本身。

## 5 讨论和结论

本文所计算的模型 I 和 III 均不直接等价于 Runcorn 所假设的两个刚性边界模型。但是模型 III 与 Runcorn 的模型最为相似。两种途径计算出来的地幔对流作用于岩石层底部的切向应力场很好吻合,而核—幔边界对于大地水准面异常的贡献又远小于岩石层和地幔边界的贡献,可以忽略。这说明 Runcorn 的猜想基本上是正确的。当使用一个摩擦的  $L-M$  边界时(模型 III),不仅下边界的贡献可以忽略,而且速度项对于大地水准面异常的贡献也仅仅占很小的比例(表 3),也可以忽略,这就是为什么本文计算的结果与 Runcorn 应力方程计算的结果可以比拟的原因。

应当讲边界条件模型 I 比 Runcorn 的边界条件模型更为合理。核—幔边界的性质不容置疑是一个相对的自由边界,因为地幔和地核的粘滞系数相差极为悬殊,在短周期力(如地震波)的作用下,地幔呈现出固体状态,而地核呈现出液体状态。对于  $L-M$  边界而言,尽管岩石层在板块构造理论中作为一个刚性的独立的力学单元存在,但它是地幔涌出物质在离开大洋中脊运动过程中逐渐冷却的结果。下伏地幔和岩石层之间的热传输机制以热传导为主,因而在这两个力学单元之间并不存在一个尖锐的力学界面。所以,当给出一特定的半径(如  $R = 6280\text{km}$ )为对流的上边界时,这一边界上同时存在流动的横向速度和粘滞摩擦产生的切向应力则更为合理。不过直接用 Runcorn 方程计算岩石层下应力场所需的计算时间远远小于用热对流模型所需计算时间,特别当所计算阶数增加时,这一差别就更为突出。因而,若仅仅是探讨作用于岩石层底部的应力场,而不追究地幔热对流流场本身时,使用 Runcorn 方程仍不失为一捷径。

最后必须指出:无论 Runcorn 的方程或是本文引用的热对流模型,对于实际地球,仅仅是一种粗略的近似。各种地球物理证据都可以证明地幔并非一均匀体,不论其物质分布、成份、粘滞性结构及其他各种热动力学参数等均存在径向和横向的变化。所以研究这一系列不均匀性,研究由此产生的对于地幔热对流的影响,更真实地反映地幔热动力过程,加深对地幔热运动和地幔顶部应力状态的理解是必需的。

本项工作由国家地震基金 No. (86) 008 资助。

## 参 考 文 献

- [1] Runcorn S K, *J. Geophys. Res.*, **69** (1964), 4389—4394.
- [2] Runcorn S K, *Geophys J R. Astron.*, **14**(1967), 375—384.
- [3] Liu H S, *Phys. Earth and Planet. Inter.*, **15**(1987), 60—68.
- [4] Liu H S, *Mod. Geol.*, **7**(1980), 29—36.
- [5] Huang P H, Fu R S, *Phys. Earth and Planet. Inter.*, **28**(1982), 261—268.
- [6] 黄培华, 傅容珊, 中国科学技术大学学报, **12** (1982), 98-104.
- [7] Fu R S, Huang P H, *Phys. Earth. and Planet. Inter.* **31**(1983), 269-276.
- [8] 傅容珊, 黄培华, 地球物理学报, **26** (1983), 增刊。

[9] Fu R S, *Phys. Earth. and Planet. Inter.*, 44(1986), 257—263.

[10] Chandrasekhar U, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Clarendon Press, Oxford, 1961, p652.

[11] Lerch F J, Klosko S M, Laubscher R E and Wager C A, *J. Geophys. Res.*, 84(1979), 3879—3904.

## Earth's Geoid Anomalies Mantle Convection and Stress Field Under Lithosphere

Fu Rongshan

(Department of Earth and Space Sciences)

### Abstract

The contributions of the core-mantle boundary and lithosphere-mantle boundary to the earth's geoid anomalies with different thermal convection models, which are constrained to fit the earth's geoid anomalies, are computed. The results show that the contributions of low boundary for Model I and Model III decrease with degree increasing. And the effects of low boundary to the stress field under the lithosphere can be ignored in Model I and Model III but not in model II. These results probably implicate that using Runcorn's stress equations to calculate the stress field under the lithosphere is a reasonable approximation.

**Key words:** geoid, mantle convection, stress, lithosphere

# 可能最大降水估算中气象 因子放大的数值实验

汪 钟 兴

(地球和空间科学系)

摘 要

本文针对可能最大降水(PMP)估算中常用的气象因子放大方法,应用五层原始方程模式对不同的风场和湿度场配置作数值实验,以检验对降水的影响程度,结果表明:湿度场扰动对降水的作用比风场扰动更为显著。

**关键词:** 水文气象, 可能最大降水, 数值实验

**中图法分类号:** p339

## 1 引言

在水文气象学领域中,估算可能最大降水量有重要意义。对水利部门可为水库安全设计提供科学数据,对气象部门则为特大暴雨预报提供重要信息。估算时常用暴雨气象因子放大的方法,其中主要是将流场和水汽分别放大或两者合理结合后再放大。詹道江和邹进上<sup>[1]</sup>曾做过详尽评述并配以实例介绍。但这种方法尚存在一些问题:

1. 水汽强度和空间分布是流场作用的结果,而流场又受到温度场和气压场的制约,其内在联系较为复杂,尤其各类暴雨差异甚大,难以确定合理的水汽和流场配置。
2. 某层水汽和流场放大后,改变了水平和垂直分布,大气内部各气象要素将按动力和热力学规律调整和演变,降水强度及其水平分布将起怎样的变化不能以瞬时诊断量判定。
3. 暴雨对环境场的反馈作用无法估计。

研究的有效途径是进行数值实验。为此本文利用大气物理所五层原始方程模式作实验研究,该模式能使用各种非平衡的要素场作为初值,而不致发生计算不稳定,故是模拟中尺度天气过程的良好工具。我们在只考虑大尺度凝结降水条件下,各实验均改变850hPa等压面的要素场,积分到12小时,将其结果与未经修改的“对照过程”作比较分析,考察大气内部动力结构的演变以及降水强度的变化。

## 2 模式和选例

实验采用大气物理研究所设计的五层 $\sigma$ 坐标原始方程模式<sup>[2]</sup>,基本方程组为

1989年1月18日收到

$$\frac{\partial U}{\partial t} + L(u) = fV - \frac{P_s}{m} f v_s + \frac{\bar{P}_s}{m} F_u$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + L(v) = -fU + \frac{P_s}{m} f u_s + \frac{\bar{P}_s}{m} F_v$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{p_s C_p T}{m} \right) + L(C_p T + \phi) = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \sigma} (\sigma \phi) \frac{\partial p_s}{\partial t} + (U f v_s - V f u_s) + \frac{p_s}{m} C_p F_s + \frac{p_s}{m} \frac{L}{C_p} \dot{Q}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{p_s q}{m} \right) + L(q) = \frac{p_s}{m} \dot{Q} + \frac{p_s}{m} F_q$$

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} = - \int_0^1 m^2 \left( \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right) d\sigma$$

$$\frac{\partial W}{\partial \sigma} = -\frac{1}{m} \left[ m^2 \left( \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \frac{\partial p_s}{\partial t} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial \ln \sigma} = -R \frac{\partial T}{\partial t}$$

其中  $\sigma = \frac{P}{p_s}$  ( $p_s$  为地面气压),  $(U, V, W) = \frac{p_s}{m} (u, v, \dot{\sigma})$ ,  $L(u) = m \left[ \frac{\partial}{\partial x} (Uu) + \frac{\partial}{\partial y} (Vu) \right] + \frac{\partial W u}{\partial \sigma}$ , 其余类推,  $v_s = \frac{m}{f} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} + RT \frac{\partial \ln p_s}{\partial x} \right)$  及  $u_s = -\frac{m}{f} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} + RT \frac{\partial \ln p_s}{\partial y} \right)$

为地转风,  $\phi$  为等  $\sigma$  面的位势高度,  $m$  是地图投影系数,  $F$  是湍流交换项,  $\dot{Q}$  是饱和时的凝结量, 其它符号都是气象上常用的。

模式垂直分层以及各气象要素场分布如图 1 所示。水平格距取 100 公里。时间步长取三分钟。初始场同时输入地面、850、700、500、200hPa 五层的高度场、风场、温度场和湿度场 (温度露点差)。高度场采用样条插值法, 其它场采用 Lagrange 插值法, 将各场垂直插值到  $\sigma$  面上。为保持计算稳定, 时间差分采用欧拉后差和中央差交替使用的方案。

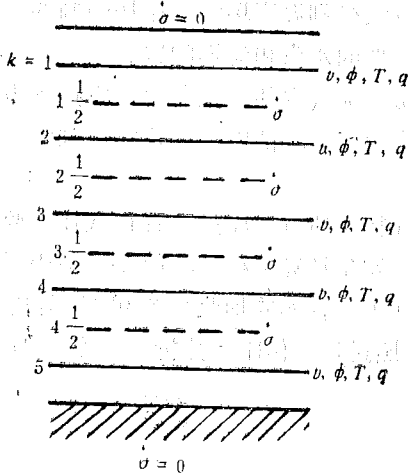


图 1 模式结构

关于物理过程, 模式中采用饱和凝结法考虑大尺度的凝结降水。各要素场的水平湍流交换取最简单的形式, 且认为各交换系数均为常数

$$k = 5 \times 10^4 \text{ 米}^2/\text{秒}$$

此外, 在运动方程中只计入地面的摩擦应力, 即

$$-g \frac{\partial \tau}{\partial P}$$

其中地面的摩擦应力取为

$$\tau_0 = \rho c_D |\mathbf{V}| \mathbf{V}$$

且以最下一层风速代替地面风速, 拖曳系数取

$$c_D = 0.1 \times 10^{-3}$$

本文选例为 1980 年 9 月 23—25 日湖北、河南、安徽和江苏各省先后出现的一次暴雨过程。23 日 08 时长江中下游上空受西太平洋付热带高压西北侧偏西南气流所控制, 地面图

上有低压槽向江淮流域延伸，且有静止锋配合，700 hPa 和 850hPa 等压面上有西南涡位于四川盆地，低涡东侧渭水至淮河一带有一条横切变线，它是由华北北部高压与西伸的副高脊之间的气流形成的。切变线南部 850hPa 等压面上有 13m/s 的低空急流中心，并伴有 12 克/千克的湿舌。200hPa 等压面上有东西向高空急流：中心达 52 米/秒。23 日 14 时地面低压槽东移并加深，使静止锋产生波动形成一片暴雨区（图2）。23 日 20 时低涡沿切变线东移，地面图上诱生出气旋，在此间期气旋波中心北端出现一片大范围暴雨区（图3）。

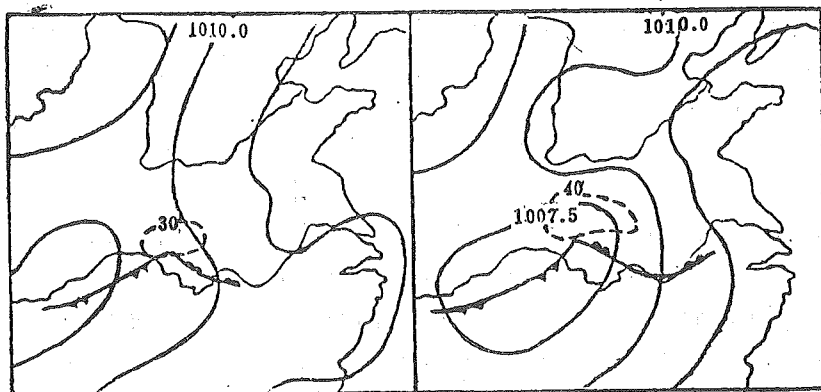


图 2 23:14 地面图

图 3 23:20 地面图

(虚线为 6 小时降水量,单位:毫米,下同)

为了检验模式能否模拟出低压系统的形成以及伴随的暴雨过程,我们选取 23 日 08 时全部真实的温、压、风资料为初始场,积分 12 小时。结果表明:6 小时模拟出地面低压系统向东移动加深,低空急流中心风速增加 2m/s,降雨区中心强度为 21.4 毫米,但位置偏西南方(图 3)。12 小时模拟出 1007.5hPa 的闭合低压形成,低空急流中心风速达 17 米/秒,降雨区中心强度为 28.5mm(图 4)可见气压系统模拟结果较好,而低空急流发展较弱,暴雨的强度和分布稍有偏差,这与模式中没有考虑对流参数化过程直接有关。由于我们的兴趣在于水汽和流场怎样配合以及如何合理放大才能产生高效降水,故以上不足并不影响研究的实质。

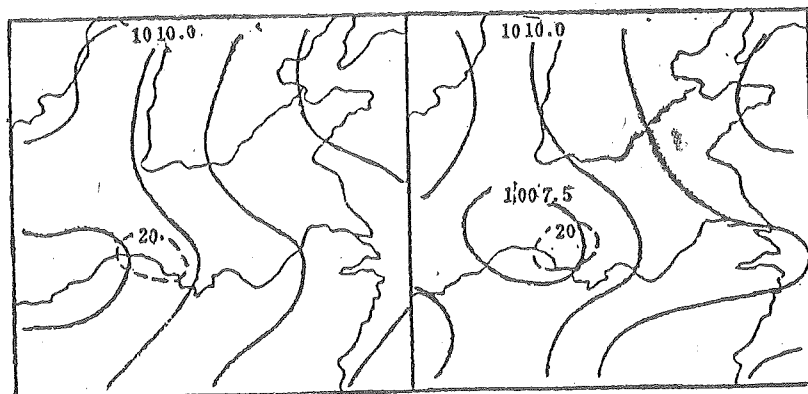


图 4 6 小时预报地面图

图 5 12 小时预报地面图

(虚线为 6 小时降水量,单位:毫米,下同)

### 3 实验方案及结果分析

实验是围绕 850hPa 等压面上修改水汽场或流场的扰动强度以及改变水平分布结构而设计的。

**实验 I** 令流场  $v = \bar{v} + \alpha v'$ ，其中  $\bar{v}$  代表计算面积平均值， $v'$  为对平均值的偏差。分别取系数  $\alpha = 1.5$  和  $0.5$ ，即增加和减弱流场的扰动强度。结果表明除涡度场、散度场和强风速度中心在开始六小时内有相应的增强和减弱外，以后各时刻没有继续增强和减弱的趋势，尤其是各时刻的地面气压场以及降水强度与对照过程相比较未见明显变化，看来强风场的维持需要有温度场和湿场的相应配合和支持才能有明显的动力学作用。“强风有强降雨”的说法并不完全符合事实。在天气实践中也出现有低空急流而无暴雨或有暴雨而无低空急流的实例。

**实验 II** 令比湿场  $q = \bar{q} + \alpha q'$ ，取  $\alpha = 2.0$ ，即增强水汽场扰动，将其结果与实验 I（取  $\alpha = 1.5$ ）比较，各时刻的涡度场和散度场均有增长，地面气压也不断加深，降水量逐渐增多，12 小时在长江中下游地区出现 1005.0hPa 的低空中心（图 6），降水量中心地区增强 20 毫米，并且雨区范围向东西方向扩展，850hPa 的低空急流中心达到 24 米/秒，增加 8 米秒。这充分说明改变低层的干湿对比度（在计算面积内的总水汽含量不变）比改变风场扰动更有明显的动力学效果。它似乎与暴雨区常发生在能量锋区附近的天气事实相符合，因为计算表明在能量锋区中起主要贡献的是露点锋（即等比湿线密集带）。它为何明显地影响大气内部的动力过程和降水强度，其机理至今尚不很清楚。可能的解释是：1) 按湿热成风原理，水平湿度梯度的增加，引起了垂直方向风场结构的改变，起到动力作用。2) 由于垂直方向湿度梯度的增加，形成了位势不稳定过程，在变化着的动力过程作用下，使潜在不稳定能量释放。

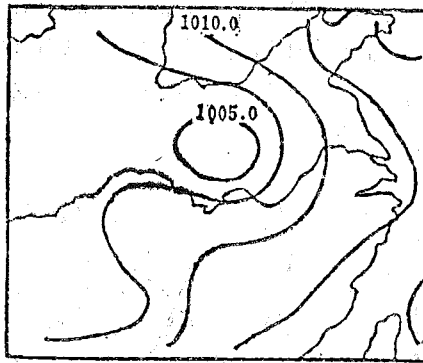


图 6 12 小时预报地面图

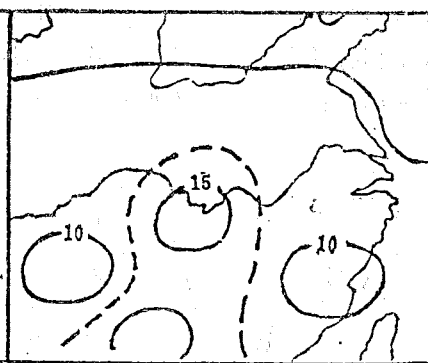


图 7 修改的初始比湿场分布

**实验 III** 改变比湿场的水平分布和强度。在低空急流中心周围安置  $\Omega$  型湿舌，即南北有两个闭合湿中心为 15g/kg，东西相应有两个闭合干中心 10g/kg（图 7）。在时间积分过程中，明显地看到比湿场随风场调整形成与风场相一致的分布，大约 12 小时后与对照过程相同，但地面气压场调整较快，大约为六小时。850hPa 的强风速带就其强度和分布而言，变化不很明显。而降水量却在六小时内约增加一倍，12 小时的中心降水量增加 20 毫米，但雨区的范围不变。说明湿度场分布将由风场决定，若两者不相匹配，则大气自身能进行调整，似乎风



场和能量场之间也有相互适应的过程,在此过程中风压场的结构和强度变化不明显,但降水强度变化是明显的,这与实验设计中增加了水汽含量直接有关。

实验Ⅳ 令比湿场  $q = \bar{q} + 2.0q'$ , 风场  $v = \bar{v} + 0.5v'$ , 即增强湿度场扰动、减弱风场扰动。将涡度场和散度场的变化与实验Ⅰ( $\alpha = 1.5$ )比较,全风速、地面气压场及降水量与对照过程比较。实验结果表明:3小时后全风速和涡度场偏弱,散度场稍强。6小时后涡度场增加慢,散度场增加快,全风速达到对照过程程度,地面气压场加深,雨强中心增强6mm,9小时后涡度场和散度场继续增强,全风速中心值增长2—3m/s在长江中游地区出现了1006.0hPa的地面低压中心,雨强继续增加。12小时后涡度场和散度场均增强到2—3倍,全风速中心值增长6米/秒,范围也有所扩大,地面图上1005.0hPa的闭合低压中心也同样出现,中心降水量增加15毫米,但雨区范围变化不大(图略)。这进一步证实湿度场扰动比风场扰动的效果要强得多。当风场扰动与湿度场扰动不相匹配时,湿度场扰动能调整出相应的动力扰动来,在此过程中散度场先开始增强,涡旋场在后增强,即先改变风场的势流部分能量,作为媒介再将能量转换给涡流运动。

#### 4 结语

以上所设计的实验以及所得到的结果是初步的,但也具有启发性。我们可以有如下几点认识:

1. 比较而言,湿度场扰动比风场扰动更为重要,它能引起明显的动力学和热力学作用,改变降水的强度和分布。故在可能最大降水量估算中应特别注意,若单纯放大风场扰动不能产生高效降水。

2. 当湿度场分布和风场水平分布不相匹配时,流场将会调整出相应的湿度场分布来。所以当对暴雨进行组合来模拟自然暴雨天气过程时,应注意到两者空间分布上的一致性问題,不然,降水强度和降水区的位置均会有失真。

3. 当湿度场扰动和风场扰动不相匹配时,湿度场扰动能调整出相应的风场扰动来。若用瞬态诊断量计算则不能估计出它的实际作用。

#### 参 考 文 献

- [1] 詹道江、邹进上,可能最大暴雨与洪水,水利电力出版社,1983年,p317—346
- [2] 周晓平,有限区域原始方程四层模式试验,第二次全国数值天气予报会议论文集,科学出版社,1980年,p28—30

# A Numerical Experiment on the Enlargements of Meteorological Factors for Probable Maximum Precipitation Estimates

Wang Zhongxing

*(Department of Earth and Space Science)*

## Abstract

A series of numerical experiments on the different dispositions between wind and humidity fields have been carried out with a five-level primitive equation model in order to test the principal aspect of the enlargements of meteorological factors used in probable maximum precipitation (PMP). The results show that the effect of disturbance of the humidity field on precipitation is more outstanding than that of the wind field.

**Key words:** hydrometeorology, probable maximum precipitation, numerical experiment

# 等离子体彗尾中的某些波态

李中元

童 彝

(中国科技大学)

(北京师范大学天文系)

## 摘 要

等离子体彗尾中,能观测到许多螺旋状结构、凝聚结构和云状物。这是作为等离子体圆柱体的彗尾,沉浸在太阳风等离子体之中,受到扰动的产物。本文从理论上分析了I型彗尾中非线性扰动波的特征及其某些演化过程,从而使上述彗尾中的许多观测现象得到了合理的解释。

**关键词:** 彗星, I型彗尾扰动, 空间等离子体。

**中图法分类号:** P185.81

## 1 引言

I型彗尾作为一个等离子体圆柱体,带有自由界面,位于太阳风等离子体之中。其切向间断面,经受着Kelvin-Helmholtz不稳定性。观测到的彗尾中的许多云状结构和许多螺旋状结构<sup>[1-10]</sup>,其起因之一就是K-H不稳定效应<sup>[11-12]</sup>。人们对其特性作了描绘,对其波运动作了分析<sup>[11-13]</sup>。但是,非线性效应对扰动波的影响以及波态的演化,并没有进行更深入的讨论。

从观测可知,轴对称结构的彗尾,常常伴随着大量的云状物和凝聚结构,其特征尺度是和彗尾的半径相当<sup>[1-3]</sup>。而非轴对称结构的彗尾,有扭结的形态,常常伴随有螺旋状结构<sup>[4-10]</sup>;而且它们能较长时间的保持其状态的稳定。本文的目的,是来分析和解释这些观测事实,从理论上阐明它们是在不同的激发条件下,非线性波演化所导致的不同结果。

## 2 方程组及其基本理论

彗尾作为一个等离子体圆柱体,由切向间断面和太阳风分开。很多学者都是这样来处理彗尾中的等离子体问题<sup>[11-14]</sup>。假设I型彗尾中,是均匀的、理想传导的和不可压缩的等离子体。根据观测可知,未受扰的磁力线和流线都是均匀的,且和圆柱体的轴线相平行。由

此, 我们可以写出如下的 MHD 方程组

$$\partial \mathbf{B} / \partial t = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B} \quad (1)$$

$$\rho [\partial \mathbf{v} / \partial t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] = -\nabla p + \frac{1}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4)$$

这里  $\mathbf{B}$  和  $\mathbf{v}$  分别表示磁场和流场,  $p$  是压力,  $\rho$  是等离子体密度。由于彗尾中的磁雷诺数是很大的 ( $R \cong 10^3 \gg 1$ ), 所以扩散系数  $\eta$  应该很小, 公式 (1) 中右边第二项为小量。考虑到有限振幅情况下的驻波的特性, 在以相速度  $v_\phi$  运动着的坐标系中, 这些波可以被描绘成“固定的螺旋流”。因此方程 (1) 和 (2) 可以归化为

$$\mathbf{v} \times \mathbf{B} = \nabla G \quad (5)$$

$$\rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (6)$$

这里  $G$  是一个正比于电场势的函数。圆柱坐标的三分量为  $(r, \varphi, Z)$ , 螺旋正交坐标系的三分量为  $(h_1, h_2, h_3)$ 。在这里, 用螺旋坐标系来处理问题, 是更为方便。其关系有  $h_1 = r$ ,  $h_2 = \theta = \varphi - \omega Z$ , 而螺距  $b = 2\pi/\omega$ 。Solov'ev 分析了如上的 MHD 方程组, 对“固定的螺旋流”, 它们可以化到一个比较对称的形式<sup>[1,5]</sup>。这在我们的模式中, 其形式可表达如下

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{r}{1 + (\omega r)^2} \left( \frac{\partial Q}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 Q}{\partial \theta^2} \right) = 0 \quad (7)$$

这里的  $Q$  为波场函数。圆柱体彗星的表面, 即切向不连续的界面  $S$ ; 当  $S$  在被扰动的情況下, 等离子体速度和磁场, 都仍然是切向的<sup>[1,1',1',1',6]</sup>。所以表面  $S$  必须要满足边界条件

$$Q_{sc} = \text{const}, \quad Q_{se} = \text{const} \quad (8)$$

这里的下标  $sc$  和  $se$ , 分别表示界面  $S$  的彗星一侧和太阳风的一侧。总压力的表达式, 在文献[15]中已经给出。那么, 在被扰动的切向边界面上, 彗星和太阳风的压力平衡, 就成为另一个边界条件

$$\begin{aligned} R_c \left[ \frac{1}{1 + (\omega r)^2} (\nabla Q_c)^2 + \frac{\partial r}{1 + (\omega r)^2} \left( \frac{\partial Q_c}{\partial r} \right) \right]_s = \\ = R_s \left[ \frac{1}{1 + (\omega r)^2} (\nabla Q_s)^2 + \frac{2r}{1 + (\omega r)^2} \left( \frac{\partial Q_s}{\partial r} \right) \right]_s + \text{const} \end{aligned} \quad (9)$$

这里的  $R_c$  和  $R_s$  是

$$R_c = \omega^2 \rho_c [(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ac}^2] \quad (10)$$

$$R_s = \omega^2 \rho_s [(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_p)^2 - v_{As}^2] \quad (11)$$

公式 (10) 和 (11) 中的  $V_A$  是 Alfvén 速度, 其值为

$$v_{Ac} = B_c / \sqrt{4\pi\rho_c}, \quad v_{As} = B_s / \sqrt{4\pi\rho_s} \quad (12)$$

公式 (8) 和 (9), 是非线性的边界条件。很显然, 随着趋向无限, 方程 (7) 的解便会消失。我们要讨论有限情况下 (包括  $r \rightarrow 0$ ), 方程式 (7) 的解的特性。根据某些学者的讨论<sup>[1,1',1',1',5]</sup>, 方程式 (7) 的解应该表达为一个同  $\cos \beta \theta$  成比例的螺旋波的迭加, 最为恰当。

我们假设  $\beta$  态是第一级谐波,  $2\beta$  态是第二级谐波……我们就可以写出如下的形式

$$Q(r, \theta) = \sum I_{k\beta}(r) \cdot \cos(k\beta\theta), \quad k=1, 2, \dots \quad (13)$$

显然, 被扰动的界面  $S$ , 也能够以一个级数的形式来表示

$$r_s = \sum r_0 [1 + A_k \cos(k\beta\theta)], \quad k=1, 2, \dots \quad (14)$$

这里  $r_0$  为未受扰动时的、宁静的彗尾圆柱体的半径,  $A_k$  是扰动振幅。下面我们来对非线性的特征, 作进一步的分析。

### 3 色散方程和非线性效应

我们首先要求出色散方程的形式。把公式 (13) 代入到公式 (7) 中, 通过归化, 可以得到

$$I_{\beta} = C_{1\beta} [r J'_{1\beta}(kr)], \quad I_{2\beta} = C_{2\beta} [r J'_{2\beta}(2kr)] \quad (15)$$

$$I_{\beta} = D_{1\beta} [r Y'_{1\beta}(kr)], \quad I_{2\beta} = D_{2\beta} [r Y'_{2\beta}(2kr)] \quad (16)$$

这里 (15) 和 (16), 是分别对于  $r < r_s$  和  $r > r_s$  的情况。 $J_{k\beta}$  和  $Y_{k\beta}$  是 Bessel 函数,  $C_{k\beta}$  和  $D_{k\beta}$  为相应的常数。公式中的  $k = \omega\beta$ , 是波数。现在把公式 (13—16) 代入到非线性边界条件 (8) 和 (9) 中去。如果是在线性近似情况下, 只要保留到第一级谐波, 则其色散关系如下

$$\begin{aligned} \rho_c [(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ac}^2] J_{\beta}(\omega\beta r_0) Y'(\omega\beta r_0) \\ = \rho_c [(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ac}^2] J'_{\beta}(\omega\beta r_0) Y(\omega\beta r_0) \end{aligned} \quad (17)$$

根据前人的观测和研究, 彗尾的离子浓度应该为  $10 - 10^3 / \text{cm}^3$ , 太阳风的离子浓度为  $3 - 10 / \text{cm}^3$ <sup>[1, 1', 4]</sup>, 亦即  $\rho_c \gg \rho_s$ 。这是一个必须满足的、由观测得出的条件。考虑到这点, 从公式 (17), 便能得到彗尾中的、线性波必须满足的一个空间条件, 即有判别式

$$4\pi \frac{R_c}{R_s} \rho_c (\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_c)^2 > \frac{R_c}{R_s} B^2 - B^2 \quad (18)$$

只要把彗尾和太阳风的等离子体参数代入 (18), 就可以来分析彗尾的状态是否稳定。如果把公式 (13—16) 代入 (8) 和 (9), 取到二级近似, 便可以得到如下的公式

$$(kr_0)(H_1 - H_2) \frac{A_1^2}{A_2} = \frac{8J_{2\beta}}{J_{2\beta}} \left[ \frac{J'_{\beta} Y_{\beta}}{J_{\beta} Y'_{\beta}} - \frac{J'_{2\beta} Y_{2\beta}}{J_{2\beta} Y'_{2\beta}} \right] \quad (19)$$

这里有

$$\begin{aligned} H_1 = \frac{R_c}{R_s} \left[ f_1(kr_0) \left( \frac{J_{\beta}}{J'_{\beta}} \right)^2 + f_2(kr_0) + f_3(kr_0) \frac{J_{2\beta}}{J'_{2\beta}} \right. \\ \left. + 4f_1(kr_0) \frac{J_{\beta} J_{2\beta}}{J'_{\beta} J'_{2\beta}} \right] \end{aligned} \quad (20)$$

$$H_2 = f_1(kr_0) \left( \frac{Y_{\beta}}{Y'_{\beta}} \right)^2 + f_2(kr_0) + f_3(kr_0) \frac{Y_{2\beta}}{Y'_{2\beta}} + 4f_1(kr_0) \frac{Y_{\beta} Y_{2\beta}}{Y'_{\beta} Y'_{2\beta}} \quad (21)$$

$$f_1(kr_0) = \frac{(kr_0)^2 + \beta^2}{(kr_0)^2}, \quad f_2(kr_0) = -\frac{2(kr_0)^2 + 3\beta^2}{(kr_0)^2 + \beta^2}, \quad f_3(kr_0) = \frac{-2}{kr_0} \quad (22)$$

$\beta$  态和  $2\beta$  态的 Bessel 函数, 其自变量分别为  $kr_0$  和  $2kr_0$ 。实际上公式 (19) 是给出了振幅之间的关系, 从  $A_1$  可以通过 (19) 式来求  $A_2$ 。由于非线性效应的影响, 公式 (17) 便

不能再成立；如果我们再取到第三级近似，便可以得到较为复杂的、被修正了的、非线性的色散关系

$$\rho_e [(\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ae}^2] = \rho_e [(\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ae}^2] (1 - A_1^2 T_\beta) \frac{J'_\beta Y_\beta}{J_\beta Y'_\beta} \quad (23)$$

其中

$$T_\beta = G_1 M \left(1 + 4 \frac{A_2}{A_1^2}\right) + G_2 M \left[ \frac{A_2}{A_1^2} - \frac{3}{4} \frac{3\beta^2 - (kr_0)^2}{\beta^2 + (kr_0)^2} \right] + 4G_3 M^2 + G_4 (kr_0) \left[ \frac{3\beta^2 + 5(kr_0)^2}{2\beta^2 + 2(kr_0)^2} \frac{A_2}{A_1^2} \right] + G_4 (kr_0) \left[ \frac{(kr_0)^2 \beta^2 + 2(kr_0)^2 M^2}{4(k^2 r_0^2 + \beta^2)^2} \right] \quad (24)$$

$$\left. \begin{aligned} G_1 &= \frac{Y_{2\beta}}{Y'_{2\beta}} - \frac{J_{2\beta}}{J'_{2\beta}}, & G_2 &= \frac{Y_\beta}{Y'_\beta} - \frac{J_\beta}{J'_\beta}, & G_3 &= \frac{J_\beta J_{2\beta}}{J'_\beta J'_{2\beta}} - \frac{Y_\beta Y_{2\beta}}{Y'_\beta Y'_{2\beta}}, \\ G_4 &= \frac{J'_\beta}{J_\beta} - \frac{Y'_\beta}{Y_\beta}, & M &= \frac{(kr_0)^2 + \beta^2}{2kr_0}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

为了满足观测条件  $\rho_e \gg \rho_p$ ，那么，从公式 (23) 式，就不难得到非线性波必须满足的空间条件下的判别式

$$4\pi\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_e)^2 (1 - A_1^2 T_\beta) \frac{J'_\beta Y_\beta}{J_\beta Y'_\beta} > (1 - A_1^2 T_\beta) B_s^2 \frac{J'_\beta Y_\beta}{J_\beta Y'_\beta} - B_s^2 \quad (26)$$

到此，我们再来分析波的演化及其稳定性的问题。

#### 4 非线性演化及其波的稳定性

如果扰动振幅  $A_1 \rightarrow 0$ ，色散关系 (23) 就演为公式 (17) 这是线性近似下的色散关系。把彗尾和太阳风的典型等离子体参数代入公式 (18)，就可知线性波的空间判别式是不能成立的。这是彗尾中明显存在着的一种特性。这方面的实例并不少见，例如，即使在非常宁静的太阳风的条件下，Tago (1969 IX) 等若干彗星，都可观测到彗尾中存在着螺旋波结构<sup>[8, 10, 16, 17]</sup>。很明显，这是由于 Helvin-Holmholtz 不稳定效应所引起的结果。

如果扰动振幅  $A_1 \neq 0$ ，那么色散关系应该用公式 (23) 来描绘。随着振幅  $A_1$  的增加，非线性波会更进一步演化。随着  $A_1$  的不断增大，可由判别式 (26) 式知，非线性波的空间观测条件，是能满足的。但演化的趋向，必然有

$$1 - A_1^2 T_\beta = 0 \quad (27)$$

这样，由 (23) 式就可得出

$$\omega^2 \rho_e [(\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_p)^2 - v_{Ae}^2] = 0 \quad (28)$$

即有

$$\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_e = \mathbf{v}_{Ae} \quad (29)$$

其结果是表面波转变到 Alfvén 波。所以，在以“彗尾等离子体速度”运动着的参考系统中，其稳定的波，一般都应该满足 (29) 式的，即相速度等于 Alfvén 速度。

如果取  $\beta = 1$ ，这说明 I 型彗尾具有非轴对称的结构（扭结状模样）。对公式 (24) 中的  $T_1(kr_0)$ ，进行分析和计算，可知  $T_1$  是一个具有极小值的函数。在  $kr_0 = 1$  时， $T_1$  为极

小,再看公式(27),这就意味着在 $kr_0=1$ 时,振幅 $A_1$ 具有极大值。所以在非轴对称彗尾这种情况下,非线性波具有一个极大值振幅;计算的结果为 $\text{Max}A_1 \cong \frac{1}{2}r_0$ 。

如果 $\beta>1$ ,彗尾当然也是非轴对称结构。不难证明,随着振幅 $A_1$ 的增长,非线性波也是稳定的,其极大振幅也是有限的,且比 $\frac{1}{2}r_0$ 还要小。因此 $\beta>1$ 的情况,波的不稳性的非线性演化,其结果也能给出固定的螺旋波的外形。

对于 $\beta=0$ 的情况,亦即彗尾是轴对称的结构,具有管状的样子。我们对公式(23)和(19)进行分析和计算,可以知道,为了达到非线性波的稳定,波的振幅必须非常大,要求超过 $r_0$ 的量级。波的振幅要超过彗尾圆柱体的半径,这显然是不可能的。现在我们再来看判别式(26),把 $\beta=0$ 和 $kr_0 \cong 1$ 代入(26)中,利用彗尾和太阳风的典型的等离子体参数,计算表明不等式也是不能成立的。再看公式(13)和(14),也可以推知,当振幅 $A$ 大于 $r_0$ 时,已不再可能证明这两个级数的收敛性。观测的事实,彗尾是一个圆柱体,必须要求振幅是有限的、在一定范围尺度内的。所以,在轴对称彗尾这种情况下,非线性波根本不可能维持。

由于太阳风和彗星的相互作用,在不同的初始激发条件下,使得等离子体彗尾可以是轴对称的,也可以是非轴对称的。观测已经大量记录下这两种模样的结构。对于轴对称的彗尾,具有管状形(在我们这里就是 $\beta=0$ 的情况),它们的彗尾流线往往不十分清晰,且经常被打断,彗尾中有大量的云块和凝聚结构。从本文的分析便可知,因为在轴对称结构的彗尾中,非线性波不能维持,所以彗尾没有长期较固定的流线结构,流线经常被破坏,而会变成弥漫状的、没有流线结构的云状物。对于非轴对称的彗尾,具有扭结形态(在我们这里相当于 $\beta \geq 0$ 的情况);由于非线性波的演化可以是稳定的,因此能观测到清楚的流线及其固定的螺旋结构形态。对于这些I型彗尾中的观测现象,能够在这里得到合理的解释。

“国际理论物理中心”的同仁们,就本文的一些内容,曾和作者进行了不少有益的讨论,在此表示谢意。

### 参 考 文 献

- [1] 李中元、阎林山、顾顺勇,天体物理学报, 3(1983), No. 2, 81.
- [2] Brandt J C, Hodge D W, Solar System Astrophysics, McGraw-Hill, New York, 1964.
- [3] Mendis D A, Ip W H, Space Sci. Rev., 20 (1975), 145.
- [4] Wolf M, Astron. Nachr., 180 (1909), 1.
- [5] Lust R, Z Astrophys., 47(1959), 205.
- [6] Battrick B, Rolfe E J, Reinhard R, Proc. of Symposium on the exploration of Halley's Comet, ESA, Pub. Division, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 1986, P1, P35 and P189,
- [7] Romer E, Publ. Astron. Soc. Pacif., 82 (1970), 768.

- [8] Jookers K, Lust R, Nowak T, *Astron. Astrophys.*, **21** (1972), 199.
- [9] 李中元、顾顺勇, *空间科学学报*, **3** (1983), No. 1, , 59.
- [10] Li Zhongyuan, Proc. of 20th ESLAB Symposium, ESA, Pub. Division, ESTEC, The Netherlands, 1986, P161,
- [11] Mendis D A, Harry, L F, *Rev. Geophys. & Space Sci.*, **20** (1982). 885.
- [12] Ershkovich A I, Nusinov A A, Chernikov A A, *Planet. Space Sci.*, **20**(1972), 1235.
- [13] Ip W H. and Mendis D A, *Icarus*, **26** (1975), 457.
- [14] 李中元, *天体物理学报*, **5** (1985), No. 1, 1.
- [15] Solovyev L S, Symmetric MHD flows and helical waves in circular Plasma cylinder, (Question of Plasma Theory) (Ed. by M. A. Leontovich), **3** (1963), 245.
- [16] 李中元, *中国科学*, No.8 (1989), 841.
- [17] Ershkovich A L, Chernikov A A, *Planet. Space Sci.*, **21** (1973), 663.

## A Discussion on some Waves in the Plasma Comets

Li zhongyuan

(Dept. of Earth and Space Science, USTC)

Tong Yi

(Beijing Normal University)

### Abstract

The observation already showed us that there are a lot of the helical structures, condensations and clouds in the I type plasma cometary tails. We have known that they result from the plasma disturbances. In this paper, the authors have given a discussion theoretically, and analysed the evolution processes of non-linear waves as well as their stability in the plasma tails. The Phenomena of the observation in I type tails are able, therefore, to be explained.

**Key words:** comets, I type cometary tails, space plasma processes.



# 用可靠性因子 $R$ 确定表面结构

胡 兹 蒲

(材料科学与工程系)

## 摘 要

本文以铯/石墨- $(2 \times 2)$  表面结构分析为例, 介绍了低能电子衍射动力学理论中的可靠性因子  $R$  的性质和使用方法。指出正确有效地使用  $R$  因子, 能使整个分析过程层次清楚, 节省计算费用, 并得到较高的精度。

**关键词:** 表面物理, 低能电子衍射, 可靠性因子。

**中图法分类号:** O484.1

## 1 低能电子衍射强度谱分析和可靠因子

低能电子衍射 (LEED) 如同 X 光衍射在固体物理中的作用一样, 是表面物理的基本实验手段。只是其分析的过程比 X 光衍射要复杂得多。尽管从表面的衍射花样可测出表面的二维空间点阵, 然而由于低能电子与原子的强相互作用和电子的多次散射效应, LEED 的强度谱 (即  $I-V$  曲线) 完全没有规律性, 无法从它直接得到具体的表面结构。在历史上, LEED 强度谱的无规律性曾是表面结构分析的极大障碍。直到七十年代末, LEED 的动力学分析理论得到迅速发展, 才使表面结构分析走上了蓬勃发展的道路<sup>[1]</sup>。

LEED 动力学理论作表面结构分析所采用的主要计算方法是拟合法。研究者先通过对所研究表面的特点进行分析, 设计出一系列可能的表面模型, 然后从理论上计算出每一表面模型所对应的  $I-V$  曲线, 即各个衍射斑点的强度谱。将这些理论曲线与实验中测得的谱线对比、拟合, 拟合得最好的  $I-V$  曲线组所对应的结构便是最可靠结构。由于表面结构的复杂程度不同, 其可能的表面模型也就千差万别, 少则有几十个, 多则几百、几千个。各种表面在特定的实验条件下应采集的  $I-V$  曲线数也不相同, 少则几条, 多则几十条。考虑这些因素, 从理论上计算出的  $I-V$  曲线可多达几千条。若用人眼将这上千条曲线一一与实验曲线拟合, 并选出得佳结构, 不仅要耗费大量的人力和时间, 而且无法排除主观倾向所引起的偏差。因而, 定出一个客观标准, 定量地表示出拟合好坏程度是非常必要的。这拟合工作完全

可由计算机来完成。

近年来许多科学工作者根据  $I-V$  曲线对表面结构的各种敏感性,提出了许多判别  $I-V$  曲线拟合好坏的标准,即定义了许多可靠性因子 (Reliability Factor), 简称为  $R$  因子。 $R$  因子用一个具体数字来表示曲线拟合好坏的程度。一组理论  $I-V$  曲线的  $R$  因子越小,表示它们与实验曲线拟合得越好,其所对应的表面模型越可靠。目前,这些  $R$  因子的计算工作已编成了程序,剩下的只是如何利用  $R$  因子来为我们的表面结构分析工作服务。但是,如我们对  $R$  因子的性能不真正理解,就不能正确使用它,甚至得出一些错误的结果。研究  $R$  因子的变化规律,正确有效地使用它,不仅能从众多的表面模型中选出最可靠的模型,得到一个表示可靠程度的数值,还可使整个搜索、挑选工作有条不紊地沿着最省机时的步骤前进。本文将以太/石墨— $(2 \times 2)$  表面结构的分析为例,对  $R$  因子的制定、选用、性质、变化规律、使用方法作一较全面的介绍。

## 2 几种主要的 $R$ 因子

在 LEED 动力学理论的发展过程中,由于各人对  $I-V$  曲线拟合好坏标准中所强调的重点不同,定义出了十余种  $R$  因子。近年来,人们分析了各种定义法的特点和长处,常用几种不同定义的  $R$  因子的平均值来作判别标准。笔者在  $\text{Cs/C}(0001)-(2 \times 2)$  表面结构的分析中采用了如下五种  $R$  因子的平均值作为判别标准,它们分别是 ROS,  $R_1$ 、 $R_2$ 、RRZJ、RPE<sup>[2]</sup>。

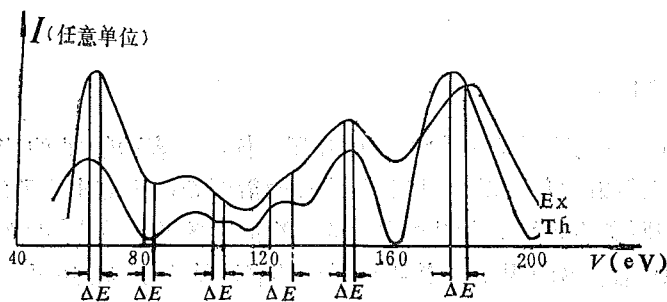


图 1 ROS 因子定义说明。图中曲线  $E_x$  为  $\text{Cs/C}(0001)-(2 \times 2)$  表面结构的  $(1,0)$  实验曲线,曲线  $T_h$  为理论曲线。

ROS 主要强调  $I-V$  曲线中各峰值位置符合的好坏。它的定义为:两拟合曲线斜率相反的部分的能量区间的总和与总区间的比。即图一中各  $\Delta E$  的和与总能量区间的比。

$R_1$  和  $R_2$  是强调两曲线的覆盖面积。它将两曲线在各能量点的强度一一对比:

$$R_1 = A_1 \int |I_e - cI_t| dE$$

$$R_2 = A_2 \int (I_e - cI_t)^2 dE$$

这里下标  $e$  和  $t$  分别表示实验值和理论值。 $c$  是将两曲线归一化,可取

$$c = \int I_e dE / \int I_t dE$$

$$A_1, A_2 \text{ 为常数, } A_1 = 1 / \int I_e dE, A_2 = 1 / \int I_t^2 dE$$

RRZJ 则强调了曲线的形状和变化趋势,RRZJ 的计算结果略去了曲线的背景,因为背景主要与表面的清洁度和有序度有关,而与结构关系较小。RRZJ 将两曲线在各点的一次微商、二次微商一一作比较。

$$RRZJ = A_{RRZJ} \int |I_e' - cI_t'| / (|I_e'| + \max |I_e'|) dE$$

由于散射效应,  $I-V$  曲线在高端的强度往往较弱,从而使曲线中位于高能区域的峰

在整个  $R$  因子中所占的权重过小。为了强调这些小峰的作用, RPE 的计算采用了一个新的变量  $L$ , 它为强度的对数微商, 征  $L = I' / I$ 。逐点比较两曲线的对数微商, 使曲线中的大小峰在  $R$  因子中有同样权重。

从上述介绍可知, 这五种  $R$  因子的平均值综合了各方面的因素, 较全面地概括了实验曲线与理论曲线的拟合程度, 因而在各种表面结构分析中, 能较好地完成表面模型的筛选工作<sup>[3-4]</sup>。

### 3 R 因子的变化规律及其使用方法

表面模型不同, 得到的  $R$  因子不同; 同一表面模型, 由于所使用的参数(如层间距、原子位置, 内势等)不同, 其  $R$  因子也不同。对某一种表面结构, 变化一个未定参数  $x$ , 可得到一个  $R(x)$  函数。研究  $R(x)$  函数的变化规律, 合理地、有效地使用它, 将大大改善 LEED 表面结构分析工作。

表面原子层的层间距是确定表面结构的一个重要参数, 也是 LEED 实验中最敏感的参数。一般情况下,  $R$  因子的大小随理论模型中的层间距增加呈周期性振荡。特别是当设计的模型基本正确时, 这种周期振荡就更明显。图 2 示出  $Cs/C(0001)-(2 \times 2)$  表面中  $R$  随石墨顶层层间距  $d$  变化而出现的周期性起伏<sup>[4]</sup>。用运动学理论很容易解释这种  $R$  因子周期振荡现象。由于低能电子穿透深度很浅(小于  $20 \text{ \AA}$ ), 衍射束的总强度主要由表面几个原子层的衍射束相互干涉而成。低能电子 ( $100 \text{ eV}$  左右) 对应的德布罗意波长约为  $1.2 \text{ \AA}$ 。若在某表面模型中将两表面单层的层间距增加半个波长 ( $0.6 \text{ \AA}$ ), 则两相干的波的相位差增加  $2\pi$ , 其  $I-V$  曲线的形状将出现大致的重复<sup>[4]</sup>。

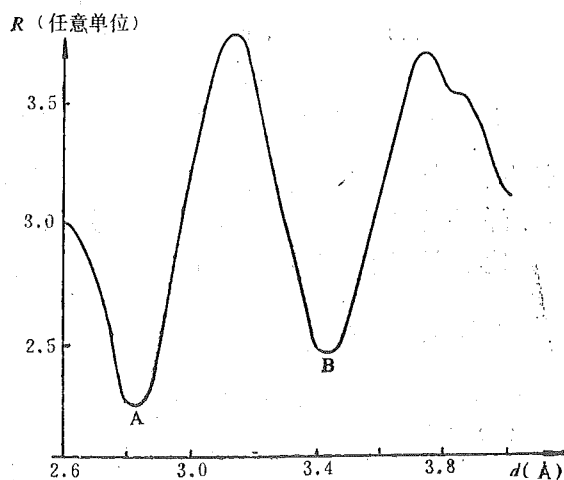


图 2  $Cs/C(0001)-(2 \times 2)$  表面芯位吸附模型的总  $R$  因子随  $d$  的变化关系

从上述的  $R(x)$  函数的振荡特性可知, 在一个很小层间距参数变化范围中, 寻找最佳结构参数可能是不准确的。因为你所找到的可能是极小值(如图 2 中的 B 点), 而不是最小值(图 2 中的 A 点)。为了保证不遗漏真正的最小值, 在粗算中, 层间距的变化范围最好大于  $1.5 \text{ \AA}$ , 即在  $R(d)$  函数中能出在 2 ~ 3 个极小值。

如果理论曲线和实验曲线拟合得十分差, 自然谈不上什么周期振荡性。因此,  $R(d)$  函数的周期性好坏也是判别一个表面模型正确与否的标准之一。

此外,  $R$  因子还应有各衍射束分析结果的一致性。图 3 示出了  $Cs/C(0001)-(2 \times 2)$  表面芯位吸附(B)和顶位吸附(A)的四条衍射束的  $R(d)$  曲线。 $d$  为铯原子层与石墨表面的距离。在芯位吸附模型中, 四条衍射束的  $R(d)$  曲线在  $d = 2.8 \text{ \AA}$  处同时达到极小, 然而对顶位吸附模型却不能出现这样一个共同的极小值。这个分析结果既肯定了芯位吸附模型又从另一方面肯定了  $d = 2.8 \text{ \AA}$  这个参数。

在 LEED 实验中, 各衍射束的  $I-V$  曲线能量区间不一样, 对应的德布罗意波的平均

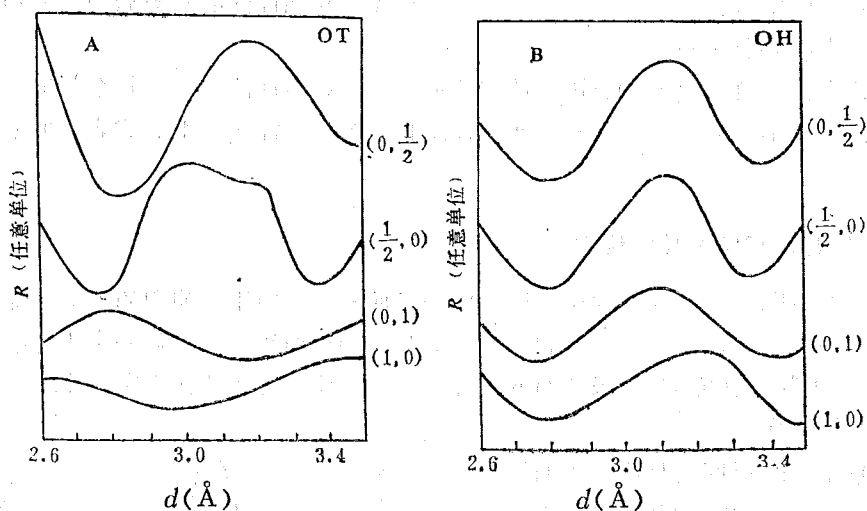


图 3 Cs/C(0001)-(2×2)表面顶位吸附模型 OT(A)和芯位吸附模型 OH(B)的四条衍射束的  $R(d)$  曲线

波长也不一样。这使各衍射束的  $R(d)$  函数变化周期不同。因而只有在最佳结构参数点附近, 所有的衍射束的  $R$  因子都一起达到极小, 而在其它极小值, 各衍射束不能同步。因此, 在  $R$  因子的计算中, 各衍射束分析结果的一致性, 也是模型可靠性的重要标志。

#### 4 多个参数的确定

在表面结构分析中, 常有多未确定参数。一般的处理方法是先将其它参数固定, 在一定范围内变化一个参数, 计算出  $R$  因子, 然后再逐步变化其它参数, 直到将所有可能的结构参数都组合完毕。为了不遗漏每个可能的结构模型, 一般参数的变化范围都取得尽可能的大, 但要节省计算费用, 计算的参数点要尽可能地少。故只能增加参数变化的步长。在这种情况下, 完全按照  $R$  因子的绝对值的大小来选取最佳结构模型将是很不可靠的。

因为某些参数的最佳值很可能夹在两个步长变化点之间。对于两个变化参数的表面模型的筛选, 最好是通过内插外延画出变化参数  $R$  等值图, 即掌握二维函数  $R(x, y)$  的变化规律, 从而使真正的最小值一目了然。如有两个以上的变化参数, 可以分别在各个二维坐标上作这样的等值图。图 4 示出了

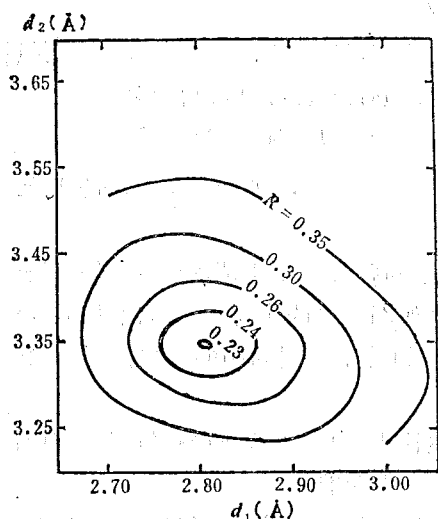


图 4 Cs/C(0001)-(2×2)表面参数  $d_1$  与  $d_2$  变化的等  $R$  值

$d_1$ : Cs 原子层与石墨表面的层间距  
 $d_2$ : 顶层与次顶层石墨层间距

Cs/C(0001)-(2×2)

结构的等  $R$  值图, 其中横坐标为铯原子与石墨表面的距离 ( $d_1$ ), 纵坐标为石墨顶层的层间距 ( $d_2$ )。

从这等值图我们可看出, 当  $d_1 = 2.80 \text{ \AA}$ 、 $d_2 = 3.35 \text{ \AA}$  时  $R$  达到最小, 选定参数的误差不超

过  $0.05 \text{ \AA}$ 。

## 5 总结

从上面的  $R$  因子分析我们可得出  $\text{Cs/C}(0001) - (2 \times 2)$  结构的最可能模型是：铯原子位于石墨表面芯位、铯原子层与石墨层的层间距为  $2.80 \text{ \AA}$ 、而最顶层石墨与次层的层间距为  $3.35 \text{ \AA}$ 。

从这个例子，也可看到  $R$  因子的计算是用 LEED 动力学理论分析确定表面结构的重要组成部分。了解掌握  $R(x)$  函数的变化规律，正确地使用它，不仅能从众多可能的表面结构模型中挑选出最可靠的结构模型，给出一个标志可靠程度的  $R$  值，还可使整个筛选过程层次清楚，经济节约，并得到可能的最高的精度。

## 参 考 文 献

- [1] Van Hove M A and Tong S Y, *Surface Crystallography by LEED*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1979.
- [2] Van Hove M A, Weinberg W H, Chan C M, *Low Energy Electron Diffraction*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1986.
- [3] 胡兹甫、李嘉、伍乃娟, *物理学报*, 37(1988), No. 12, 2068.
- [4] Hu Zipu, Ogletree D F, Van Hove M A, Sormorjar G A, *Surf. Sci.* 180(1987), 433.

# The Surface Structure Determination by Reliability Factor

Hu zi Pu

(*Department of Material Science and Engineering*)

## Abstract

An example is given of the surface structure analysis of  $\text{Cs}/(0001) - (2 \times 2)$ , and the property and calculation procedure of Reliability factor in LEED dynamical theory are introduced. It is pointed out that, with the correct use of R-Factor, the whole analysis procedure will be more logical, more economical, and the result will be more accurate.

**Key words:** surface physics, LEED, structure analysis.

# 清洁 Nb(100)面的结构

潘必才 胡兹莆

(材料科学与工程系)

## 文 摘

采用低能电子衍射 (LEED) 动力学计算法, 计算了 Nb (100) 面的各种弛豫结构的 I—V 曲线, 使之与实验曲线拟合, 用  $R$  因子对这些可能的结构进行搜寻和分析. 结果表明清洁 Nb(100) 面最顶层层间距为  $1.46 \text{ \AA}$ , 与体内相比向内收缩了 11%, 次层层间距为  $1.72 \text{ \AA}$ , 向外膨胀了 5%, 与清洁的 Ta(100) 面的结构相似.

**关键词:** 表面物理, 低能电子衍射, 结构分析.

**中图法分类号:** O484.1

## 1 引言

金属铌钽耐高温、化学性质稳定、对空气有很好的间隙溶解性、有很好的机械延展性, 是很有应用价值的稀有金属. 它们的结构与性能的研究自然是科学家们所热心的课题<sup>[1-3]</sup>.

早在六十年代后期, Hass 等人就用低能电子衍射 (LEED) 研究了 Nb (110)、Ta (110) 清洁表面及其对 CO、O<sub>2</sub> 吸附表面的结构<sup>[1]</sup>. 到 70 年代 Farrell 和 Myron 又用 LEED 研究了 Nb(100) 的清洁表面与 O、N 在其表面的吸附<sup>[2]</sup>. 尽管他们都得到了清晰的衍射照片, 甚至记录下了各衍射束的强度谱, 即 I—V 曲线, 然而由于当时 LEED 的动力学理论还没有发展完善, 他们对这些强度谱无法作出解释, 因而未能得到 Nb 表面的真正结构. 80 年代, TITOV 与 W. Moritz 用 LEED 和 AES 实验手段加之动力学计算, 定出了清洁的 Ta (100) 面结构<sup>[3]</sup>. 但是就笔者所知, 清洁 Nb (100) 面的结构至今仍未发表.

本文将对比 Farrell 和 Myron 的实验曲线, 用 LEED 动力学理论对清洁的 Nb(100) 面的结构作一计算, 用  $R$  因子对可能的结构进行筛选和分析定出最可能的表面结构.

## 2 计算方法

实验中, 样品是在高真空下被加热到  $2200^\circ\text{C}$  后所得到的清洁表面. 俄歇谱检测表明, 表面完全没有了 O、N、C 和其它杂质. 这时 LEED 衍射图上出现清晰的  $1 \times 1$  花样<sup>[2]</sup>, 这表明清洁 Nb(100) 面并无再构发生, 表面结构不同于体内的仅可能是层间弛豫. 因此本文只对表面各种可能的弛豫结构的 I—V 曲线作计算和分析.

本文在  $I-V$  曲线的理论计算中, 采用全动力学计算方法<sup>[4]</sup>, 即不仅计及层间多次散射, 也计及层内多次散射。在计算原子对入射电子的散射时, 采用分波法, 即将入射的平面波展开成多个球面波, 这样将散射强度的计算简化为对散射后各球面波相移的计算。不同球面波被 Nb 原子散射后的相移由 V.L.Moruzzi 等计算的金属原子的 Muffin-tin 势函数得出<sup>[5]</sup>。图 1 示出了  $l=0\sim 7$  这八个分波在入射电子能量为  $20\sim 200\text{eV}$  区间中的相移。从图中我们可以看到对  $l>4$  的分波, 其相移已非常小, 对整个散射强度的影响甚微。为了节省

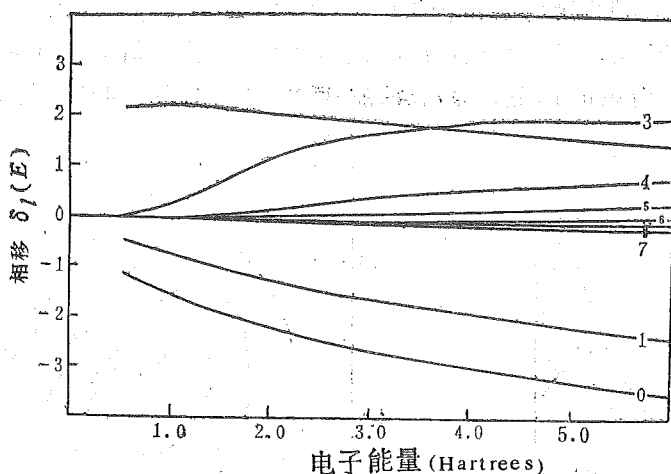


图 1 Nb 原子对于  $l=0\sim 7$  八个分波在低能区产生的相移  $\delta_l(E)$

计算费用, 本题在计算中只考虑 5 个分波, 即  $l_{\max}=4$ 。计算时先得出表面每层原子的散射矩阵, 这里包括了层内多次散射, 再用重整化前向散射微扰法 (RFS 法), 将各层间的多次散射综合起来。这个一层原子的散射矩阵的大小, 即计算中考虑的衍射束的条数, 由入射电压和层间距决定。本计算中高压端最多考虑了 57 条衍射束, 计算中 Nb 的 Debye 温度为  $250\text{K}$ , Nb 的内势即 Muffin-tin 零势相对于真空为  $-11.2\text{eV}$ 。由于实验是在垂直入射条件下进行, Nb 单晶为体心立方, 其 (100) 方向有四次对称轴, 因而只有 (1,0), (1,1), (2,0) 三条独立的一、二级衍射束, 只需分析这三条  $I-V$  曲线。而其它低级衍射束的  $I-V$  曲线分别与它们全同。

### 3 用 $R$ 因子作结构分析

LEED 动力学分析方法是一种拟合法, 即先设计出各种可能的表面模型, 计算它们在相应的实验条件下所应得的  $I-V$  曲线, 将这些  $I-V$  曲线与实验曲线一一拟合, 拟合得最好的曲线组所对应的模型是最可靠模型, 这个拟合工作由  $R$  因子 (即可靠性因子) 的计算来完成。如一模型的理论  $I-V$  曲线与实验曲线拟合所得的  $R$  值最小, 表明该模型最可靠,

由于国际上流行了各种定义的  $R$  因子, 本计算中采用五种不同定义的  $R$  因子的平均值作为曲线拟合的标准, 它们分别是 ROS、 $R_1$ 、 $R_2$ 、RRZJ、RPE<sup>[6]</sup>。其中, ROS 强调了  $I-V$  曲线中各峰值位置符合好坏的情况,  $R_1$  和  $R_2$  是将两拟合曲线在各能量点的值一一对比, 强调它们共同覆盖的面积, RRZJ 逐点比较两拟合曲线的一次、二次微商, 强调了曲线的形状和变化趋势, RPE 强调了小峰的作用。这五种  $R$  因子的平均值  $\bar{R}$  较全面地反映了曲线拟

合好坏的程度。

图 2 (A) 示出了当表层 Nb 原子与次层层间距从  $1.00 \text{ \AA}$  增加到  $1.95 \text{ \AA}$  时, 综合三条衍射束所得的  $\bar{R}$  的变化。可以看到当  $d = 1.45 \text{ \AA}$  时,  $\bar{R}$  得最小值  $0.23$ 。但在  $d = 1.00 \text{ \AA}$  和  $d = 1.95 \text{ \AA}$  附近,  $\bar{R}$  都有希望再次出现极小值。

图 2 (B) 示出了 (10)、(11)、(20) 三条衍射束各自的  $R(d)$  函数。它们在  $d = 1.45 \text{ \AA}$  附近都达到了极小, 除此外,  $d$  的其他值附近不能共同出现极小值, 这使得它们的综合值  $\bar{R}$  大于  $0.23$ 。从图 2 中不难发现各衍射束的  $R$  因子出现周期振荡, 该现象可用运动学理论给予简单解释。由于低能电子穿透深度很浅, (小于  $20 \text{ \AA}$ ), 出射衍射束的强度主要由表面最外几个原子单层的衍射束相干涉所决定。低能电子的能量约为  $100 \text{ eV}$ , 其平均德布罗意波长

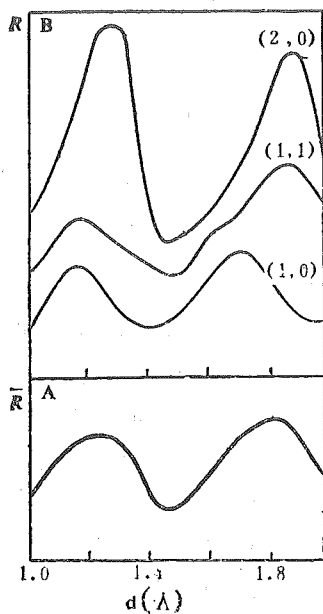


图 2 (A) Nb(100) 面顶层与次层的层间距  $d$  变化所得的  $\bar{R}(d)$  曲线; (B)  $d$  变化时, (1,0) (1,1) (2,0) 三条衍射束各自的  $R(d)$  函数曲线

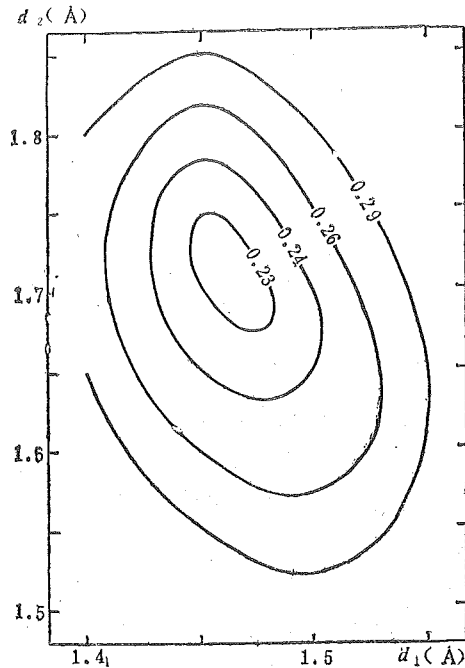


图 3 Nb(100) 面顶层与次顶层层间距  $d_1$  和次层与第三层层间距  $d_2$  在一定变化范围中的  $R$  值及等  $\bar{R}$  曲线

约为  $1.2 \text{ \AA}$ 。当表面两层间层间距变化半个波长 (约  $0.6 \text{ \AA}$ ) 时, 相于波的位相变化  $2\pi$ , 据此  $I-V$  曲线的形状出现大致的重复, 故在  $R(d)$  函数中会出现周期振荡。由于各衍射束所对应的能量区间不同, 其  $I-V$  曲线的形状也不同, 导致  $R(d)$  函数振荡的周期也不同。只有在正确的结构参数点上, 各条衍射束的  $R$  才能同时达到极小, 以致它们的综合结果为最小值。

从物理上看, Nb (100) 面的层间距  $d \leq 1.0 \text{ \AA}$  或  $d \geq 1.95$  都是不可能的, 故  $d = 1.0 \text{ \AA}$  和  $d = 1.95 \text{ \AA}$  的两种模型可排除。因此, Nb (100) 面最顶层与次层的层间距为  $1.45 \text{ \AA}$ , 比体内层间距  $1.635 \text{ \AA}$  小了  $11\%$ 。

对于某些体心立方金属的表面, 自外向内的几个表面层的层间距是收缩与膨胀交替变化



的<sup>[7]</sup>。Nb 单晶是体心立方结构，因此，我们进一步地考虑第二层间距弛豫的情况。

于是我们考虑了表面双层弛豫模型。令最外层间距为  $d_1$ ，次层层间距为  $d_2$ ，在计算中同时变化  $d_1$  和  $d_2$ ，使  $d_1$  的变化范围为  $1.40 \text{ \AA} \sim 1.55 \text{ \AA}$ ， $d_2$  的变化范围为  $1.50 \text{ \AA} \sim 1.80 \text{ \AA}$ 。再将计算所得的各种结构的  $I-V$  曲线与实验曲线拟合，求出  $\bar{R}$  值。图 3 为不同  $d_1, d_2$  结构得出的  $\bar{R}$  值及等  $\bar{R}$  值图。从这图，可清楚看到当结构参数为  $d_1 = 1.46 \text{ \AA}, d_2 = 1.72 \text{ \AA}$  时其  $\bar{R}$  值为最小值。结果的误差小于  $0.05 \text{ \AA}$ ，这个结构便是最可能结构。对比实验和理论计算的三条  $I-V$  曲线也证实了这一点（图 4）。

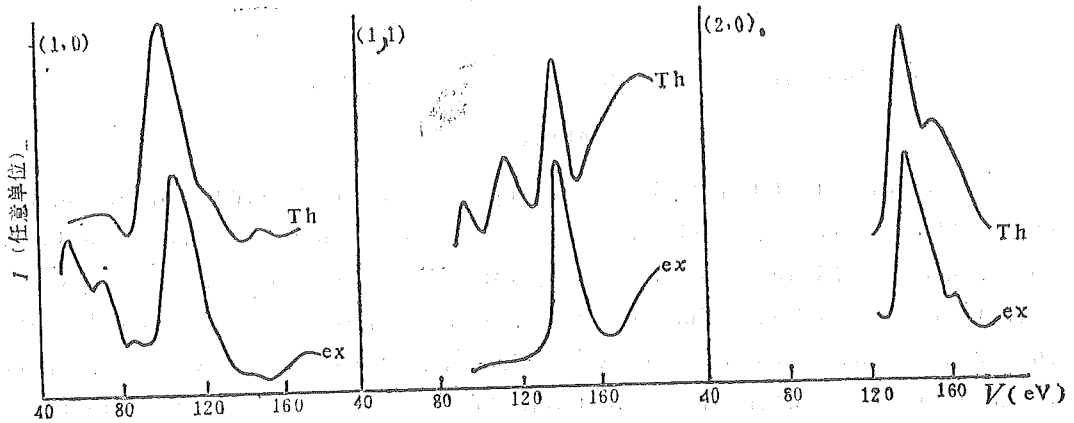


图 4 表面模型的理论  $I-V$  曲线和实验曲线

#### 4 结果与讨论

全动力学计算与  $R$  因子的分析结果表明，Nb (100) 清洁面为弛豫结构。其最表层与次层的层间距为  $1.46 \text{ \AA}$ ，与体内的层间距相比，是向内收缩了 11%，而次层与第三层间的间距为  $1.72 \text{ \AA}$ ，比体内层间距增加了 5%。与 W. Moriz 等计算的 Ta (100) 面对比，Ta (100) 面最外层向内收缩了 11%，第二层向外膨胀了 1%，这二种金属的表面结构非常相似。这也反过来证明了这两个计算结果的正确性。

#### 参 考 文 献

- [1] Haas T W, Jackson A G and Hooker M P, *J. Chem. Phys.*, **46**(1967), 3025.
- [2] Farrell H H and Myron Strongin, *Surf. Sci.*, **38**(1973), 18.
- [3] Titov A and Moritz W, *Surf. Sci.*, **123** (1982), L 709.
- [4] Van Hove M A and Tong S Y, *Surface Crystallography by LEED*, Springer-Verlag, Heideberg, 1978.
- [5] Moruzzi V L, Janak J F and Williams A R, *Calculated Electronic Properties of Metals*, Pergamon Press, New York, 1978.
- [6] Van Hove M A, Weinberg W H, Chen C M, *Low-Energy Electron Diffraction*, Springer-Verlag, Heideberg, 1986.

[7] Cheng D J, Wallis R F and Dobrzynski L, *Surf. Sci.*, **43**(1974), 400.

## The Structure of Clean Nb (100) Surface

Pan Bicei

Hu Zipu

*(Department of Material Science and Engineering)*

### Abstract

A dynamical LEED calculation is applied to clean Nb(100) surface under study. The I-V curves of all possible relaxation structures are calculated and compared with the experimental results. The best structure is chosen with R-factor analysis. The calculated result claims a surface model with the top interlayer spacing of 1.46 Å which is contracted by 11% with respect to the bulk value, while the second interlayer spacing is 1.72 Å which is expanded by about 5%. This model is very similar to that of clean Ta(100) surface.

**Key words:** surface physics, LEED, structure analysis.

# 聚乙烯的光敏交联

徐文英 严庆 Bengt Rånby\*

(材料科学与工程系)

## 摘 要

研究了交联剂存在下聚乙烯的光敏交联反应,讨论了不同交联剂、样品厚度及光强条件对反应的影响,发现交联速度与光强的平方成正比。另外还运用 Charlesby 公式对数据进行处理,定量地估算了交联过程中裂解作用的程度,并与高能辐射的结果进行了比较。

**关键词:** 光交联, 交联聚乙烯, 光引发反应。

**中图法分类号:** O644.19

## 1 前言

由 G. Ostor 于 1956 年首次提出的紫外光引发交联聚乙烯<sup>[1]</sup>, 依靠光敏剂吸收紫外光子的能量, 高分子链上产生活性的自由基, 从而导致交联网状态结构的形成, 提高了材料的使用温度上限。近年来, 由于 B. Rånby 等人的工作<sup>[2]</sup>, 在反应体系中引入了交联剂, 使这一光敏交联的方法在工业上显示出令人鼓舞的应用前景。但是, 由于体系复杂, 影响反应的因素多, 长期以来一直没有解决光强与交联速度的关系<sup>[3]</sup>, 光敏交联中裂解的影响也很少有人定量研究。

本文实验探讨了光敏化法交联聚乙烯的结果, 利用 Charlesby 关系式以及由此推导所得的动力学方程对交联样品的溶解度数据进行理论处理, 定量比较了光敏交联与辐射交联中聚乙烯裂解作用的程度。

## 2 实验部分

### 2.1 原料

低密度聚乙烯 (LDPE) 112A-1 (燕山石化总公司生产);  $d = 0.921$ ,  $M.I. = 2$ ,  $\bar{M}_n \approx 32,000$ <sup>[\*]</sup>。

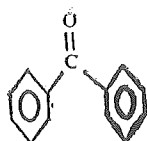
1988年10月18日收到。

\* 瑞典皇家理工学院教授, 本校客座教授

[\*] 根据  $\bar{M}_n^{1/2} = 188 - 30 \log(M.I.)$  所得。

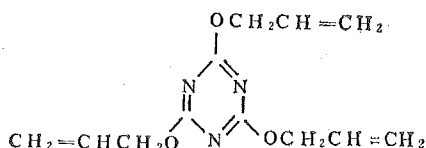
光敏剂：二苯甲酮(BP)

上海试剂一厂生产

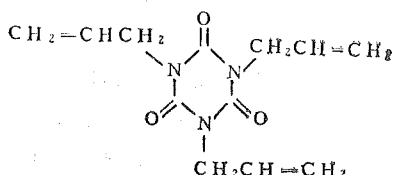


交联剂：① 三聚氰酸三稀丙基酯(TAC)，

安徽化工研究所生产



② 三聚异氰酸三稀丙基酯(TAIC)，



## 2.2 光源

直管型高压汞灯，GGZ-500(500W)和GGZ=1000(1000W)。光谱弥散而连续，紫外区域主要集中于 $\lambda = 365\text{nm}$ 。

## 2.3 辐照装置

交联过程是在专门设计制造的“紫外辐照箱”中进行的。它具有鼓风冷却设备和加热控温系统，灯与样品间的距离可调，并能在光照时在样品周围保持惰性气氛。

## 2.4 样品制备

将光敏剂、交联剂与聚乙稀树脂按一定的比例熔融混合后，热压成1mm和3.5mm两种厚度的试片，在有 $\text{N}_2$ 保护的样品池中，于熔点以上辐照一定的时间。

## 2.5 交联度的表征

(i) 抽提：称取约1克辐照过的交联样品( $W_1$ )，切成碎片并置于50目的不锈钢网笼内，用含有抗氧剂的二甲苯在 $\text{N}_2$ 气氛中抽提24小时，然后将所得凝胶用丙酮浸洗，再在烘箱中 $60^\circ\text{C}$ 下干燥过夜至恒重( $W_2$ )。样品的凝胶含量 $g$ 可由下式求得，

$$g(\%) = \frac{W_2}{W_1} \times 100\% \quad (1)$$

(ii) 溶胀：称取约0.1克的凝胶，在对二甲苯中于 $81^\circ\text{C}$ 下溶胀4小时达到平衡。将溶胀后的凝胶迅速转移至封闭的称量瓶中称重。根据前后重量的变化，可以求出凝胶的体积溶胀比 $Q_v$

$$Q_v = 1 + \frac{\rho_p}{\rho_s} \cdot \left( \frac{W_s}{W_0} - 1 \right) \quad (2)$$

式中， $W_0$ ， $W_s$ 分别为溶胀前后凝胶的重量； $\rho_p$ 和 $\rho_s$ 分别为凝胶和溶剂的比重。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 交联密度的计算

根据橡胶弹性理论<sup>[4]</sup>, 从溶胀的结果可求得凝胶部分的有效交联密度  $\nu_e^{(g)}$ ,

$$\nu_e^{(g)} = - \frac{\ln(1 - v_p) + v_p + \chi v_p^2}{\bar{V}_s \left( v_p^{1/3} - \frac{1}{2} v_p \right)} \quad (3)$$

式中  $v_p = Q_v^{-1}$  为高分子在溶胀的凝胶中的体积分数;  $\chi = 0.3381$  为聚合物-溶剂的相互作用参数<sup>[5]</sup>;  $\bar{V}_s$  为溶剂的摩尔体积。

考虑到端基修正, 交联点间的平均分子量  $\bar{M}_c$  可由下式求出

$$\frac{1}{\bar{M}_c} = \frac{2}{\bar{M}_n} + \frac{\nu_e^{(g)}}{\rho_p} \quad (4)$$

从  $\bar{M}_c$  又可以求出凝胶部分的实际交联密度

$$\nu^{(g)} = \frac{\rho_p}{\bar{M}_c} \quad (5)$$

换算至整个样品中 (包括溶胶部分  $S$ ), 则有

$$\nu = \nu^{(g)} / (1 + S) \quad (6)$$

(6) 式见[5], 所得结果列于表 1。

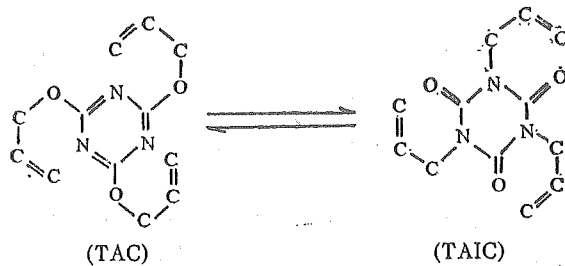
表 1 LDPE 的光交联结果

照射时间 (sec)	5	10	20	40	60	120
凝胶含量 (%)	47.4	62.0	69.8	76.4	77.8	77.6
$\bar{M}_c \times 10^3$	15	14	12.3	10.9	10.4	9.9
交联密度 ( $10^{-5} \text{ mol/cm}^3$ )	2.91	4.08	5.26	6.62	6.90	7.19

\* 样品: 1mm厚, 灯:GGZ-1000; 距离:10cm

#### 3.2 不同交联剂的比较

图 1 表示使用两种不同的交联剂时凝胶含量与辐照时间的关系。可以看到, TAC 与 TAIC 在实验中的效果几乎完全相同。这是因为在反应过程中两者间存在着异构化转变<sup>[6]</sup>:



所以使用任一种交联剂时在本质上都是以 TAC-TAIC 平衡共存的。

#### 3.3 样品厚度与交联均匀性

图 2 表明了两种不同厚度的样品的交联结果。随着样品厚度的增加, 反应完成的时间延

长,但最终的极限交联度不变。

如果将样品沿辐照表面每隔 0.5mm 剖削下一层,每层薄片代表不同辐照深度下样品交

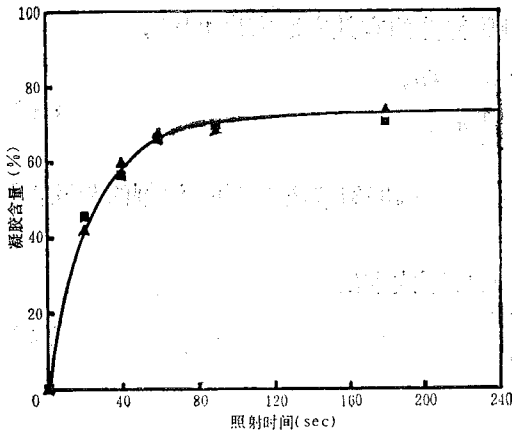


图 1 两种交联剂的比较  
样品:1mm厚;灯:GGZ—500;距离:10cm  
■ TAIC; ▲ TAC

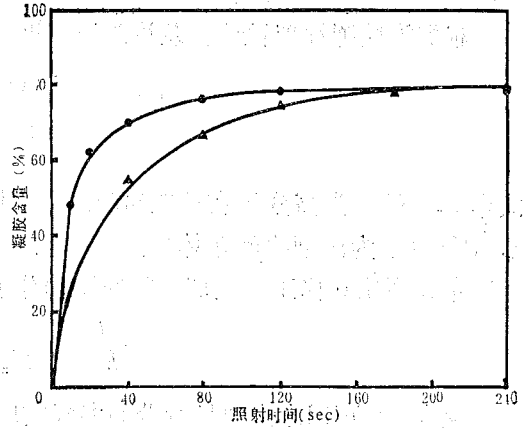


图 2 不同厚度样品的凝胶形成  
● 1mm; ▲ 3.5mm  
光强:1000W,距离:10cm

联程度的平均值,从列于表 2 的凝胶含量情况可以看出,加入交联剂的光敏化方法能够对几毫米厚的样品达到令人满意的均匀交联效果。

表 2 LDPE 光交联的均匀性

离表面的深度 (mm)	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
凝胶含量 (%)	77.9	78.5	78.7	77.8	75.4	74.2	71.7

样品:3.5mm厚;灯:GGZ—1000;距离:10cm  
照射时间:90sec

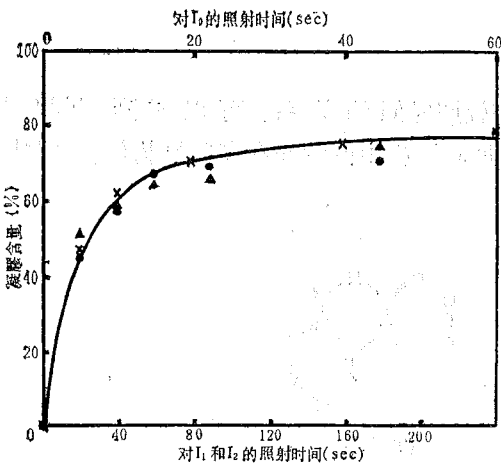


图 3 光强对凝胶形成速率的影响  
 $I_0$ :1000W,10cm(×); $I_1$ :500W,10cm(●)  
 $I_2$ :1000W,14cm(▲)

### 3.4 光强的影响

我们用以下方式通过改变灯的输出功率和灯与样品间的距离来实现光强的改变:

$$I_0: 1000W, 10cm$$

$$I_1: 500W, 10cm$$

$$I_2: 1000W, 14cm$$

显然有:

$$I_0 = 2I_1 = 2I_2$$

图 3 表示了在上述三种光强下样品交联的结果。为便于比较,我们在图中将  $I_0$  的时间坐标放大了 4 倍,可以看到,三组实验点几乎落在同一动力学曲线上,也就

是说,当光强减弱为原来的 $\frac{1}{2}$ 时,达到相同交联程度需花费原来4倍的时间。这一结果证明了交联的速度与光强的平方成正比。

### 3.5 裂解作用

根据无规交联理论,可以得到著名的Charlesby公式<sup>[7]</sup>

$$\frac{1}{r} = \frac{p_0}{q_0} + \frac{1}{q_0 u_1} \cdot \frac{1}{R} \quad (7)$$

式中 $r = \frac{1}{S + \sqrt{S}}$ 为交联指数( $S = 1 - g$ 为溶胶分数); $p_0, q_0$ 分别代表单位剂量引起的裂解和交联单元数; $R$ 为辐照剂量; $u_1$ 为起始数均聚合度。

在光敏化反应中, $R$ 作为实际吸收的光量子数,它与光敏剂参加反应的分数(转化率 $\alpha$ )成正比。已知<sup>[8]</sup>

$$\frac{d[\text{BP}]}{dt} = k_1 I^2 [\text{BP}] \quad (8)$$

积分得

$$[\text{BP}] = [\text{BP}]_0 e^{-k_1 I^2 t} \quad (9)$$

所以

$$\alpha = 1 - e^{-k_1 I^2 t} \quad (10)$$

另外,根据理论分析可得如下光敏交联反应的动力学方程<sup>[8]</sup>

$$\frac{dv}{dt} = K \cdot k_1 I^2 [\text{BP}] \quad (11)$$

其中 $v$ 为交联密度, $K$ 为比例系数——可以近似地看作与时间无关。

将(9)式代入(11)式

$$\frac{dv}{dt} = K \cdot k_1 I^2 [\text{BP}]_0 e^{-k_1 I^2 t} \quad (12)$$

对时间积分

$$v = K [\text{BP}]_0 (1 - e^{-k_1 I^2 t}) \quad (13)$$

所以有

$$R \propto \alpha \propto v$$

因此Charlesby公式可以写成

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{p_0}{q_0} + \frac{A_0}{v} \quad (14)$$

从(14)式可以看出,以 $\frac{1}{\gamma}$ 对 $\frac{1}{v}$ 作图将得到一条直线(图4),将该直线外推,从截

距可以求得裂解/交联之比 $\frac{p_0}{q_0} \approx 0.28$ 。

作为对比,我们在六万居里的 $^{60}\text{Co}-\gamma$ 射线源中对相同的聚乙稀粒料进行限量空气中的

辐照交联（封闭于辐照瓶中），所得的凝胶含量的结果直接用 Charlesby 公式处理后得到图 5 所示的直线，其截距  $\frac{p_0}{q_0} \approx 0.44$ 。

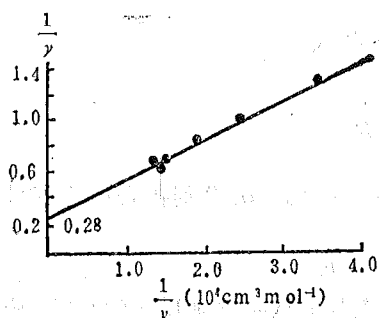


图 4 用 Charlesby 公式处理的光交联结果

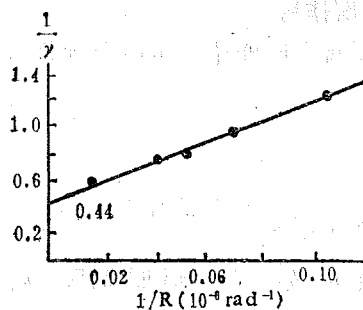


图 5 用 Charlesby 公式处理的  $\gamma$ -射线照射交联结果

由此可见，光敏交联法在减少裂解的副作用方面比辐射交联法有所改善，但其裂解的比例仍相当可观。

#### 4 结论

本工作研究了 LDPE-BP-TAIC 体系中交联剂、样品厚度以及光强对聚乙稀光敏交联的影响，确认了光敏交联是光强的二级反应，使我们可以事半功倍地提高生产效率。另外，对裂解情况的研究表明，尽管光敏交联采用的是能量较低的近紫外线作为辐射源，其裂解/交联的比例大约为 1:3~1:4，并不象人们所预计的那样可以忽略，但与高能辐射相比，在减少裂解的副作用方面还是有了相当的改进。

#### 参 考 文 献

- [1] Oster G, *J. Polym. Sci.*, **22** (1956), 185.
- [2] Rånby B, Chen Y L, Qu B J and Shi W F, IUPAC International Symposium on 'Polymer for Advanced Technology' in Jerusalem, Israel, Aug. 16—21, 1987. (in print 1988).
- [3] 钱保功、姜炳政、廖玉珍、梁映秋、王霞瑜、范重昌，中国科学院高分子会议会刊，科学出版社，北京，1961，p327.
- [4] Flory P J, *Principles of Polymer Chemistry*, Cornell Univ. Press, Ithaca, New York, 1953.
- [5] 宋名实、胡桂贤、陈教详，中国科技大学学报，3 (1973)，106.
- [6] Clappitt B H, German D E and Galli J K, *J. Polym. Sci.*, **27** (1958), 515.
- [7] Charlesby A and Pinner S H, *Proc. Roy. Soc.*, **A249** (1959), 367.
- [8] 严庆、杜定准、徐文英、B. Rånby, 材料科学进展，待发表。



# Photoinitiated Crosslinking of Polyethylene

Xu Wenying    Yan Qing    Bengt Rånby\*

*(Department of Material Science and Engineering)*

## Abstract

The reaction of photocrosslinking of polyethylene in the presence of sensitizer and crosslinker is investigated. The effects of different crosslinkers, different thicknesses of samples, and different light intensities are discussed. It was found in the research that the rate of crosslinking was proportional to the square of light intensity. The experimental data were treated by Charlesby formula, and the ratio of degradation/crosslinking was calculated and compared with that in  $\gamma$ -irradiation process.

**Key words:** photocrosslinking, crosslinked polyethylene, photoinitiated reaction.

---

\* Department of Polymer Technology, Royal Institute of Technology. Visiting professor of USTC,

# 聚对苯二甲酸丁二醇酯-聚ε-己内酯 嵌段共聚物链化学结构研究

罗筱烈 马德柱 蒋文博

(材料科学与工程系)

## 摘 要

应用核磁共振氢谱和计算机分峰技术定量计算,证明了聚对苯二甲酸丁二醇酯(PBT)-聚ε-己内酯(PCL)嵌段共聚物软、硬链段间的连接有两种方式。软链段有两种结构形式,而硬链段的结构单元也有两种类型,从而确定了PBT-PCL嵌段共聚物链的化学结构。

**关键词:** 聚对苯二甲酸丁二醇酯,多嵌段共聚物,核磁共振谱法和计算机分峰技术。

**中图法分类号:** O631.12

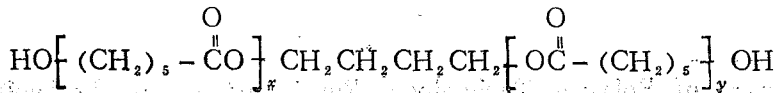
聚对苯二甲酸丁二醇酯(PBT)-聚ε-己内酯(PCL)嵌段共聚物的化学结构比较复杂,这是由于硬链段和软链段的结构单元中均含酯基,致使在聚合过程中产生了酯交换反应,软链段聚ε-己内酯链结构发生了变化,结果使嵌段共聚物软段的分子量和链结构与原来的聚ε-己内酯预聚物的分子量和链结构产生了差别,硬链段的结构也有相应的变化。为此,本工作应用核磁共振法确定了PBT-PCL嵌段共聚物软、硬链段的连接方式,硬链段结构单元的种类等。PBT-PCL嵌段共聚物与PET-PCL嵌段共聚物相比<sup>[1]</sup>,由于前者核磁共振吸收峰交叠更严重,更难分辨,因而,必须采用计算机对核磁共振谱中的共振吸收峰进行分峰,并定量证明PBT-PCL分子链中官能团的比例关系,从而更有效地确定了各共振吸收峰的归属和链的化学结构。

## 1 实验

### 1.1 样品合成

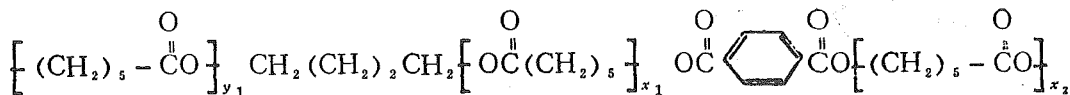
#### 1.1.1 PBT-PCL 嵌段共聚物

PBT-PCL嵌段共聚物由本实验室合成,所用羟基封端聚ε-己内酯具有如下结构



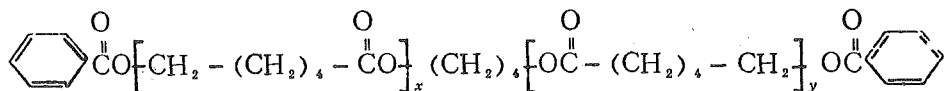
1988年11月28日收到。

### 1.1.2 模型化合物I



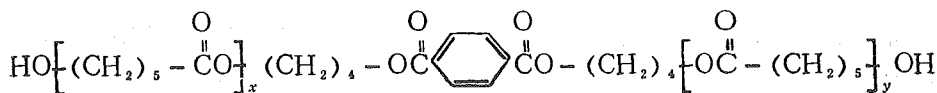
的合成以对苯二甲酸二甲酯和双羟基封端聚ε-己内酯反应得到，配料比为1:2，(mol比)，在催化剂存在下于200℃反应得到。

### 1.1.3 模型化合物II

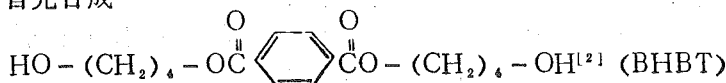


的合成以苯甲酰氯和双羟基封端聚ε-己内酯为原料，配料比为2:1(摩尔比)，反应于室温下进行。

### 1.1.4 模型化合物III



的合成，首先合成



然后以BHBT为起始剂，使ε-己内酯单体开环聚合得到。

BHBT经多次重结晶后熔点为73℃<sup>[21]</sup>。

### 1.2 <sup>1</sup>H-NMR 测试

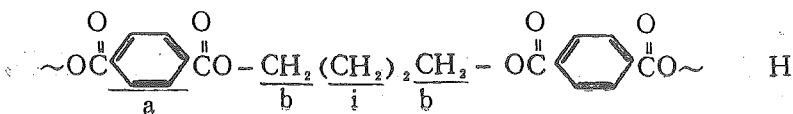
分别用VARIAN EM-360L型60MHz及CAMECA TSN-250型250MHz核磁共振谱仪测得。溶剂采用氯仿、氘代氯仿和三氟醋酸(TFA)，浓度为10%左右，以TMS为参比物。

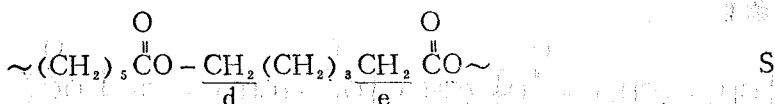
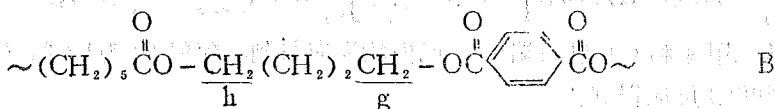
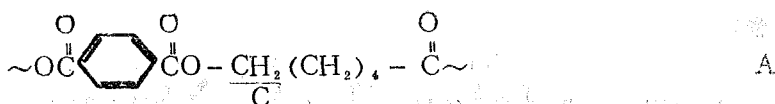
### 1.3 计算机分峰

在IBM-PC/XT机上，以广义Lorentz函数为峰函数，采用D. W. Marguardt阻尼最小二乘法，对吸收峰进行拟合，误差为3—7%范围。

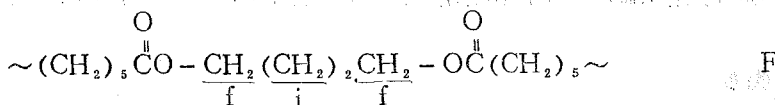
## 2 结果与讨论

聚酯-聚醚和聚氨酯的合成，是由只含一种末端官能团的软链段和只含另一种官能团的硬链段的单体相互反应而成，由于相同官能团之间不起反应，链间也不产生其它副反应，故链结构是清楚的，然而，PBT-PCL嵌段共聚物的合成，软链段和硬链段的结构单元中含酸有可以相互反应的官能团，因而使情况变得复杂多了。在体系中有两种酯基(对苯二甲酯的酯基和己内酯的酯基)和两类羟基(对苯二甲酸β-羟乙酯及其低聚体的羟基和聚己内酯的端羟基)。因此，PBT-PCL嵌段共聚物的分子中应该有如下四种链结构，并分别用英文大写字母表示





此外，由于己内酯结构单元酯基的单向排列，所以还有一类链结构



这是在合成聚己内酯时，由起始剂 1,4-丁二醇引入的。在嵌段共聚物分子中，它是链结构 A 的延伸，因而也是 A 的组成部分。

在每类链结构中，用英文小写字母标记了各类不同化学环境的质子。


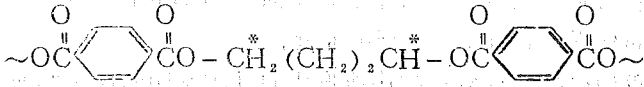
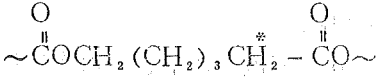
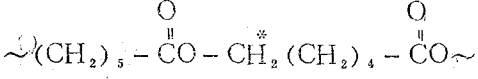
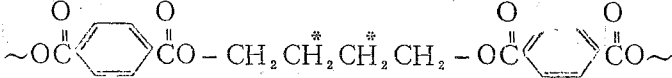
不难看出链结构 H 是 PBT，即硬链段，链结构 S 属于 PCL，即软链段；而链结构 A 和 B 则是硬、软链段的两种过渡连接方式。因此，在链结构 H 和 S 中，各类质子是纯 PBT 和纯 PCL 所固有的，而链结构 A 和 B 中所标的质子类型是在反应过程中形成的，即 A 中连于对苯二甲酸酯基的  $-\text{CH}_2-$  的 C 类质子和在 B 中连于对苯二甲酸酯基及其己内酯的 g 类及 h 类质子。

图 1 是纯 PBT、纯 PCL、PBT 与 PCL 的共混物和 PBT-PCL 共聚物的 60MHz 核磁共振氢谱图，由图谱上可以看到，PBT 及 PCL 共混物的核磁共振吸收峰只是纯 PBT 和纯 PCL 共振吸收峰的简单叠加；而 PBT-PCL 共聚物的共振吸收峰则不同，主要体现在两处，即化学位移值  $\delta$  在 1.88ppm 至 2.13ppm 区间和  $\delta$  为 4.25ppm 至 4.56ppm 区间发生了变化。这些都是由于酯基连接方式的变化引起的；前者起因于酯氧基  $\beta$  位置的  $\text{CH}_2$  化学环境的变化，而后者则是直接与酯氧基连接的  $\text{CH}_2$  化学环境变化一致。通过对比纯 PBT 和纯 PCL 的共振吸收，很容易确定 PBT-PCL 共聚物图谱中其它的共振吸收峰的归属， $\delta = 8.20, 4.56$  和  $2.13\text{ppm}$  的峰与硬链段有关，而  $\delta = 4.25, 2.55\text{ppm}$  的共振吸收峰是属于软链段的。

与 PET-PCL 嵌段共聚物的核磁图谱比较<sup>[1]</sup>，PBT-PCL 各类酯氧基邻接的  $\text{CH}_2$  的质子共振吸收峰更为集中，前者的各共振吸收峰分布于 4.04 至 4.64ppm 区间，而后者的区间为 4.04 至 4.56ppm。在这样小的区间内把数个重叠程度较大的峰归属是有困难的。我们曾企图通过溶剂效应，把上述区间内共振吸收峰的距离拉开，当用三氟乙酸代替氯仿作溶剂时，发现已知的几个共振吸收峰的化学位移同时都向低场移动，其变化情况列于表 1。由表可以看到硬链段及软链段的主要共振吸收峰在三氟乙酸溶剂中均向低场移动，并不能把原有谱峰的相对位置拉开。

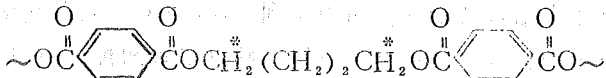
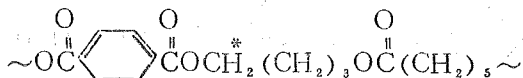
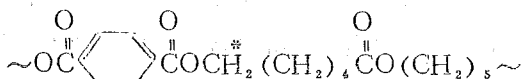
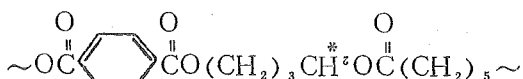

为了归属化学位移在 4~5ppm 区间的共振吸收峰，我们合成了三种模型化合物，模型化合物 I 是由对苯二甲酸二甲酯与双羟基封端的聚己内酯反应生成，反应过程中只产生了对

表 1 样品在两种溶剂中的化学位移

峰号	化学位移		对应结构	位移差
	CHCl <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub> COOH		
a	8.04	8.20		0.16
b	4.41	4.56		0.15
e	2.34	2.50		0.16
d	4.04	4.25		0.21
i	1.96	2.13		0.17

苯二甲酸酯与己内酯连接的 C 类质子,其 60MHz 核磁谱示于图 2,由于其它共振吸收峰的归属是已知的,则在  $\delta = 4.32\text{ppm}$  处的新共振吸收峰应属于 C 类质子。在图 2 中,同时展现了模型化合物 II 的共振吸收谱,同样道理,  $\delta = 4.30$  处的共振吸收属于苯甲酸酯与己内酯连接的酯氧基的 CH<sub>2</sub> 上的质子;后者的化学位移比前者小 0.02ppm,这可以被认为是由于苯甲酸酯基的屏蔽作用比对苯二甲酸二甲酯基稍大的缘故。模型化合物 II 是在室温下合成的,避免了酯交换反应,聚己内酯的羟基与苯甲酰氯的反应是唯一的反应,从而更进一步证明了

表 2 <sup>1</sup>H-NMR 谱峰的归属

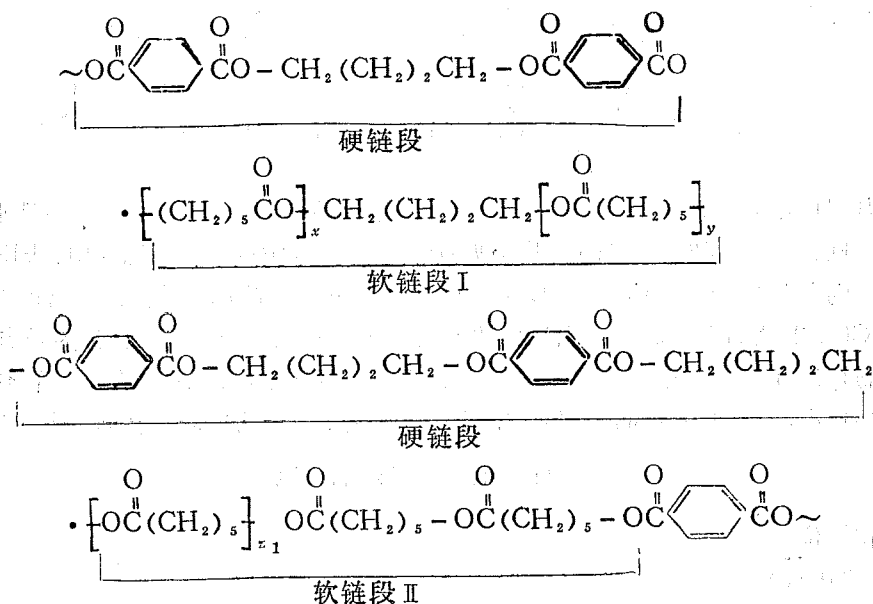
峰类	化学位移 (CHCl <sub>3</sub> )	结 构
b	4.41	
g	4.34	
c	4.32	
h	4.14	
d	4.04	

C类质子的化学位移值确实等于4.32ppm。

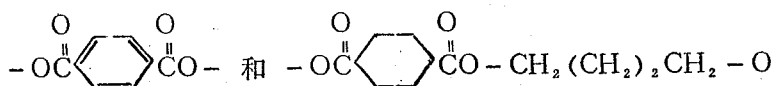
模型化合物Ⅲ是以对苯二甲酸双羟丁酯为起始剂使己内酯单体开环得到，由于对苯二甲酸酯基必须是通过丁二醇与己内酯连接，因此，在其分子中除了已知的质子外，还应含有h类及g类质子。图3的核磁共振图谱显示，除了 $\delta = 4.14$ 及4.34ppm两处的新吸收峰外，其它共振吸收峰均是已知的，显然这两处的共振吸收峰是属于h类质子及g类质子的。h类质子连接的碳原子与脂族酯氧基相接，而g类质子连接的碳原子则是与芳族酯氧基相接；由于芳环上的酯基与脂族酯基去屏蔽作用的差别，可以判断g类质子的化学位移值为 $\delta = 4.34$ ppm，而h类质子的化学位移在 $\delta = 4.14$ ppm处。

至此，我们已把在反应过程中所形成的几种基团的质子归属完毕，并把化学位移值4~5 ppm区间的共振吸收峰归纳于表2中。

我们把上述五种链结构H、A、B、S和F连结起来得PBT-PCL嵌段共聚物链化学结构：



从这一链化学结构式中我们可以看到PBT-PCL嵌段共聚物含有两种类型的软链段，即结构式中所标的软链段I及软链段II；硬链段有两种类型的结构单元：



从链化学结构式还可以得到两个相等关系式。其一是：由于在分子链中对苯二甲酸酯基或者与丁二醇连接，或者与聚己内酯大醇连接，因此，对苯二甲酸酯单元摩尔数应等于链上丁二醇结构单元摩尔数与聚己内酯大醇的摩尔数之和，因共振吸收峰强度与其对应的摩尔数相当，故可写成如下表示式

$$I_a = I_b + I_c + I_d \quad (1)$$

$I$ 表示相应质子的强度。

另一关系式为，己内酯单体中，与酯羰基和酯氧基连接的 $\text{CH}_2$ 的质子数相等，即 $I_e = I_f$ ，己内酯经过预聚合的嵌段聚合反应后，与酯氧基相连的 $\text{CH}_2$ 发生了变化，预聚过程部

分酯氧基与起始剂 1,4-丁二醇连接, 在嵌段聚合过程也有部分酯氧基与 1,4-丁二醇连接, 形成了链段 B 的形式; 但这些反应过程中与酯羰基相连的 CH<sub>2</sub> 均未有变化, 即 I<sub>o</sub> 不再等于 I<sub>a</sub>, 而应有如下关系式

$$I_o = I_a + I_f + I_b \quad (2)$$

对不同硬段含量的 PBT-PCL 嵌段共聚物, 利用计算机分峰结果, 代入公式 (1) 及 (2), 算出等式两边的值, 列于表 3。

表 3 计算结果

硬链段 含量 (%)	公式 (1)		公式 (2)	
	左式	右式	左式	右式
30	58.4	60.2	35.3	39.8
45	64.5	64.4	33.3	35.7
60	89.2	74.1	24.2	25.9

从表 3 看, 公式 (1) 和公式 (2) 左右两边的计算结果, 除硬段含量较高的样品 (PBT 含量 60%) 在公式 (1) 中数据相差较大 (15.1%) 外, 都在误差允许范围内相等。因此, 计算机分峰计算进一步说明了利用模型化合物所测得氢谱, 对 PBT-PCL 嵌段共聚物核磁共振吸收峰的归属是正确的, 从而也证明我们的 PBT-PCL 嵌段共聚物链化学结构的正确性。

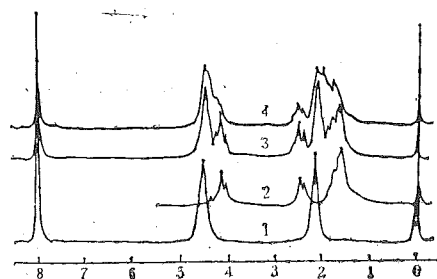


图 1 样品的质子谱  
1 PBT, 2 PCL, 3 PBT 与 PCL 共混物,  
4 PBT-PCL 共聚物 60MHz, 三氟乙酸为溶剂

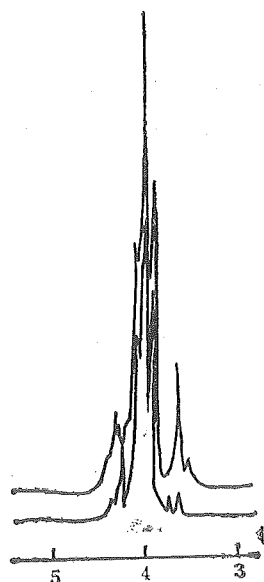


图 2 模型化合物 I 及模型化合物 II 的质子谱  
60MHz 氯仿为溶剂

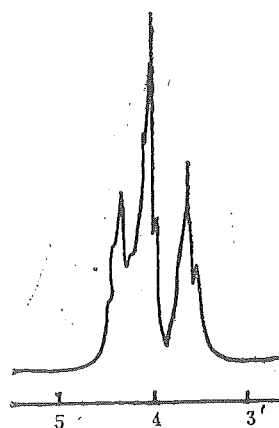


图 3 模型化合物 III 的质子谱  
60MHz 氯仿为溶剂

## 参 考 文 献

- [1] 罗筱烈, 中国科学技术大学学报, 16 (1986), 280.
- [2] Hasslin H W, *Makrom. Chem.*, 181 (1980), 301.
- [3] Newmark A R, *J. Polym. Sci., Polym. Chem. Ed.*, 18 (1980), 559.
- [4] 邱道发等, 石油化工, 12 (1983), 82.

# Chemical Structure on PBT-PCL Segmented Copolymer Chain

Luo Xiaolie    Ma Dezhu    Jiang Wenbo

*(Department of Material Science and Engineering)*

### Abstract

By the analysis of  $^1\text{H}$  NMR spectra of samples and three model compounds and the calculation of computer technology, PBT-PCL's chain chemical structure is defined. It consists of two types of the soft segment structure, two types of the structure unit of the hard segment and two types of linked form between soft and hard segments.

**Key words:** Poly (Butylene terephthalate), segmented copolymer, nuclear magnetic resonance spectroscopy, curve resolution technique.



# 一台慢正电子束实验装置\*

韩荣典 翁惠民 郭学哲 谢力

(近代物理系)

## 摘 要

本文介绍一台磁聚焦传输的慢正电子束装置。在该装置上用 Ni + MgO 慢化体产生了慢正电子, 测量了慢正电子能谱, 并和其他实验组用 Au (Pt, 不锈钢) + MgO 慢化体所得实验结果进行了比较。

**关键词:** 慢正电子, 慢化体, 能谱。

**中图法分类号:** O572.21

## 1 引言

近年来, 由于在获得慢正电子束技术上取得很大进展, 使得慢正电子束在凝聚态物理、表面物理和原子分子物理研究中的作用愈来愈突出<sup>[1]</sup>。由放射源辐射出的连续能谱的快正电子经慢化体慢化后形成 1.0eV 左右的慢正电子, 将这些慢正电子加速聚焦即获得单能 ( $\Delta E(\text{FWHM}) \sim 2\text{eV}$ ) 的慢正电子束。慢化体有金属 + MgO 慢化体<sup>[2]</sup>、退火 W 片慢化体<sup>[3]</sup>和单晶 Cu + S 慢化体<sup>[4]</sup>等。慢正电子传输有静电聚焦传输<sup>[5]</sup>和磁聚焦传输两种方法, 后者加工容易传输效率高, 是采用较多一种方法。

对慢正电子的能量分析有以下几种方法: 飞行时间 (TOF) 法<sup>[6]</sup>, 它适用于放射源强度不太大的情况; 静电谱仪<sup>[7]</sup>和磁谱仪<sup>[8]</sup>, 用这两种谱仪都可以得到较好的能量分辨率, 但造价太高, 平面减速场分析器, 强源时常使用这两种方法。后者缺点是只能测量慢正电子的纵向能量的积分能谱。

本装置采用弧形长螺线管磁聚焦方法传输慢正电子, 用 Ni + MgO 慢化体产生慢正电子, 能量分析使用平面减速场分析器。

## 2 实验装置

实验装置见图 1。高真空传输管道长 150cm, 直径 50mm, 由低磁不锈钢材料制成, 长

1988年10月14日收到。

\* 国家自然科学基金资助的课题。

螺线管产生 10Gs/A 的磁场，在每一真空抽口处增加了一对补偿线圈，用以补偿减弱的磁

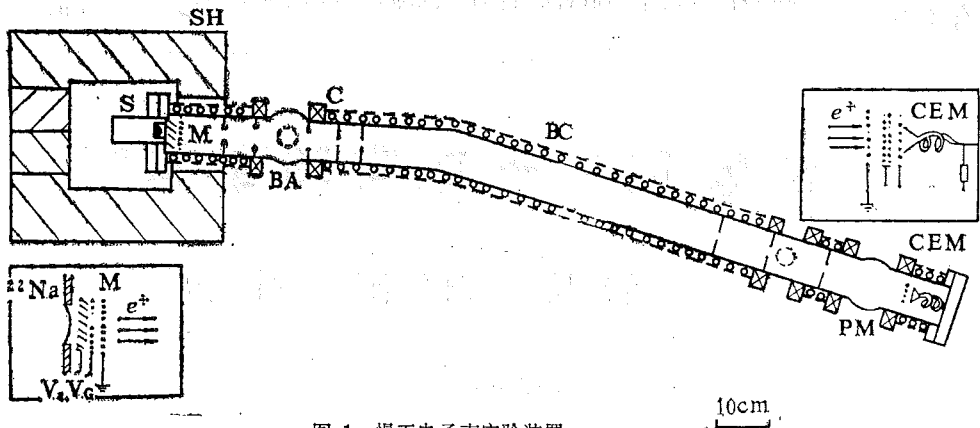


图 1 慢正电子束实验装置

图中 S-β<sup>+</sup> 放射源，M-慢化体，SH-铅屏蔽；BA-真空测量规管；C-补偿线圈；BC-弯曲长螺线管和磁屏蔽；PM-分子泵抽口；CEM-通道电子倍增器。

场。在管道前三分之一处有一半径为 20cm 的 15° 圆弧，这样可以防止放射源直射出的快正电子进入探测器。同时，为了减少散射到探测器的快正电子，在管道内装有八个内孔径为 20mm 的障板。用一台 FBJ-450A 型涡轮分子泵机组获得系统的高真空，慢化体一端的真空度为  $1.0 \times 10^{-6}$  torr，探测器一端好于  $1.0 \times 10^{-7}$  Torr。系统和分子泵之间装有超高真空阀门，可以使系统长时间保持在真空状态，这对于保持慢化体的转换率是非常必要的。

带电粒子在弯曲磁场中运动将引来粒子轨道导向中心的漂移，漂移速度由下式给出<sup>[9]</sup>

$$V_D = (mc/eB^2R^2) \left( v_{\parallel}^2 + \frac{1}{2} v_{\perp}^2 \right) (R \times B)$$

式中  $v_{\parallel}^2$  项来自磁力线弯曲的贡献， $\frac{1}{2} v_{\perp}^2$  项来自弯曲部分磁场径向梯度的贡献， $R$ 、 $B$  分别是磁场弯曲半径和磁场强度。我们将通道电子倍增器 (CEM) 安装在螺线管的几何中心线上，通道电子倍增器入口，直径为 8 mm。在本装置上，对 10eV 正电子，磁场  $B = 20$ Gs 时由上式给出的导向中心漂移为 0.13cm。

我们采用平面减速栅能量分析器<sup>[10]</sup>，测量慢正电子纵向能量的积分能谱。能量分析器由四个透率为 90% 的钨网和一只通道电子倍增器构成 (见图 1 插图)，测出通道电子倍增器对不同能量入射电子的响应曲线，据此确定倍增器入口端电位。最后将该电位  $V$ 。设置在 +400V (对正电子为 -400V)。

慢化体的结构见图 1 插图，它为百叶窗结构，Ni 片厚 0.2mm，宽 3.5mm，Ni 片和磁场方向成 45° 角，片间相距 2.5mm。将 Mg 条在空气中燃烧烟熏到经过清洗的 Ni 片百叶窗上，构成 Ni + MgO 慢化体，接着放入真空室，MgO 在 Ni 片上的厚度约为  $850 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ 。

### 3 实验测量和结果讨论

我们使用的正电子源是一用 Mylar 膜封装的 <sup>22</sup>Na 源、β<sup>+</sup> 强度为 51μCi。从放射源发射的快正电子通过一个厚度为 25μm 的 Al 窗进入真空室，Al 窗引起的正电子损失约为 22%<sup>[11]</sup>。

图 2 是长螺线管电流  $I_M = 3.0\text{A}$  时 CEM 计数随加速电压  $V_a$  的变化, 可以看出 CEM

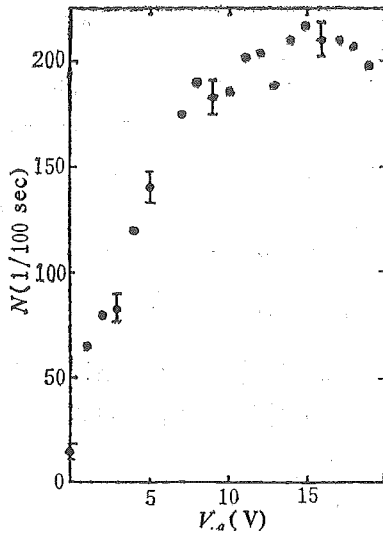


图 2 CEM 计数和加速电压  $V_a$  的关系  
 $I_M = 3.0\text{A}$

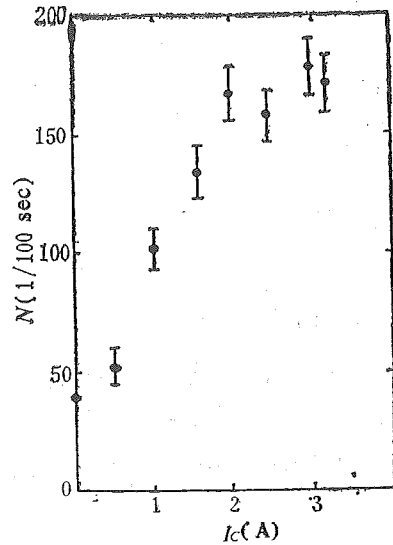


图 3 CEM 计数和补偿线圈电流  $I_c$  的关系

计数直到  $V_a$  大于 12V 时才趋于平坦, 在 0 ~ 12V 这一段, 计数随加速电压  $V_a$  的增大而增加。我们考虑到慢正电子收集可能和加速电压有关, 在慢化体和置地电位的栅网间加了一个栅极网  $V_c$ , 置  $V_c = 15\text{V}$ , 然而所测曲线没有明显的改善, 这可能是低能正电子在传输过程中损失造成的。

计算表明传输管道真空抽口处的磁场强度是长螺线管中磁场强度的三分之一, 磁场的均匀性使粒子传输效率降低, 增加的补偿线圈的作用是明显的, 见图 3, 图 4 是在加速电压  $V_a = 6.03\text{V}$  时用平面减速栅所测得的积分能谱。

取 CEM 对 400eV 电子 (正电子) 的探测效率为 62%<sup>[12]</sup>, 我们得到 Ni + MgO 慢化体的慢正电子转换率如下: 不考虑几何效率和窗损失的转换率 (我们称之为系统转换率)  $\epsilon_s = 1.9 \times 10^{-6}$ ; 考虑几何效率及窗损失时 (称之为慢化体转换率)  $\epsilon_M = 1.7 \times 10^{-5}$ , 表 1 是本工作和其他几装置参数的比较。

从表上可以看出, 本工作用 Ni + MgO 慢化体所得结果和 BNL 组及 Dearborn 组 (文献[5]未给出  $\Delta E$  值) 得到的结果相近。而与 Brandeis 组和 Arlington 组的结果差别较大, 即转换率偏低,  $\Delta E$  偏大。本工作在计算转换率时假定了传输效率为 1, 由于装置的长螺线管上有三个断口, 使纵向磁场在这些地方变弱, 损失部分慢正电子, 这使得实际的传输效率小于 1, 因此使计算的转换率偏低。在能谱测量时, 我们所用的是平面减速栅装置, 它只能分析慢正电子的纵向动量。由于减速场使正电子速度减小, 正电子在纵向磁场中的旋进

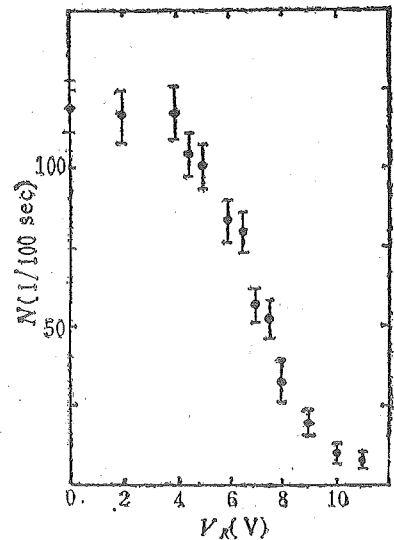


图 4 慢正电子积分能谱  
 $V_a = 6.03\text{V}$

表 1 几家使用 MgO 慢化体的慢正电子束装置的转换率及束流能量宽度

实验室	放射源	慢化体及结构	$\varepsilon_s$	$\Delta E$
Brandeis <sup>[2]</sup>	$^{58}\text{Co}$	Au + MgO 百叶窗	$1 \times 10^{-5}$	$< 2\text{eV (FWHM)}$
BNL <sup>[1,3]</sup>	$^{58}\text{Co}$	Pt + MgO 百叶窗	$2 \times 10^{-6}$	$\sim 5\text{eV (FW)}$
Dearborn <sup>[5]</sup>	$^{22}\text{Na}$	Au + MgO 透射式	$5.4 \times 10^{-6}$	
Arlington <sup>[1,4]</sup>	$^{22}\text{Na}$	不锈钢 + MgO 网式	$1 \times 10^{-5}$	$\sim 1.3\text{eV (FWHW)}$
合肥, 科大	$^{22}\text{Na}$	Ni + MgO 百叶窗	$1.9 \times 10^{-6}$	$< 4.5\text{eV (FW)}$

注: FWHM指微分谱最大高度一半处的全宽度; FW指积分谱高度10%至90%所对应的全宽度。

轨迹会发生变化, 而不是象期望的那样垂直于减速栅平面, 这就造成实验测量的慢正电子能谱有较大的能量宽度。我们建立该装置的目的之一是进行固体近表面结构的研究, 本工作获得的慢正电子束的能量宽度已满足进行这方面工作的要求。

#### 参 考 文 献

- [1] Brandt W and Dupasquier A, Proc. [of the International School of Physics "Enrico Fermi", North-Holland, Amsterdam, 1983, p432.
- [2] Canter K F, Coleman P G, Griffith T C and Heyland G R, *J. Phys.*, **B5** (1972), L167.
- [3] Dale J M, Hulett L D and Pendyala S, *Surf. Interface Anal.*, **2**(1980), 199.
- [4] Mills jr. A P, *Appl. Phys. Lett.*, **35** (1979), 427.
- [5] Zitzewitz P W, *J. Appl. Phys.*, **51** (1980), 856.
- [6] Coleman P G, Griffith T C, Heyland G R, *Appl. Phys.*, **4** (1974), 89.
- [7] Pendyala S, Zitzewitz P W, McGoman J Wm and Orth P H R, *Phys. Lett.*, **43A** (1973), 298.
- [8] Dutton J, Harris F M and Jones R A, *J. Phys.*, **B8** (1975), L65.
- [9] J.D. 杰克逊 (美), 朱培豫译, 经典电动力学 (下册), 人民教育出版社, 1985年, p.140.
- [10] Simpson J A, *Sci. Rev. Instrum.*, **32** (1961), 1283.
- [11] Hulett L D and Dale J M, *Surf. Interface Anal.*, **2** (1980), 204.
- [12] 沈阳玻璃试验厂倍增器研制组, 真空技术, **5** (1976)71.
- [13] Lynn K G and Mckee B T A, *Appl. Phys.*, **19** (1979), 247.
- [14] Coleman P G, McNutt J D, Hutton J T, Diana L M and Fry J L, *Rev. Sci. Instrum.*, **51** (1980), 935.

# An Apparatus for Producing A Slow-positrons Beam

Han Rongdian   Weng Huimin   Guo Xuezhe   Xie Li

*(Department of Modern Physics)*

## Abstract

We describe an apparatus for producing a slow-positrons beam by moderating the decay positrons from a radioactive source using a Ni+MgO moderator. The integral energy spectrum of the slow-positrons was measured with a plane retarding field analyser. The results are compared with those of other groups in which the Au(Pt, stainless steel)+MgO moderators were used.

**Key words:** slow-positrons, moderator, energy spectrum.

## 含氢单晶硅的ESR面效应\*

苏 昉

(基础物理中心)

金嗣炤

(结构分析中心)

### 摘 要

电子自旋共振(ESR)实验结果确定:氢气区熔单晶硅的电子自旋总数随样品平均厚度的相对变化不是体效应,而是面效应。面效应的特点是当样品表面与磁场的夹角在 $0^\circ$ 至 $140^\circ$ 范围内变化时,含氢硅的 $g$ 因子保持不变;在 $0^\circ$ 至 $\pm 90^\circ$ 范围内ESR信号强度由大变小,正负转向基本对称。由此推测:Si(H)/Si<sub>2</sub>O<sub>3</sub>界面中硅悬挂键的数量较少。并观测得:无论红外光照前或后,含氢硅的ESR信号强度都不随微波功率饱和,并归因于自旋-自旋弛豫时间很小,约 $T_2 = 1.4 \times 10^{-8}$ 秒。

**关键词:** 氢气区熔单晶硅, 悬挂键, 自旋-自旋弛豫时间。

**中图法分类号:** O472.5

### 1 引言

氢在非晶硅中的作用被揭示,引起了人们极大兴趣。人们先后利用红外吸收光谱、X射线形貌术、扫描电子显微镜以及电子自旋共振等实验技术研究氢气区熔单晶硅<sup>[1-2]</sup>。文[2]对氢气区熔单晶硅的ESR研究发现:保持样品的长度和宽度不变,逐次减小其厚度,测得电子自旋总数在 $1-0.85\text{mm}$ 范围内随厚度减小而减小,但在 $0.85-0.25\text{mm}$ 范围内却保持不变。曾引起有趣的争论。

一种观点认为:随着样品厚度(即体积)减小,其电子自旋总数应该减小,故在 $1-0.85\text{mm}$ 范围内呈现体效应。而在 $0.85-0.25\text{mm}$ 范围,可能是由于样品变薄导致阻抗减小、 $Q$ 值将升高,仪器灵敏度随之提高,后者抵消了体效应的影响,故每立方厘米的电子自旋总数保持不变。

另一种观点却认为:在 $0.85-0.25\text{mm}$ 的较大范围内,电子自旋总数都不随体积减小而改变,故基本上是面效应。而在 $1-0.85\text{mm}$ 的较小范围内,可能陈旧的ESR谱仪有误差,尤其当样品厚度大于 $1\text{mm}$ 后就无法调得微波的最小反射,以致无法进行ESR测量,令人怀疑在接近 $1\text{mm}$ 的小范围内ESR测量的准确程度。

为了彻底弄清楚,究竟是体效应还是面效应,我们特地重新制备一批样品,换一台性能更优的ESR谱仪,进一步做了些研究。

1989年4月13日收到

\* 中国科学院中国科技大学结构分析开放实验室基金资助的课题。

## 2 实验方法

### 2.1 样品制备

为了便于比较,我们取与文[2]属于同一根的*n*型氢气区熔单晶硅,其中氢的含量约 $4 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ 。用钨丝锯切片,制成 $17.2 \times 3.8 \times \bar{h}$ 的长方体样品,平均厚度 $\bar{h}$ 分别为0.34、0.45、0.58、0.63、0.69、0.83、0.96、1.27、1.56mm。每片样品在高纯酒精中用超声波清洗半小时。

### 2.2 电子自旋共振测量

所有测量都在同一台BRUKER公司的ER200DSRC型ESR谱仪上,室温下进行。微波频率9.7535GHz,微波功率10dB20mW。调制频率100kHz。场调制强度0.8Gp-p。时间常数1秒。标准样品是DPPH,其电子自旋总数 $N_A = 2.35 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ ,  $\Delta H_{pp} = 2.4\text{G}$ ,  $g = 2.0037$ 。

## 3 结果与讨论

### 3.1 面效应的确定

对长宽相同、平均厚度不同的9个样品作ESR测量,得到它们的电子自旋总数的相对变化,再精确测量每个样品的体积 $V$ ,得到含氢硅片电子自旋总数随体积 $V$ 的相对变化如图1。由图1确认:

(i) 当平均厚度在0.34—1.59mm范围内变化时,即样品体积不断增加时,其电子自旋总数基本上保持不变,仅最后一块9\*样品稍有增大,故明显不是体效应。

(ii) 将1\*与2\*样品叠放在一起再作ESR测量,发现其电子自旋总数恰好是1\*与2\*分别测量时的电子自旋总数之和。因其体积之和为 $4.96\text{mm}^3$ ,仍在所测体积变化范围内,故不会是因为体积增加所引起。很可能是因其表面积迭加而引起。

将3\*和4\*样品叠放在一起再作ESR测量,亦得到类似的结果。详见图1。

(iii) 如果所测电子自旋总数随样品表面积增加而增大,则求其每单位面积上的电子自旋总数应该是常量。计算结果详见表1。

由表1得知:每平方毫米面积上的电子自旋总数是不变的,约 $0.30(N_A/I_A \cdot \text{mm}^2)$ 。其中 $N_A$ 是标准样品的电子自旋总数绝对值。

$I_A$ 是标准样品在相同ESR测量条件下的信号强度。

由此确定:氢气区熔单晶硅的电子自旋总数随样品平均厚度的相对变化是面效应。

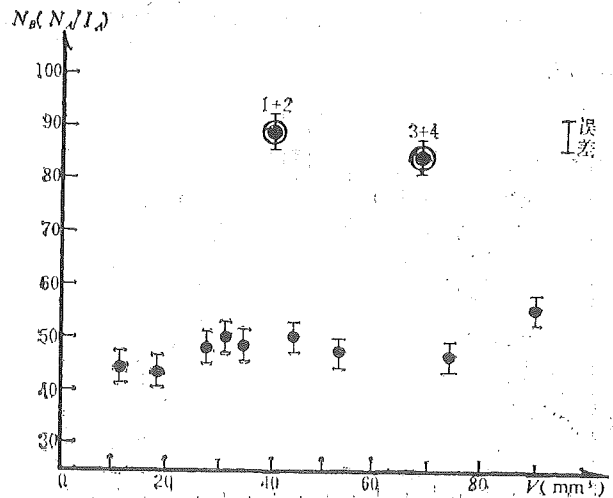


图1 包氢硅片电子自旋总数随样品体积的相对变化

同时也解释了为什么 9° 样品电子自旋总数略有增高。这是因为其平均厚度增大较多，相应表面积也增加较多而引起。

表 1 电子自旋总数随样品表面积的变化

样 品	平均厚度 $\bar{h}$ (mm)	表 面 积 $S$ (mm <sup>2</sup> )	电子自旋总数 $N_B(N_A/I_A)$	单位表面积电子自旋数 $N_B/S(N_A/I_A \cdot \text{mm}^2)$
1°	0.34	140	44.6	0.32
2°	0.45	145	43.5	0.30
3°	0.58	152	47.9	0.31
4°	0.63	156	50.2	0.32
5°	0.69	158	48.4	0.31
6°	0.83	165	50.0	0.30
7°	0.96	172	47.3	0.28
8°	1.27	185	46.7	0.25
9°	1.56	193	55.7	0.29
1° + 2°	0.79	285	88.6	0.31
3° + 4°	1.21	308	84.2	0.27

### 3.2 g 因子的不变性

为了进一步观测含氢硅ESR面效应的其他特点，并探讨其原因，我们把 4° ( $\bar{h} = 0.63\text{mm}$ ) 和 5° ( $\bar{h} = 0.68\text{mm}$ ) 样品迭放在一起，逐次改变样品表面与磁场的夹角  $\theta$ ，测得ESR信号强度随  $\theta$  的相对变化如图 2。图中的实验结果与另一次实验—1°与 2°样品迭放时的结果互相吻合。

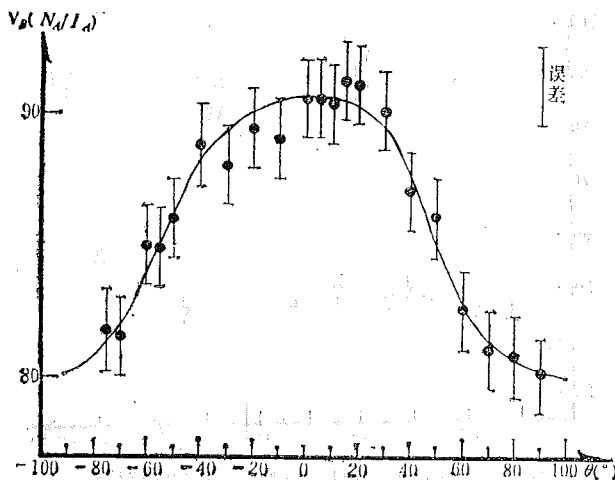


图 2 含氢硅片电子自旋总数随样品表面与磁场夹角的相对变化

我们对单独一片 1° 样品在  $\theta = 0^\circ - 140^\circ$  内每转  $10^\circ$  作一次 ESR 测量，得到完全相同的结论  $g = 2.0059$ ，不随  $\theta$  角改变。

美国 P. J. Caplan 等<sup>[1]</sup> 的 ESR 结果表明：Si/SiO<sub>2</sub> 系统的  $g$  因子是各向异性的，从平行 (111) 轴的  $g_{//} = 2.0012$  变化到垂直于 (111) 轴的  $g_{\perp} = 2.0081$ 。我们的实验结果  $g = 2.0059$ ，

同时，由于  $\theta$  每次取值不同，引起频率  $\nu$  与磁场  $H$  有微小改变。我们根据下列公式计算  $g$  因子如表 2。

同时，由于  $\theta$  每次取值不同，引起频率  $\nu$  与磁场  $H$  有微小改变。我们根据下列公式计算  $g$  因子如表 2。

$$g = \frac{h\nu}{\beta H} = 714.48442 \times \frac{\nu(\text{GHz})}{H(\text{Gauss})}$$

在  $\theta = -20^\circ - 20^\circ$  范围内， $g = 2.0058$

在  $\theta = 20^\circ - 90^\circ$  范围内， $g = 2.0059$ 。

显然， $g$  值的差异均在所测量的误差范围内，故可认为  $g$  因子是不随  $\theta$  角改变的。



较为接近 $g_{\perp}$ 。

我们对 $1^{\circ}$ 样品作X光衍射分析得知：该切片面偏离(111)轴 $5.9^{\circ}$ ，可能这就是本实验的小于 $g_{\perp}$ 的原因。

关于本实验的 $g$ 因子不变的原因，很可能与材料及热处理不同而造成界面内缺陷结构不同有关。Caplan等人选择氧化时间提供了接近 $2000\text{\AA}$ 的氧化物厚度，然后在含 $10\%H_2$ 的 $N_2$ 中，在 $500^{\circ}C$ 退火10分钟，造成大量 $P_{\cdot}$ 心等缺陷结构，并说明在 $50\text{\AA}$ 以上的厚度 $P_{\cdot}$ 浓度基本上是常数。

表 2  $1^{\circ}$ 与 $2^{\circ}$ 样品迭放时的 $g$ 因子测量

样品表面与磁场夹角 $\theta (^{\circ})$	磁 场 $H$ (Gauss)	频 率 $\nu$ (GHz)	$g$
-20	3473.71	9.7520	2.0058
-10	3474.06	9.7530	2.0058
0	3474.34	9.7537	2.0058
10	3474.04	9.7528	2.0058
20	3473.89	9.7526	2.0058
30	3473.73	9.7522	2.0059
40	3473.60	9.7520	2.0059
50	3473.49	9.7517	2.0059
60	3473.51	9.7517	2.0059
70	3473.49	9.7517	2.0059
80	3473.41	9.7515	2.0059
90	3473.37	9.7515	2.0059

在 $Si/SiO_2$ 界面，硅表面原子的外向键大部分与氧结合，但仍可存在少量悬挂键。这种悬挂键可看作是一种界面缺陷。若在 $400^{\circ}C$ 上下在氢气氛中退火，可使 $Si/SiO_2$ 界面的界面态数量显著降低，通常认为这是氢使 $Si$ 的悬挂键饱和的缘故<sup>[4]</sup>。对于氢气区熔单晶硅，在其生长过程中自然形成大量的硅氢键，造成表面硅原子的悬挂键饱和， $Si/SiO_2$ 界面的界面态数量亦显著降低，故没有出现足够浓度的 $P_{\cdot}$ 心缺陷及相当的 $g$ 因子各向异性。

### 3.3 ESR信号强度随微波功率的不饱和性

B. Henderson<sup>[4]</sup>在厚 $33\mu m$ 的 $n$ 型 $Si$ 片上制备出厚 $50\text{\AA}$ 的 $SiO_2$ 层，测量到 $P_{\cdot}$ 心的ESR信号强度随微波功率 $P$ 的饱和性：即在 $P < 0.7mW$ 时随 $P$ 增加而增大，在 $P > 0.7mW$ 后随 $P$ 增加反而不断减小。

为了对照和分析，我们也测量了含氢硅ESR信号强度随微波功率的变化，如图3所示。图中曲线(a)是 $1^{\circ}$ 与 $2^{\circ}$ 样品迭放在一起的测量结果。微波功率从 $10\mu W$ 起，每次加倍，直至 $159mW$ ，ESR信号强度不断增加，始终没有出现饱和现象。曲线(b)是单独测量 $2^{\circ}$ 样品的结果。由于此时表面积比 $1^{\circ} + 2^{\circ}$ 迭放时减小了一半，导致ESR信号强度减半，但仍随微波功率不断增加，呈现明显的不饱和性。

对任一自旋体系,在产生共振吸收后,都存在使自旋从高能级再返回低能级的弛豫过程。若微波功率非常大,以致弛豫过程不能使足够的自旋回到低能级以维持热平衡时的玻尔兹曼分布,两能级上的布居数之差将减小,ESR信号强度将随之减弱,谱线加宽,即产生“饱和”现象。由此看来,氢气区熔单晶硅中弛豫过程速率非常之快,以致对 159mW 的微波功率也

总是能使足够的自旋回到低能级、保持平衡分布,故没有出现“饱和”。

### 3.4 光照效应

我们还观测了含氢硅的光照效应。发现:

(i) 含氢硅在本ESR谱仪附属的紫外光照后,ESR信号强度并无改变。

(ii) 含氢硅在红外光照前后,ESR信号强度有很大的改变,如图3所示。曲线(c)是 $3^{\circ}\text{Si}(\text{H})$ 样品在红外灯下约3cm处受幅照60min后的ESR信号强度。显然,在不同微波功率均比幅照前有较大提高。对同一个 $3^{\circ}$ 样品,在同样条件红外幅照120、180分钟后,其ESR强度与60分钟的完全重合。这表明:红外幅照60分钟已使所有可能释放的束缚电子都转变为自由电子,故尽管幅照时间再延长,电子自旋总数已不能再增加了。

(iii) 含氢硅在红外幅照60~180分钟后,ESR信号强度虽然增大许多,但它仍

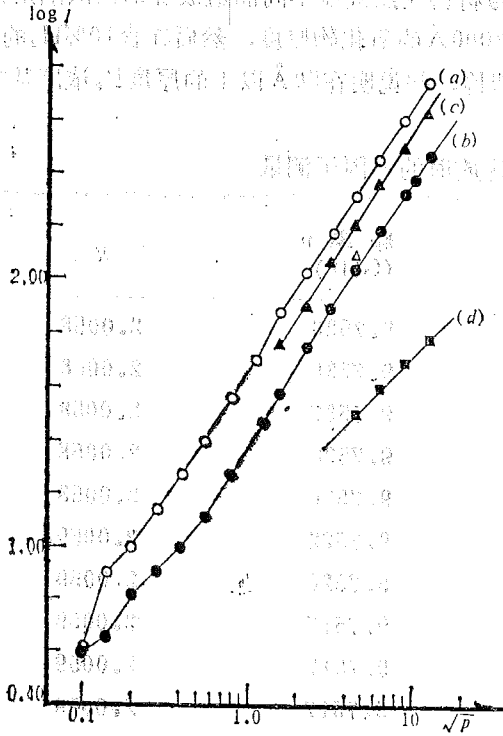


图3: ESR信号强度随微波功率的变化及光照效应

○ 1#与2#样品迭放 ● 2#样品单独测 △ 3#样品光照前  
▲ 3#样品光照60—180分钟 ■ 3#样品光照5.5小时

然随微波功率增加而线性增大,没有出现饱和。

(iv) 含氢硅在红外幅照5.5小时后,ESR信号强度后显著下降,如图3曲线(d)所示。

以上结果(i)、(ii)与B. Henderson的实验结果<sup>[4]</sup>是一致的。用100毫瓦的 $\text{Ar}^+$ 可调染料激光器,波长分别在700—1000nm的光照后,ESR信号强度及光电流(SDPR)都有同样的增加及规律性变化,证实都可归因于束缚电子吸收了光子能量变成自由电子。

结果(iii)与B. Henderson的实验结果有所不同。他们观测到光照后ESR信号强度及光电流随微波功率增加而趋饱和,饱和点的微波功率为100毫瓦,明显大于光照前的0.7毫瓦。而我们观察到含氢硅光照后ESR信号强度仍然呈现随微波功率的不饱和性,可能与3属同一原因。

结果(iv)估计是幅照时间过长,引起样品本身温度过高,实际上在退火,造成 $\text{Si}(\text{H})/\text{SiO}_2$ 界面中各类缺陷重新复合,以致本来就低的Pb心浓度再大幅度降低,ESR信号强度随之减弱。

3.5 弛豫时间的估算  
2、3的推测与以下两点实验事实相符合。

(i) 含氢硅ESR吸收谱一次微商曲线在室温下即获得较窄的线宽, $\Delta H_{pp} = 4.6$ 高斯,

导致谱线增宽的基本原因有两种：久期增宽和寿命增宽。前者起因于自旋-自旋相互作用，后者来源于自旋-晶格相互作用，两者的共同结果使谱线有一定的宽度。理论证明<sup>[5]</sup>可按下式定义弛豫时间  $T$ ： $(\hbar = h/2\pi, h$  是普朗克常数)

$$\Delta H = \frac{\hbar}{\beta g} \left( \frac{1}{T} \right) \quad (1)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{T_2} \quad (2)$$

$\beta$  为玻尔磁子。 $T_1$  是自旋-晶格弛豫时间。 $T_2$  是自旋-自旋弛豫时间。本含氢硅不象其他类样品需要低温测量，减少晶格的热运动，使之不利于自旋体系交换能量，导致自旋-晶格弛豫时间  $T_1$  增加，从而谱线变窄。这就表明氢气区熔单晶硅的  $T_1$  在室温下已经相当大。估计这是因为硅悬挂键数量较少，造成它们与晶格的相互作用很弱。这一结果支持了 Si(H)/SiO<sub>2</sub> 界面中硅悬挂键数量较少的看法。

(ii) 在没有饱和现象发生的情况下，线宽通常由另一弛豫过程，即自旋-自旋弛豫过程所决定。而自旋-自旋弛豫时间与一次微商曲线的峰-峰宽  $\Delta H_{pp}$  有如下关系<sup>[6]</sup>

$$T_2 = \frac{2}{\gamma \sqrt{3} \Delta H_{pp}} \quad (3)$$

其中  $\gamma = \frac{g\beta}{\hbar} = 0.87934 \times 10^7 \text{ g}(\text{Hz/G})$ ，是旋磁比。

我们算得  $T_2 = \frac{1.3131 \times 10^{-7}}{g \Delta H_{pp}} = 1.42 \times 10^{-8}$  秒。

由于  $T_2$  非常之小，故有  $T_2 \ll T_1$ 。根据 (2) 式， $T_2$  小决定了总的弛豫时间  $T$  也非常之小。这一结果支持了由于弛豫过程速率很快而没有出现饱和的看法。

至于含氢硅 ESR 信号强度随样品表面与磁场的夹角  $\theta$  变化的原因，我们尚不清楚，有待于进一步研究。

#### 参 考 文 献

- [1] 崔树范、麦振洪、钱临照，中国科学 (A 辑)，11(1983)，1033；Scientia Sinica (Series A)，17(1984)，213。
- [2] 苏昉、C Lee and Taylor P C，物理学报，37(1988)，1053；Chinese Physics，9(1989)，929。
- [3] Caplan P J, et al., *J. Appl. Phys.*, 50(1979), 5847.
- [4] Henderson B, *Appl. Phys. Lett.*, 44(1984), 228.
- [5] Slichter C P, *Principles of Magnetic Resonance*. (2nd Edition), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1980, p182.
- [6] Charles P Poole, *Electron Spin Resonance*. (2nd Edition), John Wiley and Sons, Inc., 1983, p592.

# The Surface Effect of FZ Single Crystal Silicon Grown in Hydrogen Atmosphere on ESR

Su Fang

Jin Sizhao

(Center of Fundamental Physics)

(Laboratory of Structure Analysis)

## Abstract

It is determined in ESR experiments that the relation of the total number of electron spins to the average thickness of samples in FZ single crystal of silicon grown in hydrogen atmosphere is not a bulk effect, but a rather surface effect. Besides, it is discovered that its g-factor remains unchanged when the angle between the surface of the sample and the magnetic intensity  $H$ ,  $\theta$  changes from  $0^\circ$  to  $140^\circ$ , and its intensity of ESR signal varies symmetrically from strong to weak when  $\theta$  changes from  $0^\circ$  to  $\pm 90^\circ$ . Hence we infer that the quantity of dangling bonds in Si(H)/SiO<sub>2</sub> interface is very small. Finally it is observed that the intensity of ESR signal does not reach saturation with the increase of microwave power, no matter before or after the irradiation of infra-red light. This is because its spin-spin relaxation time is very short,  $T_2 = 1.4 \times 10^{-8}$  second.

**Key words:** FZ single crystal of silicon grown in hydrogen atmosphere, dangling bonds, spin-spin relaxation time.

# $\Sigma$ 树结构与更新最小生成树的并行算法\*

江 正

(北京计算机学院)

## 摘 要

更新最小生成树问题,即已知图的最小生成树,当图的某条边的赋值被改变,如何快速有效的求新出的最小生成树。本文引进了 $\Sigma$ -树结构,并以此获得了一个快速有效的更新最小生成树的并行算法,并行时间为 $O(\log n)$ ,处理器个数为 $O(n^{4/3})$ ,计算模型为 CREW-PRAM。其中 $n$ 为图的顶点个数,而且,进行预处理所需的时间也只需 $O(\log^2 n)$ ,处理器个数为 $O(n^2)$ ,存贮数据所需的空间为 $O(n^2)$ 。

关键词: 并行计算, PRAM 模型, 更新最小生成树,  $\Sigma$ 树

中图法分类号: TP301.6, O157.3

## 1 引言

给定一个图 $G$ ,已知其最小生成树,当图 $G$ 的某条边的赋值被改变,如何快速有效地求出新的最小生成树?这个问题,即边改变的更新最小生成树问题,已引起了相当的注意。1986年, S. Pawagi 和 I. V. Ramakrishnan<sup>[1]</sup>设计了这个问题的一个并行算法,使用 $O(n^2)$ 个处理器, $O(\log n)$ 时间,模型为 CREW-PRAM。最近作者在 CRCW-PRAM 模型上获得了此问题的一个 $O(n^2)$ 个处理器常数时间的算法<sup>[2]</sup>。可以看出,上述两个算法的处理器个数与并行时间的乘积均大于等于 $O(n^2)$ ,与目前已知最好的串行算法<sup>[3]</sup>的时间 $O(\sqrt{m})$ 相比( $m$ 为边数),还差一个 $O(n)$ 以上的因子。所以,上述两个算法与最优算法的要求还相差较远。如何设计一个更加有效的算法呢?本文引进了一个适当的数据结构,并在此结构上,给出了一个 $O(\log n)$ 时间、 $O(n^{4/3})$ 个处理器的并行算法。这一结构对解决另外一些问题也是相当有用的。

因篇幅所限,一些证明的细节略去。

## 2 定义与一些准备工作

本文使用的模型为 CREW-PRAM,它是由一系列处理器 $P_1, P_2, P_3, \dots$ 组成,每个处理器 $P_i$ 可进行加减乘除等基本操作,并能在共享存贮器的单元中读和写,每个 $P_i$ 还知

1988年4月23日收到。

\* 本工作获国家自然科学基金资助。

道自己的标号  $i$ ，多个处理器可以同时共享存储器同一单位中读但不允许写。

设图  $G = (V, E)$ ,  $V = \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $|V| = n$ ,  $|E| = m$ .  $c: E \rightarrow R$  是  $G$  的边赋值函数。  
 $[u-v]$  与  $[u \rightarrow v]$  分别表示连接  $u$  与  $v$  的无向与有向路径。

**定义 1** 设  $T$  是一棵树且某个顶点被指定为根，则称  $T$  为一棵根树。若  $T$  是一棵有向根树，且  $T$  的每个顶点都有一条指向根的有向路，则称  $T$  为一棵逆树，由若干逆树组成的有向森林称为逆森林。

设  $T = (V, E_r)$  是一棵逆树， $V = \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $r$  是根。我们要求出  $T$  的所有顶点到根的路径。

首先定义函数  $f: V \rightarrow V$  如下：

$$f(i) = \begin{cases} i, & \text{若 } i \text{ 是 } T \text{ 的根} \\ \text{顶点 } i \text{ 的父亲顶点,} & \text{若 } i \in V \text{ 但不是 } T \text{ 的根} \end{cases}$$

函数  $f^k: V \rightarrow V$  为：对所有顶点  $i \in V$ ,  $f^0(i) = i$ ; 对  $k > 0$ ,  $f^k(i) = f(f^{k-1}(i))$ 。

Tsin 和 Chin 在 [4] 中获得。

**引理 1** 给定一棵逆树  $T$  的函数  $f$ ，则对一切  $0 \leq k < n$ ,  $f^k$  能用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内计算。

对所有的  $f^k(i)$  ( $1 \leq i \leq n$ ,  $0 \leq k < n$ )，我们可以通过一个  $n \times n$  矩阵  $P$  来表示，使  $P[i, k] = f^k(i)$ 。  $P$  也称为  $T$  的路径矩阵。

进一步地，我们还可以获得比引理 1 更强的结果。

**引理 2** 设  $T = (V, E_r)$  是一棵逆树， $r$  是根， $v \in V$ ，已知函数  $f$ ，则可以用  $O(n)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内对一切  $0 \leq k < n$ ，计算出  $f^k(v)$ ，亦即求出从  $v$  到  $r$  的有向路径  $[v \rightarrow r]$ 。

**证明** 可用下列算法计算：

第一步 for 所有顶点  $i$  ( $1 \leq i \leq n$ )，处理器  $P_i$  do in parallel

$$f^0(i) := i, f^1(i) := f(i), g(i) := \infty;$$

第二步 for  $t = 0$  to  $\lceil \log n \rceil$  do

for 所有顶点  $i$  ( $1 \leq i \leq n$ )，处理器  $P_i$  do in parallel

$$f^{2^{t+1}}(i) := f^{2^t}(f^{2^t}(i));$$

(即对每个顶点  $i$ ，求出  $f^1(i)$ ,  $f^2(i)$ ,  $f^4(i)$ , ...,  $f^{2^{\lceil \log n \rceil}}(i)$ )

第三步 对顶点  $v$ ，令  $g(v) := 1$ ;

第四步 for  $t = \lceil \log n \rceil$  to  $0$ , do

for 所有满足  $g(i) \neq \infty$  的顶点  $i$ ，处理器  $P_i$  do in parallel

$$\text{if } g(f^{2^t}(i)) = \infty \text{ then } g(f^{2^t}(i)) := g(i) + 2^t;$$

第五步 将各顶点  $i$  按其  $g(i)$  的大小排序，然后删去  $g(i) = \infty$  的顶点，输出其余顶点序列，即为从  $v$  到根的路径  $[v \rightarrow r]$ 。

不难看出，整个算法可用  $O(n)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内完成。〈证毕〉

**定义 2** 设  $T = (V, E_r)$  是一棵逆树，在  $T$  上定义函数  $S: V \rightarrow N$ ，使得对任何  $v \in V$ ， $S(v)$  等于  $T$  中顶点  $v$  的所有子孙的数目。定义了这样一个函数的逆树  $T$  被称为一棵  $\Sigma$  树。函数  $S$  称为  $\Sigma$  树  $T$  的  $\Sigma$  函数。若干  $\Sigma$  树组成的逆森林称为  $\Sigma$  树林。

**引理 3** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵逆树,  $V = \{1, 2, \dots, n\}$ , 则  $T$  的  $\Sigma$  函数  $S$  可以用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内计算。

**证明** 略。

对一棵根为  $r$  的  $\Sigma$  树  $T = (V, E_T)$ , 简记为  $T(r)$ 。设  $r'$  为  $T(r)$  的顶点, 则可将  $T(r)$  变为以  $r'$  为根的  $\Sigma$  树  $T(r')$ , 此操作记为  $T(r) \Rightarrow T(r')$ 。

**引理 4** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵  $\Sigma$  树,  $|V| = n$ , 根为  $r$ 。  $r' \in V$ , 则操作  $T(r) \Rightarrow T(r')$  可用  $O(\log n)$  时间  $O(n)$  个处理器完成。

**证明** 由引理 2, 求  $[r' \rightarrow r]$  需  $O(n)$  个处理器  $O(\log n)$  时间。改变  $[r' \rightarrow r]$  上各边的方向, 获得  $[r \rightarrow r']$ , 对  $[r \rightarrow r']$  上各顶点  $v$ , 作赋值  $S(v) := S(r) - S(v_i)$ , 其中  $v_i$  为  $v$  的父亲且在  $[r \rightarrow r']$  上, 若如此顶点  $v_i$  不存在, 即  $v = r'$ , 则令  $S(r') := S(r)$ 。由此形成新的  $\Sigma$  函数  $S$ , 即获得  $T(r')$ 。〈证毕〉

**引理 5** 设  $T$  为一棵二元  $\Sigma$  树,  $\Sigma$  函数为  $S$ , 根为  $r$ , 则一定存在一个顶点  $v$  满足  $S(r)/3 \leq S(v) \leq 2S(r)/3$ 。

**证明** 从根  $r$  开始, 使用二元搜索的方法向叶搜索, 即可找出一个顶点  $v$  满足  $S(r)/3 \leq S(v) \leq 2S(r)/3$ 。详细证明略去。

**定义 3** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵  $\Sigma$  树,  $|V| = n$ ,  $F = \{T_1, T_2, \dots, T_k\}$  是由  $T$  中删去若干条边后形成的一个  $\Sigma$  森林,  $r_1, r_2, \dots, r_k$  分别为  $F$  中的各棵  $\Sigma$  树  $T_1, T_2, \dots, T_k$  的根 (故此  $T_i$  也记为  $T(r_i)$ )。若  $F$  中的每棵树的顶点个数, 即  $S(r_i)$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ) 均满足  $n^{1/3} \leq S(r_i) \leq 3n^{1/3}$ , 则称  $F$  为  $T$  的一个均分  $\Sigma$  森林。

**引理 6** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵二元  $\Sigma$  树, 根为  $r$  则其必有一个均分  $\Sigma$  森林  $F$ , 且可用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log^2 n)$  时间内求出  $F$ 。

**证明**  $v_i$  与  $v_j$  分别表示顶点  $v$  的儿子顶点与父亲顶点。用下列算法求  $T$  的均分  $\Sigma$  森林  $F$ ,

第一步 求出  $T$  的路径矩阵  $P$ , 令  $F := \{T(r)\}$ ;

第二步 2.1, 对  $F$  中的每棵树  $T(k)$ , 若  $S(k) > 3n^{1/3}$ , 则选择顶点  $v$ , 其满足  $S(k)/3 \leq S(v) \leq 2S(k)/3$ ;

2.2, 对  $T(k)$  中路径  $[v \rightarrow k]$  上的所有不为  $v$  的顶点  $u$ , 令  $S(u) := S(u) - S(v)$ ;

2.3, 从  $T(k)$  中删去边  $(v, v_i)$ , 于是  $F$  中的树  $T(k)$  就分成两棵新的  $\Sigma$  树  $T(k)$  与  $T(v)$  (新的  $T(k)$  是由原  $T(k)$  删去  $T(v)$  获得, 由于仍以  $k$  为根, 故仍以  $T(k)$  记之)。

2.4, 回到 2.1, 继续进行下一次循环。

由引理 1 知, 算法的第一步需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  个处理器。根据第一步的结果, 第二步中每一循环也仅需  $O(n^2)$  个处理器,  $O(\log n)$  时间, 至多  $O(\log n)$  次循环, 故整个算法的时间为  $O(\log^2 n)$ 。设  $T(k)$  是最终输出  $F$  中的一棵树, 由算法知, 只需  $S(k) > 3n^{1/3}$ ,  $T(k)$  必被继续划分, 故  $S(k) \leq 3n^{1/3}$ ; 设  $T(k)$  是由  $T(k')$  一次划分而得, 则有  $S(k') > 3n^{1/3}$  且  $S(k) \geq \frac{1}{3}S(k')$ , 所以,  $S(k) \geq n^{1/3}$  算法正确。〈证毕〉

**定义 4** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵逆树,  $|V| = n$ , 若  $T_d = (V_d, E_d)$  是一棵二元逆树且满足  $V \subseteq V_d$ ,  $|V_d| \leq 2n$ , 则称  $T_d$  是  $T$  的一棵扩展逆树。

**引理 7** 设  $T = (V, E_T)$  是一棵逆树,  $V = \{1, 2, \dots, n\}$ , 则可用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内构造出  $T$  的一棵扩展逆树  $T_d = (V_d, E_d)$ , 其中  $V_d = \{1, 2, \dots, n'\}$ ,  $n \leq n' \leq 2n$ .

**证明** 对  $v \in V$ , 用  $n$  处理器处理. 设  $v$  有  $d$  个儿子, 按其标号的大小排序为  $\{v_1, v_2, \dots, v_d\}$  (其中  $v_1 < v_2 < \dots < v_d$ ). 如图 1 所示, 构造一个以  $v$  为根,  $v_1, v_2, \dots, v_d$  为叶子的完全二元树重新连接  $v$  与其  $d$  个儿子.

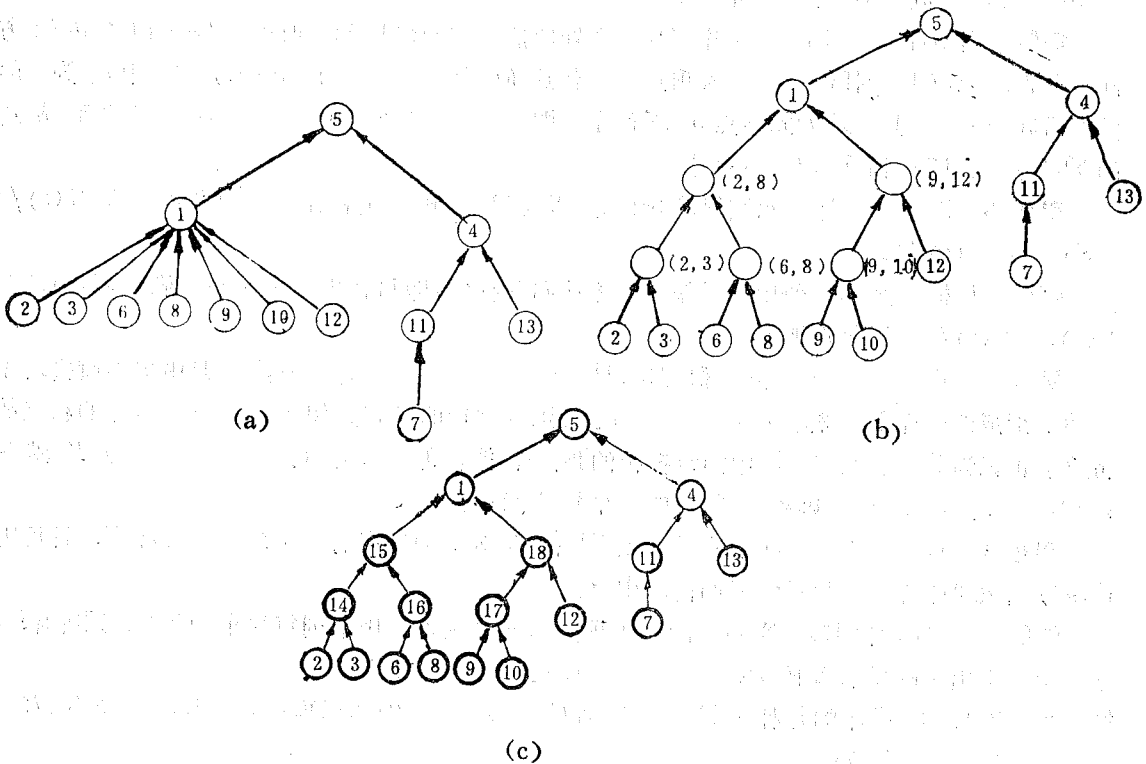


图 1

对新加入的顶点, 首先按图 1(b) 的方式进行标号, 对要寻求共同的父亲叶子  $v_i, v_{i+1}$  ( $v_i < v_{i+1}$ ), 将其父亲标号为  $(v_i, v_{i+1})$ ; 对标号为  $(u_1, u_2)$  与  $(u'_1, u'_2)$  ( $u_1 < u_2 < u'_1 < u'_2$ ) 的新顶点, 若其有共同父亲, 则标号为  $(u_1, u'_2)$ . 然后, 在所有顶点上定义函数  $h$ , 满足,  $h(i) = i$  ( $1 \leq i \leq n$ ),  $h((i, j)) = ni + j$ . 将所有顶点按其  $h$  值的大小从小到大排序, 若顶点  $v$  在此序列中的序号为  $j$ , 则给  $v$  以新的标号  $j$  (如图 1(c) 所示). 全体具有新标号的顶点集即构成  $T_d$  的顶点集  $V_d = \{1, 2, \dots, n'\}$ , 易知,  $n \leq n' \leq 2n$ . 对应的边集即为  $E_d$ . 上述过程只需  $O(n^2)$  个处理器  $O(\log n)$  时间. <证毕>

### 3 数据结构的建立及其基本操作

设图  $G = (V, E)$  是一个赋值无向图,  $V = \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $c: E \rightarrow R$  是  $G$  的边赋值函数. 可以使用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log^2 n)$  时间内求出  $G$  的最小生成树<sup>[5]</sup>, 并且使输出的最小生成树为逆树的形式<sup>[4]</sup>. 设  $T = (V, E_T)$  是  $G$  的最小生成树且为一棵逆树, 首先求出  $T$  的



扩展逆树  $T_d = (V_d, E_d)$ , 其中  $V_d = \{1, 2, \dots, n'\}$  ( $n \leq n' \leq 2n$ ). 再计算  $T_d$  的  $\Sigma$  函数  $S$ , 由此形式一棵  $\Sigma$  树, 然后求出  $T_d$  的一棵均分  $\Sigma$  森林  $F$ . 由引理 3, 引理 4 及引理 7 可知, 上述过程可用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log^2 n)$  时间内完成.

设  $F = \{T_1, T_2, \dots, T_k\}$ , 其中,  $T_j = (V'_j, E'_j)$  ( $1 \leq j \leq k$ ), 根为  $r_j$ . 类似逆树, 定义逆森林  $F$  上的函数  $f: V_d \rightarrow V_d$  如下:

$$f(v) = \begin{cases} v, & \text{若 } v \in V_d, \text{ 且为 } F \text{ 的某棵逆树的根} \\ \text{的父亲顶点,} & \text{若 } v \in V_d, \text{ 且不为 } F \text{ 的任何逆树的根.} \end{cases}$$

易知, 对  $F$  中的任何两顶点  $i$  与  $j$ , 它们在  $F$  中的同一  $\Sigma$  树中当且仅当  $f^n(i) = f^n(j)$ . 对于图  $G$  中的顶点集  $V$ , 根据其元素属于  $F$  中的不同  $\Sigma$  树, 可将  $V$  分成  $k$  个子集  $V_j = V \cap V'_j$  ( $1 \leq j \leq k$ ), 由此形成了  $V$  的一个划分  $\bar{V} = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$ . 对  $V$  中所有顶点, 按其  $f^n$  的值的大小排序, 即可获得  $V_j$  ( $1 \leq j \leq k$ ), 故我们有:

**引理 8**  $\bar{V}$  可用  $O(n)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内求出.

由于  $F$  是  $T_d = (V_d, E_d)$  的一个均分  $\Sigma$  森林且  $|V_d| \leq 2n$ , 所以我们有  $(n')^{1/3} \leq |V'_j| \leq 3(n')^{1/3}$  ( $1 \leq j \leq k$ ), 故  $k \leq (n')^{2/3} \leq (2n)^{2/3}$ , 由于  $V_j \subseteq V'_j$ , 亦有  $|V_j| \leq 3(2n)^{1/3}$  ( $1 \leq j \leq k$ ). 于是就将  $G$  中的顶点集分成了  $O(n^{2/3})$  个子集且每个子集中的元素不超过  $O(n^{1/3})$ .

**定义 4** 记  $k' = \lceil (2n)^{2/3} \rceil + 1$ .  $M$  是一个  $k' \times k'$  阶矩阵, 其中  $M[i, j]$  ( $1 \leq i, j \leq k, i \neq j$ ) 表示  $G$  中连接顶点集  $V_j$  与  $V_i$  的所有边中赋值最小的边.  $M$  的其它元素均为零.

**引理 9** 矩阵  $M$  可用  $O(n^2)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内获得.

**证明** 对  $G$  中所有边  $(u, v)$ , 按其对应的三元数组  $(f^n(u), f^n(v), c(u, v))$  的顺序排序. 于是连接  $V_j$  与  $V_i$  的  $G$  的所有边便处于上述已排好序的序列的若干连续的位置上, 此连续段最前面的边即为连接  $V_j$  与  $V_i$  的赋值最小的边  $M[i, j]$ . 最后将  $M$  的其余元素赋值为 0. 易知, 上述过程只需  $O(n^2)$  个处理器,  $O(\log n)$  时间. (证毕)

至此, 我们已求出了需保留的若干数据,  $G$  的最小生成树  $T = (V, E_T)$ ,  $T$  的扩展逆树  $T_d = (V_d, E_d)$ , 均分  $\Sigma$  森林  $F = \{T_1, T_2, \dots, T_k\}$ ,  $G$  的顶点划分  $\bar{V} = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$  以及矩阵  $M$ .

容易看到, 随着  $G$  的最小生成树  $T$  的每一次更新, 即在  $T$  中删去和增加一条边, 必引起  $T_d, F, \bar{V}$  以及  $M$  作相应的变化. 如何有效地维护这些数据结构呢? 从  $T_d$  的构改易知, 当  $T$  删去并增加一条边后, 为了保证  $T_d$  仍为新的  $T$  的扩展逆树,  $T_d$  必须删去并增加相应的边, 于是  $F$  中的某棵  $\Sigma$  树  $T_i$  便分成两棵树  $T_{i1}$  与  $T_{i2}$ , 或者  $F$  中的两棵树  $T_{i1}$  与  $T_{i2}$  连成一新的树  $T_i$ . 我们分别用  $\text{Seperate}(T_i) = \{T_{i1}, T_{i2}\}$  与  $\text{Hook}(T_{i1}, T_{i2}) = T_i$  表示这种分裂与合并, 并且要求输出  $T_{i1}, T_{i2}$  与  $T_i$  均为  $\Sigma$  树的形式且假定连接  $T_{i1}$  与  $T_{i2}$  的边是由  $T_{i1}$  中的顶点指向  $T_{i2}$  中的顶点. 当在  $F$  上作  $\text{Seperate}(T_i) = \{T_{i1}, T_{i2}\}$  以及  $\text{Hook}(T_{i1}, T_{i2}) = T_i$  操作时, 相应的  $G$  的顶点划分  $\bar{V}$  以及矩阵  $M$  都需作相应的变化. 我们有下列引理.

**引理 10** 设  $T_i$  是  $F$  中的一棵  $\Sigma$  树,  $V_i$  是与之对应的  $G$  的顶点子集. 从  $T_i$  中删去一条边, 则操作  $\text{Seperate}(T_i) = \{T_{i1}, T_{i2}\}$  以及求出与之对应的新的  $F, \bar{V}$ , 矩阵  $M$  均可用  $O(n^{4/3})$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内完成.

**证明** 设  $r_i$  为  $T_i$  的根, 边  $\langle a, b \rangle$  从  $T_i$  中删去且  $a, b$  分别为  $T_{i1}$  与  $T_{i2}$  中的顶点, 由引理 2, 可用  $O(n)$  个处理器, 在  $O(\log n)$  时间内求出  $T_i$  中的路径  $[b \rightarrow r_i]$ , 对  $[b \rightarrow r_i]$  上的所有

顶点  $v$ , 作赋值  $S(v) := S(v) - S(b)$ . 于是,  $T_{i_1}$  与  $T_{i_2}$  形成  $\Sigma$  树, 即完成  $\text{Separate}(T_i) = \{T_{i_1}, T_{i_2}\}$  操作. 对顶点  $a$ , 作新的赋值  $f(a) := a$ , 然后对  $V_i$  中所有顶点  $v$ , 按其  $f^n(n)$  的值排序, 即可将  $V_i$  分成  $V_{i_1}$  与  $V_{i_2}$ , 仍用  $T_i$  与  $V_i$  分别表示  $T_{i_1}$  与  $V_{i_1}$ , 并记  $V_{k+1} = V_{i_2}$ ,  $T_{k+1} = T_{i_2}$ . 于是  $M$  的第  $j$  与第  $k+1$  行与列都需作相应变化.

记  $G$  中所有连接  $V_i$  中与  $V_i$  外顶点的边组成的集合为  $EV_i$ . 对  $EV_i$  中所有边  $(u, v)$  (其中  $u \in V_i, v \in V_i$ ), 按其对应的二元数组  $(f^n(u), c(u, v))$  的顺序排序, 即可获得连接  $V_i$  与  $V_i$  的赋值最小边, 即  $M[i, j]$  与  $M[j, i]$ . 由于  $|V_i| \leq O(n^{1/3})$ , 所以  $|EV_i| \leq O(n^{4/3})$ , 故仅需  $O(n^{4/3})$  个处理器  $O(\log n)$  时间. 同理, 对  $V_{k+1}$  作处理可求出  $M[k+1, i]$  与  $M[i, k+1]$  ( $1 \leq i \leq k+1$ ). <证毕>

**引理 11** 设  $F = \{T_1, T_2, \dots, T_k\}$ ,  $T_i$  与  $T_i$  是  $F$  中的两棵树,  $V_i$  与  $V_i$  是与之对应的  $G$  的顶点子集. 当边  $(a, b)$  加入  $F$  时 ( $a, b$  分别为  $T_i$  与  $T_i$  的顶点), 操作  $\text{Hook}(T_i, T_i) = T_{\text{new}}$ , 求新的  $F, \bar{V}, M$  均可用  $O(n^{4/3})$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内完成.

**证明** 设  $r_i$  与  $r_i$  分别为  $T_i$  与  $T_i$  的根. 首先将  $T_i$  变为以  $a$  为根的  $\Sigma$  树, 再找出  $T_i$  中的路径  $[b \rightarrow r_i]$ , 对  $[b \rightarrow r_i]$  所有顶点  $v$ , 作赋值  $S(v) := S(v) + S(a)$ . 于是就构成了新的  $\Sigma$  树  $T_{\text{new}}$ , 仍以  $T_i$  记  $T_{\text{new}}$ , 则操作  $\text{Hook}(T_i, T_i)$  完成. 再将  $V_i$  与  $V_i$  合并仍以  $V_i$  记之. 由引理 2 及引理 4, 上述过程只需  $O(n)$  个处理器,  $O(\log n)$  时间.

以下更新  $M$  的第  $j$  行与第  $j$  列的值. 对  $EV_i$  中的所有边  $(u, v)$  (其中  $u \in V_i, v \in V_i$ ), 按其对应的二元数组  $(f^n(u), c(u, v))$  的顺序排序, 即可求出新的  $M[i, j]$  与  $M[j, i]$  ( $1 \leq i \leq k$ ). 因为  $|EV_i| = O(n^{4/3})$ , 所以排序需  $O(n^{4/3})$  个处理器  $O(\log n)$  时间.

由于  $T_i$  与  $V_i$  已分别从  $F$  与  $\bar{V}$  中消失, 我们要对  $F$  与  $\bar{V}$  中树及子集的标号进行整理使其仍为若干连续的正整数. 我们作下列操作

对任何  $l \geq i$ , 同时做  $T_l := T_{l+1}, V_l := V_{l+1}$ ;

对任何  $l \geq i$ , 及一切  $j$  ( $1 \leq j \leq k$ ), 做

$$M[l, j] := M[l+1, j], M[j, l] := M[j, l+1];$$

再令  $M[k, j] := M[j, k] := 0$  ( $1 \leq j \leq k$ )

于是形成了新的  $F = \{T_1, T_2, \dots, T_{k-1}\}$ , 新的  $\bar{V} = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$  以及新的矩阵  $M$ . 由于  $M$  的元素个数不超过  $O(n^{4/3})$ , 所以标号整理过程只需  $O(n^{4/3})$  个处理器常数时间. <证毕>

#### 4 最小生成树的更新算法

设  $G = (V, E)$ ,  $T = (V, E_T)$  是  $G$  的最小生成树. 当  $G$  的某条边  $e$  的赋值变后, 若  $e \in E_T$  且赋值减少或者  $e \notin E_T$  且赋值增大,  $G$  的最小生成树都不会改变. 只有下列两种情形  $G$  的最小生成树才会发生变化.

**情形 1**  $e = (i, j) \in E_T$  且  $c(e)$  减少.

此种情形只需找出  $T$  中连续顶点  $i$  与  $j$  的路径  $[i-j]$  上赋值最大的边  $e'$ . 若  $c(e') \leq c(e)$ , 则  $T$  仍不变; 若  $c(e') > c(e)$ , 则从  $T$  中删去  $e$ , 再加入有向边  $\langle v, j \rangle$  形成  $G$  的新的最小生成树. 由引理 2 可知, 可用  $O(n)$  个处理器  $O(\log n)$  时间求出边  $e'$ .

**情形 2**  $e = \langle i, j \rangle \in E_T$  且  $c(e)$  增大.

此种情形则比较困难。首先将  $e$  从  $T$  中删去, 于是将  $T$  分成了两棵不连通的子树  $T_i$  与  $T_u$ 。求出  $G$  中连接  $T_i$  与  $T_u$  顶点的所有边中赋值最小的边  $e' = \langle i', j' \rangle$ 。若  $c(e') \geq c(e)$ , 则  $T$  不变; 若  $c(e') < c(e)$ , 则从  $T$  中删去  $e$ , 再加入  $\langle i', j' \rangle$  形成  $G$  的新的最小生成树。由于  $T_i$  与  $T_u$  的边的数目可能达到  $O(n^2)$ , 故问题的关键在于如何利用我们已经建立起来的数据结构快速有效地求出赋值最小边  $e'$ 。我们用下列过程来实现。

- 第一步 令  $M' := M, \bar{v}' := \bar{v}$ ;
- 第二步 删去  $T_u$  中与  $\langle i, j \rangle$  相对应的边  $\langle i, j' \rangle$ ;
- 第三步 若  $f^n(i) = f^n(j')$ , 即  $\langle i, j' \rangle$  为  $F$  中某个树的边, 不妨设为  $T_i$  的边, 则并操作  $\text{Seperate}(T_i) = \{T_i, T_{i+1}\}$  并形成新的  $\bar{v}$  与  $M$ ;
- 第四步 求集合  $EM = \{(w, v) \mid (w, v) \text{ 是矩阵 } M \text{ 的元素且 } w, v \text{ 不同时在 } T_i \text{ 或 } T_u \text{ 中}\}$  中的最小赋值的边, 即  $G$  中连接  $T_i$  与  $T_u$  中顶点的赋值最小的边  $e'$ ;
- 第五步 令  $M := M', \bar{v} := \bar{v}'$ 。算法结束。

(注: 第一步与第五步是为了保持原来的  $\bar{v}$  与  $M$  不变, 以便能与情形 1 一致调用下面的维护过程)

以下分析上述算法的复杂性, 由引理 10, 第三步需  $O(n^{4/3})$  个处理器  $O(\log n)$  时间。由于矩阵  $M$  的元素个数为  $O(n^{4/3})$ , 所以  $|EM| = O(n^{4/3})$ 。判断各顶点  $w$  是否处于  $T_i$  或  $T_u$ , 只需  $O(n)$  个处理器  $O(\log n)$  时间, 所以第四步也只需  $O(n^{4/3})$  个处理器  $O(\log n)$  时间。由此可看出, 可在  $O(\log n)$  时间内用  $O(n^{4/3})$  个处理器求出  $G$  的新的最小生成树。

经过上述操作以后, 使保留的数据结构受到破坏。所以, 需进一步地处理以维护这些结构。

不妨设边  $e_1 = \langle i, j \rangle$  从  $T$  中删去, 边  $e_2 = \langle w, v \rangle$  加入  $T$  中, 由于从  $T$  中删去  $e_1$ , 从而将  $T$  分成了两棵不连通的树  $T_i$  与  $T_u$ , 不妨设  $i$  与  $w$  在  $T_i$  中。维护过程  $(e_1, e_2)$ :

#### 第一步 $T$ 的维护

在  $T$  中殊出有向路  $[w \rightarrow i]$ , 并将其各边改变方向, 新的  $T$  即为一棵逆树。由引理 2, 只需  $O(n)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内即可完成上述过程。

#### 第二步 $T_u$ 的维护

当  $\langle i, j \rangle$  从  $T$  中删去后,  $T_u$  中相应的边  $\langle i, j' \rangle$  也应从  $T_u$  中删去, 从而将  $T_u$  分成了两棵不连通的子树  $T_{u_1}$  与  $T_{u_2}$ , 不妨设  $i$  与  $w$  在  $T_{u_1}$  中。

2.1, 从  $T_u$  中删去边  $\langle i, j' \rangle$ ; 改变路径  $[w \rightarrow i]$  各边的方向。

2.2, 若  $j' > n$ , 则从  $T_u$  中删去顶点  $j'$  及与其相邻的边, 并加入边  $\langle j', j'_i \rangle$ 。

(注: 由  $T_u$  的性质知, 此时  $j'$  恰有一个儿子)

2.3, 对  $v$  在  $T$  中的所有儿子, 计算其在  $T_u$  中到  $v$  的路径长度 (至多  $\lceil \log n \rceil$ ), 选取其中一个路长小于  $\lceil \log n \rceil$  的顶点  $v'$ , 将  $\langle w, v'_i \rangle$  加入  $T_u$  中。若  $v'_i$  的入度为 3, 则删去边  $\langle w, v'_i \rangle$  与  $\langle v', v'_i \rangle$ , 再加入顶点  $n' + 1$ , 边  $\langle w, n' + 1 \rangle$ ,  $\langle v', n' + 1 \rangle$  与  $\langle n' + 1, v'_i \rangle$ 。

不难看出, 按上述方式形成的  $T_u$  仍为新的  $T$  扩展逆树。并且可用  $O(n)$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内完成上述各步。

#### 第三步 $F, \bar{v}$ 与 $M$ 的初步调整

3.1, 若 $\langle i, j' \rangle$ 是 $F$ 中树的边, 不妨设是 $T_i$ 的边, 则做操作  $\text{Seperate}(T_i) = \{T_{i_1}, T_{i_2}\}$  并按引理10中的方式将 $\bar{V}$ 与 $M$ 作相应变化。

3.2, 将 $\langle w, v'_i \rangle$ 加入 $F$ , 不妨设其连接 $F$ 中的两棵树 $T_{i_1}$ 与 $T_{i_2}$ , 则做操作  $\text{Hook}(T_{i_1}, T_{i_2}) = T_{i_2}$ , 并按引理11中的方式改变 $\bar{V}$ 与 $M$ 。

3.3, 作与 $T_i$ 相应的调整。若 $j' > n$ , 则删去顶点 $j'$ , 加入边 $\langle j'_i, j'_i \rangle$ , 并对 $[j'_i \rightarrow r_i]$ 上所有顶点 $v$ , 作赋值  $S(v) := S(v) - 1$ ; 若 $v'_i$ 的入度为3, 则删去边 $\langle v', v'_i \rangle$ 与 $\langle w, v'_i \rangle$ , 加入顶点 $n' + 1$ , 边 $\langle w, n' + 1 \rangle, \langle v', n' + 1 \rangle$ 与 $\langle n' + 1, v'_i \rangle$ 。作赋值  $S(n' + 1) := S(w) + S(v')$ 。并对 $[v'_i \rightarrow r_{i_2}]$ 上所有顶点 $v$ , 作赋值  $S(v) := -S(v) + 1$ 。

3.4, 将 $F$ 中各树的根作相应的变化。由于原 $T_i$ 中路径 $[w \rightarrow i]$ 被改变方向为 $[i \rightarrow w]$ 。在 $F$ 中, 若某棵树 $T(r_i)$ 的路径 $[v_i \rightarrow r_i]$ 是原 $T_i$ 中路径 $[w \rightarrow i]$ 的一部分, 则做操作  $T(r_i) \Rightarrow T(v_i)$ 。

由引理2、引理4、引理10及引理11可知, 上述各步可用 $O(n^{4/3})$ 个处理器在 $O(\log n)$ 时间内完成。

第四步 标号整理

经过二、三步后,  $T_i$ 与 $F$ 中的顶点标号已不在为若干连续的正整数。故将其顶点按标号排序并以其序号重新标号。从上述两步的过程中可以看出, 顶点 $i \in V$  (即 $i \leq n$ )的标号不会改变, 所以上述操作不会影响 $\bar{V}$ 与 $M$ 。

第五步:  $F, \bar{V}$ 及 $M$ 的进一步维护

经过上述各步以后, 此时的 $F$ 仍就可能不满足均分条件, 即对 $F$ 中的树 $T(r_i)$ ,  $n^{1/3} \leq S(r_i) \leq 3n^{1/3}$ 可能不成立。但是我们不难看出, 此时 $F$ 中顶点个数小于 $n^{1/3}$ 的树至多有两棵, 顶点个数大于 $3n^{1/3}$ 的树至多一棵且顶点个数不会超过 $6n^{1/3} + 1$ 。对于 $F$ 中的树 $T(r_i)$ , 若 $S(r_i) < n^{1/3}$ , 则找出 $T_i$ 中的边 $\langle r_i, j \rangle$ , 设 $j$ 是 $T(r_i)$ 中的顶点, 则作操作  $\text{Hook}(T(r_i), T(r_i)) = T(r_i)$ , 并按引理11的方式修改 $\bar{V}$ 与 $M$ 。至多进行两次这样的合并操作, 就可使得 $F$ 中不再有顶点个数小于 $n^{1/3}$ 的树。显然, 此时 $F$ 中顶点个数超过 $3n^{1/3}$ 的树也至多有三棵。设对 $T(r_i)$ 有 $S(r_i) > 3n^{1/3}$ , 找出 $T(r_i)$ 中的顶点 $v$ 其满足 $\frac{1}{3}S(r_i) \leq S(v) \leq \frac{2}{3}S(r_i)$ , 从

$T(r_i)$ 中删去边 $\langle v, v_i \rangle$ , 作分裂操作  $\text{Seperate}(T(r_i) = \{T(r_{i_1}), T(r_{i_2})\}$ , 并按引理10的方式修改 $\bar{V}$ 及 $M$ 。由于 $S(r_i) \leq 6n^{1/3} + 1$ , 所以有 $S(r_{i_1}) \leq 4n^{1/3} + 1$ ,  $S(r_{i_2}) \leq 4n^{1/3} + 1$ , 并且其中至少有一棵树已满足均分条件。假设仍有一棵树, 不妨设 $T(r_{i_1})$ , 不满足均分条件, 即 $3n^{1/3} \leq S(r_{i_1}) \leq 4n^{1/3} + 1$ , 则按上述同样方式对 $T(r_{i_1})$ 进行一次分裂, 必可获得两棵都满足均分条件的树。所以, 对 $F$ 中顶点大于 $n^{1/3}$ 的树 (至多三棵), 至多进行六次上述分裂即可使得所有树均满足均分条件。由引理10及引理11, 每次合并与分裂, 需 $O(n^{4/3})$ 个处理器、 $O(\log n)$ 时间, 第五步中至多进行八次这样的合并与分裂, 所以也只需 $O(n^{4/3})$ 个处理器 $O(\log n)$ 时间。

至此整个维护过程结束。

不难看出, 整个维护过程可使用  $O(n^{4/3})$  个处理器在  $O(\log n)$  时间内完成。所以我们有以下结论:

**主要定理** 对边改变的更新最小生成树问题, 在一个 CREW-PRAM 模型上, 存在一个  $O(\log n)$  时间,  $O(n^{4/3})$  个处理器的并行更新算法。而且进行预处理的时间为  $O(\log^2 n)$ , 处理器个数为  $O(n^2)$ 。存储数据所耗费的存储空间亦为  $O(n^2)$ 。

作者感谢陶懋颀教授与徐美瑞教授在本文写作过程中所给予的多方面的帮助与鼓励。

### 参 考 文 献

- [1] Pawagi S, Ramakrishnan I V, An  $O(\log n)$  Algorithm for Parallel update of Minimum Spanning Trees, IPL, 1986, p223—229.
- [2] 江正, 一个快速更新最小生成树的并行算法, 中国软件行业协会青年协会会议录 1986, 北京, p1—9.
- [3] Frederickson G, Data Structure for On-line Updating of Minimum Spanning Trees, Proc. 15th STOC (1983), p252—257.
- [4] Tsin Y, Chin F, Efficient Parallel Algorithms for a Class of Graph Theoretic Problems, SIAM *J. Comput.*, 14 (1984), 580—599.
- [5] Savage C, I<sub>a</sub> J<sub>a</sub>, J, Fast Efficient Parallel Algorithms for Some Graph Problems, SIAM, *J. Comput.*, 10(1981), 682—690.

# Sum-tree Structure and Parallel Algorithm for Updating Minimum Spanning Tree

Jiang Zheng

(Beijing Computer Institute)

## Abstract

Data structure ( $\Sigma$ -tree structure) is presented for solving the problem of maintaining a minimum spanning tree on-line under the operation of updating the cost of some edge in the graph. In the CREW-PRAM model maintaining the data structure and updating the tree can be completed in  $O(\log n)$  time by using  $O(n^{4/3})$  processors, where  $n$  is the number of vertices in the graph. Our structure requires  $O(n^2)$  space and  $O(\log^2 n)$  preprocessing time and  $O(n^2)$  processors. In addition, our structure  $\Sigma$ -tree is also useful for some other problems.

**Key words:** parallel computation, PRAM model updating, minimum spanning trees,  $\Sigma$ -tree.

# 有机表面活性剂 DPE-III 和 KR-7 对锌 电沉积作用机理的研究

倪光明 吴华强 严怡芹

(安徽师范大学)

## 摘 要

有机表面活性剂对镀锌时电沉积作用的机理有不同解释。本文研究表明：DPE-III、KR-7 在旋转圆盘电极(RDE)表面吸附电位范围内,均为非电化学活性物质; DPE-III、KR-7 对锌电沉积作用受它自身从溶液本体向电极表面的扩散步骤所控制,符合扩散控制阻化机理。

**关键词:** 有机表面活性剂, 电沉积, 作用机理。

**中图法分类号:** O646.54

## 1 引 言

在文献[1、2]中曾指出:目前锌酸盐镀锌用有机表面活性剂主要的有:DE、DPE-III ZB-80 和 KR-7 等,若从它们在电极上的吸附行为和对镀液极化性能的影响考虑,则选用 DPE-III 和 KR-7 作为镀锌用添加剂较为合适。本工作进一步研究 DPE-III 和 KR-7 对锌电沉积的作用机理。

关于有机添加剂对金属电沉积的作用机理,有两种理论:一为 Kardos 理论<sup>[3]</sup>,另一为电化学还原理论<sup>[4]</sup>。前一种理论包含三个假设,即(1)在整个基体表面上,金属电沉积过程是受电化学步骤控制;(2)添加剂能在电极上吸附,并对电沉积过程起阻化作用;(3)在电沉积过程中,吸附在表面上的添加剂分子是不断消耗的,添加剂在电极上的吸附过程受它本身自溶液本体向电极表面的扩散步骤所控制。而后一种理论则认为:若电沉积时镀件表面各处的电流密度不同,则在电流密度较高的区域内,添加剂分子的电还原会引起金属电沉积的电流效率降低,结果是使镀件表面各处金属电沉积速度趋于一致,有利于镀层表面平整,光亮。我们所研究的 DPE-III、KR-7 对锌电沉积的作用是符合 Kardos 理论的。

## 2 实验部分

### 2.1 主要仪器与试剂

1989年6月6日收到。

仪器是 HDV-7 恒电位仪 (福建三明无线电二厂), DCD-1B 信号发生器 (福建三明无线电二厂), DD-1 型电镀参数测试仪 (沈阳无线电八厂), ATA-1A 型旋转圆盘电极 (RDE, 江苏电分析仪器厂)。

试剂使用 NaOH(A.R), ZnO (A.R), DPE-III (武汉长江化工厂生产), KR-7 (开封电镀化工厂生产)。

## 2.2 实验方法

所有试液均用二次蒸馏水配制。装入三电极电解池进行测试,在测试前,通高纯氮除氧。研究电极在测试前进行净化处理。温度为 15℃。

### 微分电容曲线

研究电极为旋转圆盘电极 (RDE), 参比电极为饱和甘汞电极 (SCE), 辅助电极为 Pt 片。仪器使用 DD-1 型电镀参数测试仪, 配备 LZ-204 型记录仪, 利用恒电位方波慢扫描法, 扫速为 1mV/s, 记录微分电容曲线, 再绘制成图 1, 图 2 所示微分电容曲线。

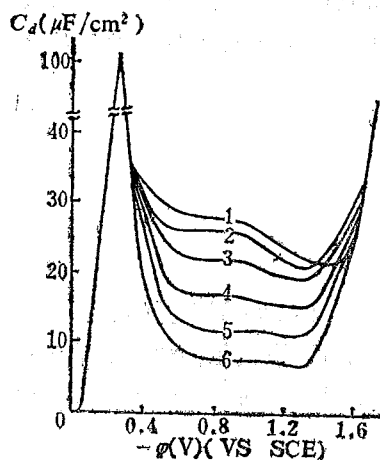


图 1 DPE-III 在 RDE 上的微分电容曲线  
 1 底液 (120g/l NaOH) 400~2000r/min,  
 2 底液 + 0.1ml/IDPE-III (下同), 400r/min  
 3 800r/min, 4 1000r/min  
 5 1500r/min, 6 2000r/min

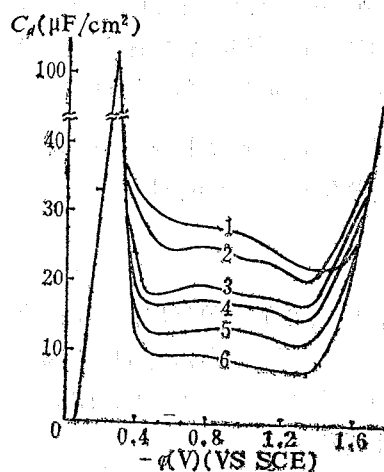


图 2 KR-7 在 RDE 上的微分电容曲线  
 1 底液, 400~2000, r/min  
 2 底液 + 0.1ml/IKR-7 (下同), 400r/min  
 3 800r/min, 4 1000r/min  
 5 1500r/min, 6 2000r/min

### 阴极极化曲线

研究电极, 参比电极和辅助电极均同前。仪器使用 HDV-7 恒电位仪, 配备 DCD-1B 函



数发生器,  $x-y$  函数记录仪, 用动电位扫描法, 扫速为  $1.5\text{mV/s}$ , 记录阴极极化曲线, 再绘制成图 3, 图 4 所示阴极极化曲线。

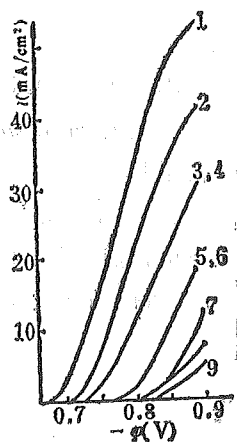


图 3 DPE-III 型阴极极化曲线

- 1 底液 ( $120\text{g/l NaOH} + 11\text{g/l ZnO}$ )  
400, 700, 900, 1000r/min
- 2 DPE-III (下同),  $0.05\text{ml/l}$ , 400r/min
- 3  $0.05\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 4  $0.1\text{ml/l}$ , 400r/min
- 5  $0.1\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 6  $0.15\text{ml/l}$ , 400r/min
- 7  $0.25\text{ml/l}$ , 400r/min
- 8  $0.15\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 9  $0.25\text{ml/l}$ , 1000r/min

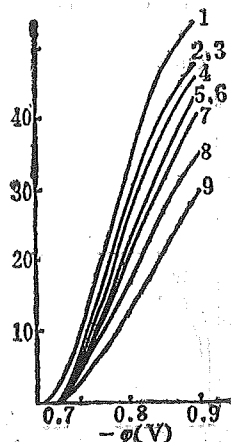


图 4 KR-7 型阴极极化曲线

- 1 底液, 同图 3  
400, 700, 900, 1000r/min
- 2  $0.05\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 3  $0.1\text{ml/l}$ , 400r/min
- 4  $0.15\text{ml/l}$ , 400r/min
- 5  $0.1\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 6  $0.20\text{ml/l}$ , 400r/min
- 7  $0.25\text{ml/l}$ , 400r/min
- 8  $0.15\text{ml/l}$ , 1000r/min
- 9  $0.25\text{ml/l}$ , 1000r/min

### 恒电位阴极电流密度与 RDE 转速的关系曲线

电极和配备的仪器均同前, 方法是先用动电位扫描法 (扫速  $1.5\text{mV/s}$ ) 测得 RDE 在不

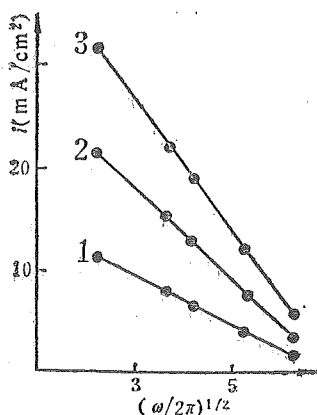


图 5 DPE-III 型阴极电流密度与 RDE 转速的关系

底液 ( $120\text{g/l NaOH} + 11\text{g/l ZnO}$ )

+ DPE-III ( $0.1\text{ml/l}$ )

- 1  $0.80\text{V (SCE)}$     2  $0.85\text{V (SCE)}$
- 3  $0.90\text{V (SCE)}$

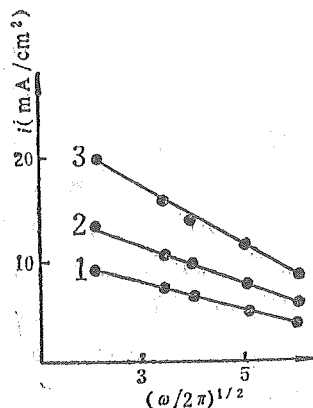


图 6 KR-7 型阴极电流密度与 RDE 转速的关系

底液 + KR-7 ( $0.1\text{ml/l}$ )

- 1  $0.80\text{V (SCE)}$     2  $0.85\text{V (SCE)}$
- 3  $0.90\text{V (SCE)}$

同转速下的阴极极化曲线,从阴极极化曲线上确定某电位下相应的阴极电流密度*i*,再作*i*~√ $\omega/2\pi$ 关系图5,图6.

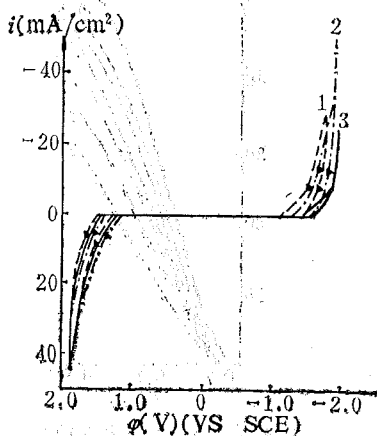


图7 添加剂在120g/l NaOH溶液中的循环伏安曲线  
1 底液(120g/l NaOH) 2 底液+DPE-Ⅲ(0.4ml/l)  
3 底液+KR-7(0.2ml/l)

### 循环伏安曲线

研究电极为Pt片( $A=0.1256\text{cm}^2$ )  
参比电极为SCE,辅助电极为Pt片  
( $A=2\text{cm}^2$ );使用HDV-7恒电位仪,  
配备DCD-1B函数发生器和LZ-204记  
录仪,用三角波电位扫描法(扫速30mV/s)  
记录第一次循环,所得循环伏安曲线如图  
7所示.

## 3 结果与讨论

### 3.1 转速与微分电容的关系

图1,图2分别为DPE-Ⅲ、KR-7在  
RDE上的微分电容曲线.由图可见:  
(1) DPE-Ⅲ、KR-7均能在RDE上发

生吸附,吸附电位范围:DPE-Ⅲ约在-0.5~-1.4V;KR-7约在-0.4~-1.4V,  
(2)在一定的电位下,随着RED转速的增加,电容量减少.这表明有机添加剂在RDE  
表面上的吸附量随着其转速的加大而增加,这是因为转速加大扩散层厚度 $\delta$ 减少所致, $\delta$   
 $=1.61 D^{1/3} \nu^{1/6} \omega^{-1/2}$ (见[5]),式中 $\omega=2\pi f$ , $f$ 为转速(r/s).

### 3.2 转速与极化的关系

从图3,图4可看出:当未加添加剂时,用四种不同转速测得的阴极极化曲线完全相同,  
表明锌的电沉积反应的控制步骤是电化学步骤,其反应过程: $\text{Zn}(\text{OH})_4^{2-} \xrightarrow{\text{前置转化}} 2\text{OH}^- +$   
 $\text{Zn}(\text{OH})_2 + 2e \xrightarrow{\text{电化学}} \text{Zn} \downarrow + 2\text{OH}^-$ .比较图3中曲线2与3,4与5,6与8和7与9,  
可见在DPE-Ⅲ浓度相同时,转速增加,锌的电沉积的极化增加,反应电流密度减少,这  
是因为转速加快,吸附量增加,故阴极过电位提高.分析图4,可得同样结论.

### 3.3 阴极电流密度与转速关系.

图5,图6分别为120g/l NaOH+11g/l ZnO溶液中含DPE-Ⅲ(0.1ml/l),KR-7  
(0.1ml/l)时在不同恒电位下极积电流密度与转速的关系曲线.由图可见:阴极电流密度与转  
速的平方根成反比,随着转速增加,阴极电流密度下降.表明:添加剂的阻化作用是与它的扩  
散速度成正比的,添加剂的吸附过程是受它本身从溶液本体向RDE表面的扩散步骤所控制.

### 3.4 循环伏安图

为了证实DPE-Ⅲ和KR-7在锌电沉积过程中起整平、光亮作用,是由于吸附极化引起的  
的,还是由于吸附电还原引起的.本工作做了DPE-Ⅲ和KR-7在120g/l NaOH溶液中在  
铂电极上的循环伏安曲线,如图7所示.从图中可见在电位0~-1.5V范围内未发现还原  
反应.

#### 4 结论

分析结果可得出如下结论:

- (1) DPE-Ⅲ和 KR-7 在 RDE 表面上的吸附电位范围内均为非电化学活性物质;
- (2) DPE-Ⅲ和 KR-7 在 RDE 上能被吸附并对锌电沉积过程起阻化作用;
- (3) 锌的电沉积反应受电化学步骤控制;
- (4) DPE-Ⅲ和 KR-7 在 RDE 表面上的吸附过程受它本身从溶液本体向电极表面的扩散步骤所控制。

总之, DPE-Ⅲ, KR-7 对锌电沉积的作用机理完全符合 Kardos 理论。它们对锌镀层能起平整、光亮作用。

#### 参 考 文 献

- [1] 倪光明、严怡芹、吴华强, 安徽师大学报(自然版), 12(1989), No.1, 41
- [2] 倪光明、吴华强, 安徽师大学报(自然版), 11(1988), No.2, 21.
- [3] Kardos O and Foulke D G, *Tech. Proc. Am. Electro-Plater's Soc.*, 43 (1956), 181.
- [4] 周绍明等, 重庆电镀, 1980, 总 18 期, 1.
- [5] 刘永辉, 电化学测试技术, 北京航空学院出版社, 北京, 1987, 50.

### Study of Organic Sufactants DPE—III and KR—7 on the Action Mechanism of Electrdeposition of Zinc

Ni Guangming    Wu Huaqiang    Yan Yiqin  
(Anhui Normal University)

There are different explanations about the action mechanism or organic surfactants on the electrodeposition of zinc. The result of our work indicated that organic sufactants DPE—Ⅲ and KR—7 in the range of adsorption potential on the rotating-disc electrode (RDE) surface are not electrochemistry-active substances. Both DPE—Ⅲ and KR—7 on the electrodeposition of zinc are controlled by diffusion steps from the solution to the electrode surface. This process fits in with the diffusion control maintaining mechanism.

**Key words:** organic surfactant, electrodeposition, action mechanism

# 一种新型光纤温度传感器

徐育 金泰义 章海鹰

(精密机械与仪器系)

## 摘 要

本文提出一种新型的光纤温度传感器,利用光纤微弯产生光强损耗的原理,测温范围为 $0^{\circ}\text{C}\sim 200^{\circ}\text{C}$ ,在 $20^{\circ}\text{C}\sim 95^{\circ}\text{C}$ 时的测量相对精度可达 $\pm 1\%$ 。这种温度传感器可以发展成为测温范围更宽,并同时进行了远距离多点检测的系统。

**关键词:** 光纤温度传感器, 光纤微弯, 光电检测。

**中图法分类号:** TN247, TN256

## 1 引言

光纤温度传感器的研究,在近十几年里一直受到人们的重视,并且已发表了很多这方面的研究论文,从各种不同的机理出发研制了不同特点和测量范围的光纤温度传感器<sup>[1~3]</sup>。本文提出一种新型的光纤温度传感器。其特点是:原理简单、容易实现、成本低廉、具有较宽的温度测量范围。我们在实验中所作的传感器测量范围为: $0^{\circ}\text{C}\sim 200^{\circ}\text{C}$ , $20^{\circ}\text{C}\sim 95^{\circ}\text{C}$ 时的测量相对精度可达 $\pm 1\%$ 。

## 2 传感器工作原理

一根对称的、均匀的多模光纤,如果受外界影响,比如压力、温度等变化,使得光纤在垂直于轴线方向上的空间状态改变,就会导致光纤中模式间产生耦合,这样光纤芯中传播的一部分导入模耦合进入包层而损耗掉,芯径中传播的光能量减少。我们所提出的光纤温度传感器正是基于这个原理。

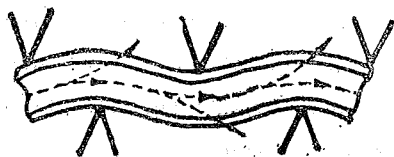


图 1

光纤由于外界力的作用产生许多沿轴的周期性的微小弯曲,如图1所示。这种情况下芯径中的能量损耗,已有文章做过细致的讨论<sup>[4]</sup>。

用 $h_{\mu\nu}$ 表示 $\mu$ 阶模和 $\nu$ 阶模之间的能量耦合系数,可以写为

$$h_{\mu\nu} = h_{\nu\mu} = |K_{\mu\nu}|^2 F(\delta\beta_{\mu\nu})$$

这里  $\delta\beta_{\mu\nu} = \beta_{\mu} - \beta_{\nu}$  是两个模的轴向传播常数之差。  $K_{\mu\nu}$  是一个与微弯量和导入模横向分量有关的量，决定着两个模之间能否产生耦合，  $F(\delta\beta_{\mu\nu})$  是微弯变形函数关系的付氏变换。如果光纤变形中含有空间频率  $\delta\beta_{\mu\nu}$ ，则  $\mu$  阶模和  $\nu$  阶模之间就可以产生能量耦合。对于多模光纤，变形的空间波长在  $0.15\text{cm} \sim 10\text{cm}$  范围内，就可以产生邻近模式之间的耦合，变形的空间波长越小，能发生耦合的模式相邻得越近。

### 3 实验与结果分析

实验装置如图 2 所示。

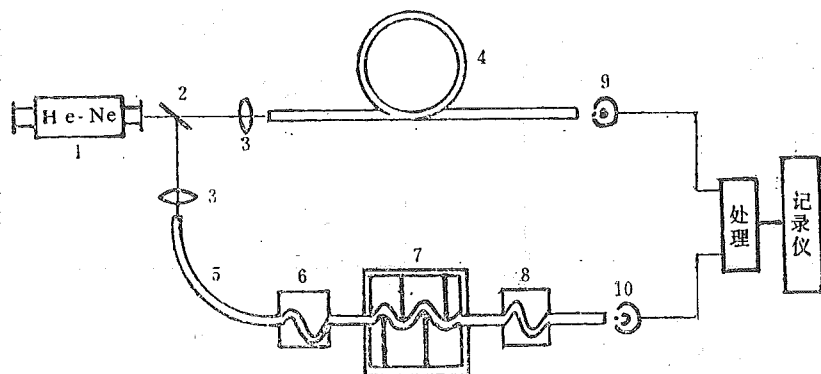


图 2 实验装置

- |         |         |          |          |
|---------|---------|----------|----------|
| 1 激光器   | 2 半透半反镜 | 3 耦合透镜   | 4 参考臂光纤  |
| 5 测量臂光纤 | 6,8 消模器 | 7 温度敏感部分 | 9,10 光电池 |

用两组齿距相同的齿条相啮合，组成了温度敏感部分，光导纤维穿过相啮合的两组齿条的间隙。

当被测的对象温度上升或下降，传感器中的温度敏感部分随之升温或降温，由于物体的热胀冷缩，有机玻璃做成齿条也一定会伸长或缩短，这就使得夹在两组齿条间的光纤的微弯状态变化。由前面所述的原理可知，这时光纤中传播的光的各阶模之间的耦合情况就会发生改变，最终反映在光电池上所接受到的光强度变化。在传感器中加一参考光纤光路的目的是有两个：一是为了消除部分外界干扰，二是和测量光路相减以去掉很强的背景光信号，突出随温度变化的信号。

实验中使用的光纤芯径  $a = 10\mu\text{m}$ ，有机玻璃齿条长  $l = 45\text{mm}$ ，齿距  $d = 4\text{mm}$ 。

图 3 是用记录仪记下的光纤温度传感器的输出光强随温度变化的曲线。从实验所得的温度变化曲线中，测出曲线在局部的上下波动幅度为曲线上升高度的 2%，因此我们认为，这种光纤温度传感器在  $20^\circ\text{C} \sim 95^\circ\text{C}$  范围内的相对精度达到  $\pm 1\%$ 。

实验是在温度缓变场中进行的，所以我们在分析时剔除了那些局部波动较大，显然不是温度变化引起的波动。这些误差，将在下面进一步讨论。

图 4 上曲线是光纤温度传感器得到的，下曲线是由用作对比用的一热电偶测得的。从图中可以看出两曲线是完全一致的。

光纤温度传感器系统的调制系数：

$$Q = \frac{dB}{dx} \cdot \frac{dx}{dT}$$

$B$ —光纤的传输系数,  $x$ —齿的长度,  $T$ —温度。

若要提高系统的灵敏度, 就必须使系统的调制系数尽量大, 而调制系数决定于两个参数, 一是由光纤性能所确定的  $dB/dx$ , 二是  $dx/dT$  由齿的材料本身决定的。我们在实验中选

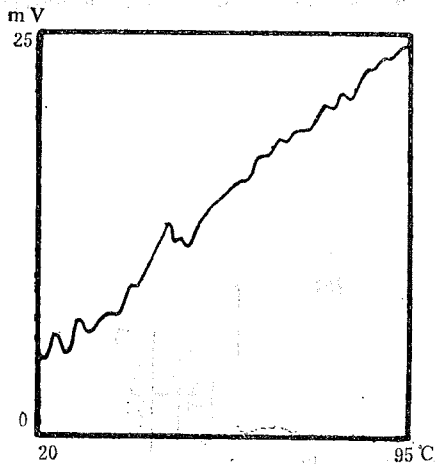


图 3

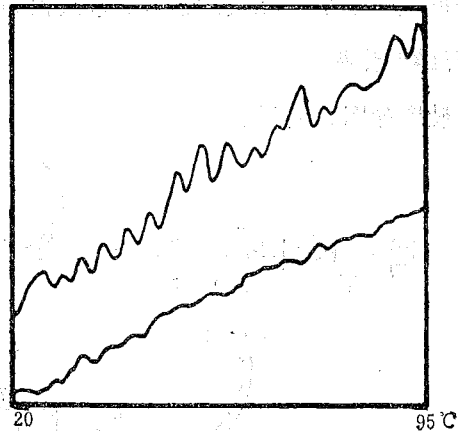


图 4

用有机玻璃的目的就是在于提高  $dx/dT$ , 有机玻璃在  $0^{\circ}\text{C}\sim 200^{\circ}\text{C}$  的范围, 热线胀系数为  $7 \times 10^{-5}$ 。

显而易见, 换用不同材料的齿, 就可以做成不同测温范围的传感器, 如金属齿用做高温测量。

由于有机玻璃材料受热后膨胀需要时间较长, 这就决定了这种光纤温度传感器不能用于快速变化的温度测量。经实验测定响应时间  $> 10$  秒。

从实验结果中可以看出这种光纤温度传感器的主要误差来自于以下几种因素:

(1) 激光器的不稳定输出, 实验中使用的  $2\text{mW}$  非稳频非偏振激光器, 经测定输出光转变为电信号后的波动为  $1.5\text{mV}$ , 虽然我们在光路上和电路上均采取了措施, 但并未做到完全消除。

(2) 齿材料热线胀系数在不同温度时的微小变化。

(3) 环境影响, 从光路上看, 这是个非共路系统。因此, 环境的影响 (如: 振动、杂光干扰) 是不可能完全消除的。

(4) 实验中所使用的多模光纤本身存在的模间噪声, 光电池及电子元件的噪声影响。

从上面的误差分析, 不难得出进一步提高该光纤温度传感器精度的途径。

#### 4 总结

本文讨论了一种新型的光纤温度传感器, 其结构简单, 精度较高。可以做到在远离测量现场的地方进行探测, 并发展为不同测温范围多点同时检测的系统。

## 参 考 文 献

- [1] Johnson C C, *et al*, *Microwave J.*, **18** (1975), p.55—57.
- [2] Dakin J P, *Optisc and Quantum Electron*, **9**(1977), p.540—544.
- [3] Kazuo Kyuma, *et al*, *IEEE J. Quantum Electronics*, **18** (1982), p.676.
- [4] Fields J N, *et al*, *J. Acoust. Soc. Am.*, **67**(1980), p.816—818.

# A NeW Type of Optic-Fiber Temperature Sensor

Xu Yu      Jin Taiyi      Zhang Haiyin

*(Department of Precision Machinery and Instrumentation)*

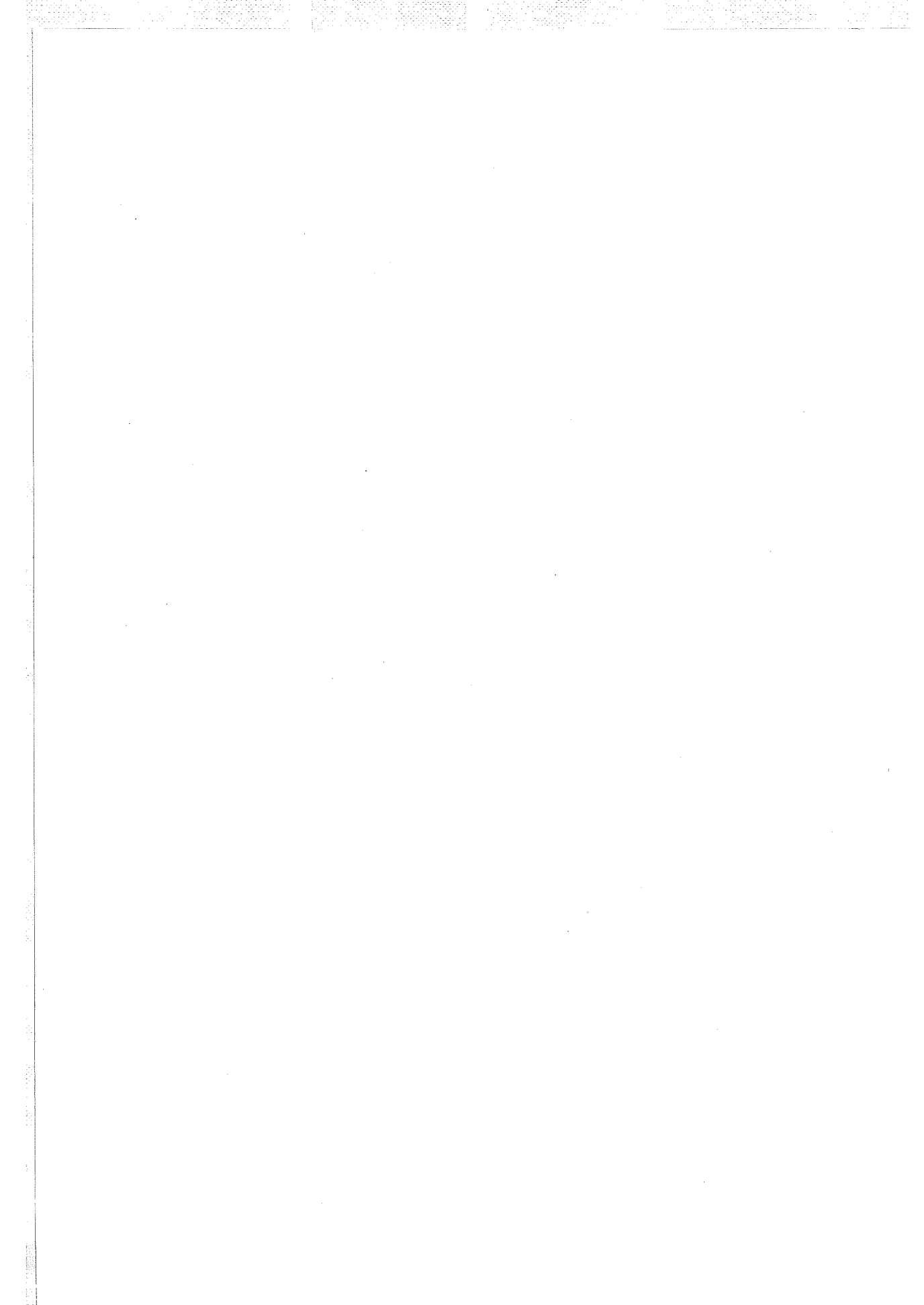
### Abstract

We propose a new type of optic-fiber temperature sensor by the principle that temperature-induced microbending produces excess attenuation in the fiber. The sensor's measuring range is 0°C~200°C. In the range of 20°C~95°C, its relative accuracy reaches  $\pm 1\%$ .

**Key words:** optic-fiber temperature sensor, microbending, photoelectric measurement







# 中国科学技术大学学报编委会

主 编: 龚 昇

副 主 编: (按姓氏笔划排序)

冯克勤 伍小平 刘耀阳

汪克林 张懋森 钱景仁

杨延龄

责任编辑: 杨延龄 袁克林

英文编辑: 王 琳

## 中 国 科 学 技 术 大 学 学 报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(季刊)

(Quarterly)

第 20 卷 第 2 期 (总第 68 期)

Vol.20 No.2 1990

编辑出版: 《中国科学技术大学学报》编辑部  
(安徽省合肥市金寨路96号)

印 刷: 中国科学技术大学印刷厂

国内总发行: 合 肥 市 邮 局

订 购 处: 全 国 各 地 邮 局

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司

(中国国际书店,北京399信箱)

Edited and Published by,

The Editorial Board of

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

96 Jinzhai Road of

Hefei, Anhui, China 230026

Distributed by:

China International Bookstore

P.O. Box 399

Beijing, China

国内统一刊号: CN34—1054

邮政代号: 26—31

1990年6月出版

邮 政 编 码: 230026

国外代号: Q527

ISSN 0253-2778

# 中国科学技术大学学报

第20卷

第3期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20

No.3

3

1990



# 中国科学技术大学学报

第 20 卷 第 3 期 (总第 69 期)

## 目 录

- 任意阶调和算子的离散谱估计····· 陈祖埤 钱椿林 (259)
- 主手征场方程的对称及其构成的李代数····· 张友金 (267)
- 自动限温加热带电—热性能的研究····· 苏洪钉等 (274)
- $O(^3p)$  原子和丙稀醇化学反应动力学研究····· 陈从香等 (279)
- La-Ca-O 催化剂的结构和形貌····· 陈 勇 林培琰 俞寿明 (285)
- 带电粒子在电磁波驻波中的随机运动····· 汪秉宏 (291)
- 冲击下  $c$  轴硫化镉单晶的相变特性····· 唐志平 Y.M. Gupta (298)
- 省长途传输设备监控系统的研究····· 沈兰荪 李志群 (307)
- 萃取浮选光度法测定 Sr-Bi-Ca-Cu-O 超导薄膜中的铋····· 朱玉瑞 袁惠敏 金 谷 (315)
- 受浮力影响的湍流模型····· 范维澄 张 辉 郑丽丽 (321)
- 添加剂和杂质对四方相  $CeO_2-ZrO_2$  基陶瓷显微结构及性能的影响  
····· 刘杏芹 中田孝夫 (328)
- 表面边界模型智能生成的研究····· 郭 立 (336)
- 微机控制功能性电刺激实验系统····· 周炳和等 (343)

## 研 究 简 报

- 非定常激波在多重矩形障碍物中传播的数值模拟····· 王如云 刘儒勋 (349)
- 可数生成代数上的 Hilbert 零点定理····· 王 岚 肖才群 (356)
- 压缩相干态的振幅平方压缩····· 夏云杰 郭光灿 (361)
- 复变量 Spence 函数的数值计算····· 叶竞波等 (366)
- KT-5C 装置工程和实验参数····· 闻一之等 (370)
- 非接触精密角位移测量的研究····· 孙葆根 沈兰荪 陈岭丽 (374)
- Apple II 微机控制的核探测系统····· 霍剑青 梁伟圣 (380)

# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 20 No.3 (Sum No.69)

## CONTENTS

- Estimates for Discrete Spectrum of Laplacian Operator With Any Order  
.....Chen Zuchi, Qian Chunlin (259)
- Symmetries and the Related Lie Algebraic Astructure of the Principal  
Chiral Field Equation.....Zhang Youjin (267)
- On the Electrothermic Behaviour of Self-Temperature-Limiting Heating  
Strip .....Su Hongyu *et al.* (274)
- The Kinetics Study on Reaction of  $O(^3p)$  With Allyl Alcohol  
.....Chen Congxiang *et al.* (279)
- Structure and Morphology of La-Cu-O Catalysts  
.....Chen Yong, Lin Peiyan, Yu Shoumin (285)
- Stochastic Motion of Charged Particles in Electro-magnetic Standing  
Waves..... Wang Binghong (291)
- Phase Transition Behavior of *c*-Axis Cadmium Sulfide Single Crystal  
Under Shock Loading.....Tang Zhiping, Y.M.Gupta (298)
- Provincial Long Distance Transmission Equipment Surveillance System  
in China ..... Shen Lansun, Li Zhiqun (307)
- Extraction Flotation Spectrophotometric Determination of Bismuth in Bi-  
Sr-Ca-Cu-O Superconducting Film Zhu Yurui, Yuan Huimin, Jin Gu (315)
- On Buoyancy-Influenced Turbulence Models  
..... Fan Weicheng, Zhang Hui, Zeng Lili (321)
- Influences of Dopant and Impurity Upon the Micro-structure and  
Mechanical Properties of  $CeO_2$ - $ZrO_2$ -Based Ceramics  
..... Liu Xingqin, Takao Nakada (328)
- The Development of the Artificial Production of the Surface  
Boundary Models.....Cuo Li (336)

A Microcomputer-Controlled Functional Neuromuscular Stimulation  
Experiment System.....Zhou Binghe *et al.* (343)

### Research Notes

- The Numerical Simulation for an Unsteady Shock Wave Sweeping  
Over Multiple Obstacles..... Wang Ruyun, Liu Ruxun (349)
- Hilbert Nullstellensatz of Countably Generated Algebras  
.....Wang Lan, Xiao Caiqun (356)
- Amplitude-Squared Squeezing of Squeezed Coherent State  
..... Xia Yunjie, Guo Guangcan (361)
- Calculation of the Spence Function for a Complex Variable  
..... Ye Jingbo *et al.* (366)
- Engineering Parameters for KT-5C Tokamak Experiments  
.....Wen Yizhi *et al.* (370)
- Research of Noncontact Precision of Angle Shifting  
..... Sun Bangen, Shen Lansun, Chen Lingli (374)
- The Nuclear Detector System With the Microcomputer Apple II  
.....Huo Jianqing, Liang Weisheng (380)

... ..

...

... ..



# Estimates for Discrete Spectrum of Laplacian Operator With any Order\*

Chen Zuchi      Qian Chunlin

(Department of Mathematics)

## Abstract

Discussed in this paper are the estimates for discrete spectrum of Laplacian operator with any order as well as of polynomial of Laplacian operator. This work is a complete generalization of the work done before by other scholars, but achieves better results.

**Key words,** discrete spectrum, Laplacian operator, eigenvalue, eigenfunction.

## 1 Introduction and Lemmas

The estimates for discrete spectrum of Laplacian operator are obtained<sup>[1,2]</sup>. For Laplacian operator with orders 2 and some kind of even numbers the same kind of estimates were discussed in 1984 and later<sup>[3,4]</sup>. In this paper the same kind of estimates are given for discrete spectrum of Laplacian operator with any orders i. e. the numbers of the order are arbitrary integers. The estimates obtained in this paper not only include but also prove better than all of the ones obtained before.

Suppose  $\Omega \subset R^n$  with  $n \geq 2$  is a bounded domain with sufficiently smooth boundary  $\partial\Omega$ . Let  $u(x)$  be a solution of the problem

$$\begin{cases} (-\Delta)^l u = \lambda u & x \in \Omega \\ u = \frac{\partial u}{\partial n} = \dots = \frac{\partial^{l-1} u}{\partial n^{l-1}} = 0 & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (1)$$

Received November 13, 1989.

\* Project supported by National Natural Fund of China.

where  $n$  is the unit outward normal to  $\partial\Omega$  and  $l$  is a arbitrary fixed positive integer.

Suppose that the discrete spectrum of problem (1) is ordered as follows

$$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$$

with corresponding eigenfunctions  $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ , satisfying  $\int_{\Omega} u_i u_j dx = \delta_{ij}, i, j = 1, 2, \dots$ ,

Denoting

$$\nabla^k \equiv \begin{cases} \Delta^{k/2} & \text{when } k \text{ is even} \\ \nabla(\Delta^{(k-1)/2}) & \text{when } k \text{ is odd} \end{cases}$$

then

$$\lambda_i = \int_{\Omega} (-1)^l u_i \Delta^l u_i dx = \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx$$

Suppose  $\varphi_{ik} = x_k u_i - \sum_{j=1}^n a_{ij}^k u_j, x = (x_1, \dots, x_m), i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, m$

where  $a_{ij}^k = \int_{\Omega} x_k u_i u_j dx, i, j = 1, 2, \dots, n$

It is obvious that  $\varphi_{ik}$  are orthogonal to  $u_1, u_2, \dots, u_n$  and

$$\varphi_{ik} = \frac{\partial \varphi_{ik}}{\partial n} = \dots = \frac{\partial^{l-1} \varphi_{ik}}{\partial n^{l-1}} = 0, x \in \partial\Omega$$

so the well-known inequality is

$$\lambda_{n+1} \leq \int_{\Omega} (-1)^l \varphi_{ik} \Delta^l \varphi_{ik} dx / \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx, i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

By ordinary calculation,

$$(-\Delta)^l \varphi_{ik} = (-\Delta)^l (x_k u_i - \sum_{j=1}^n a_{ij}^k u_j) = \lambda_i x_k u_i + (-1)^l 2l \Delta^{l-1} u_{i, x_k} - \sum_{j=1}^n a_{ij}^k \lambda_j u_j$$

and using the orthogonality of  $\varphi_{ik}$  with  $u_j, \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx = \int_{\Omega} x_k u_i \varphi_{ik} dx$  hence,

$$(-1)^l \int_{\Omega} \varphi_{ik} \Delta^l \varphi_{ik} dx = \lambda_i \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx + (-1)^l 2l \int_{\Omega} \varphi_{ik} \Delta^{l-1} u_{i, x_k} dx \quad (3)$$

Denoting

$$I_k = (-1)^l \int_{\Omega} \varphi_{ik} \Delta^{l-1} u_{i, x_k} dx, k = 1, 2, \dots, m; I = \sum_{k=1}^m I_k$$

from (3)

$$(-1)^l \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik} \Delta^l \varphi_{ik} dx = \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \lambda_i \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx + 2lI \quad (4)$$

by (2),

$$\lambda_{n+1} \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \leq \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx + 2lI \quad (5)$$

Replacing  $\lambda_i$  by  $\lambda_n$ , it yields

$$(\lambda_{n+1} - \lambda_n) \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \leq 2ll \quad (6)$$

**Lemma 1** Let  $\lambda_i$  be the eigenvalues,  $i=1,2,\dots$ , and  $u_i$  the corresponding eigenfunctions, then it holds

$$\int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \leq \lambda_i^{k/l}, \quad k=1,2,\dots,l-1$$

**Proof** At first we prove the inequality

$$\left( \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \right)^{1/k} \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k+1} u_i|^2 dx \right)^{1/(k+1)}, \quad k=1,2,\dots,l-1 \quad (7)$$

When  $k=1$ ,

$$\int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 dx = \int_{\Omega} -u_i \Delta u_i dx \leq \left( \int_{\Omega} u_i^2 dx \right)^{1/2} \left( \int_{\Omega} (\Delta u_i)^2 dx \right)^{1/2} = \left( \int_{\Omega} |\nabla^2 u_i|^2 dx \right)^{1/2}$$

Suppose that inequality (7) holds for  $k-1$ , i. e.,

$$\left( \int_{\Omega} |\nabla^{k-1} u_i|^2 dx \right)^{1/(k-1)} \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \right)^{1/k}$$

then for integer  $k$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx &= \int_{\Omega} -\nabla^{k-1} u_i \cdot \nabla^{k+1} u_i dx \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k-1} u_i|^2 dx \right)^{1/2} \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k+1} u_i|^2 dx \right)^{1/2} \\ &\leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \right)^{(k-1)/2k} \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k+1} u_i|^2 dx \right)^{1/2} \end{aligned}$$

therefore,

$$\left( \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \right)^{1/k} \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k+1} u_i|^2 dx \right)^{1/(k+1)}$$

Using the above inequality repeatedly and noticing  $\int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx = \lambda_i$ , it results in

$$\left( \int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \right)^{1/k} \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^{k+1} u_i|^2 dx \right)^{1/(k+1)} \leq \dots \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx \right)^{1/l} = \lambda_i^{1/l}$$

i. e.,

$$\int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \leq \lambda_i^{k/l}$$

**Lemma 2** Suppose  $\lambda_i$ ,  $i=1,2,\dots,n$ , are the eigenvalues of problem (1), then

$$I \leq \frac{2l+m-2}{2} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(l-1)/l} \right)$$

**Proof** From the identity

$$\begin{aligned} I_k &= (-1)^l \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik} \Delta^{l-1} u_{i, s_k} dx = (-1)^l \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} x_k u_i \Delta^{l-1} u_{i, s_k} dx \\ &\quad - (-1)^l \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^k \int_{\Omega} u_j \Delta^{l-1} u_{i, s_k} dx \end{aligned}$$

and

$$\int_{\Omega} u_i \Delta^{l-1} u_{i, \ast k} dx = - \int_{\Omega} u_i \Delta^{l-1} u_{i, \ast k} dx, \quad a_{ij}^k = a_{ji}^k$$

the result is

$$I_k = (-1)^l \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} x_k u_i \Delta^{l-1} u_{i, \ast k} dx$$

Integrating by part

$$\begin{aligned} (-1)^l \int_{\Omega} x_k u_i \Delta^{l-1} u_{i, \ast k} dx &= (-1)^{l-2} (l-1) \int_{\Omega} u_{i, \ast k} \Delta^{l-2} u_{i, \ast k} dx \\ &+ (-1)^{l-1} \cdot \frac{1}{2} \int_{\Omega} u_i \Delta^{l-1} u_i dx = (l-1) \int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_{i, \ast k}|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla^{l-1} u_i|^2 dx \end{aligned}$$

therefore

$$I = \sum_{k=1}^m I_k = \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n (l-1) \int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_{i, \ast k}|^2 dx + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} |\nabla^{l-1} u_i|^2 dx$$

When  $l$  is even,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m \int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_{i, \ast k}|^2 dx &= \sum_{k=1}^m \int_{\Omega} (\Delta^{\frac{l-2}{2}} u_{i, \ast k})^2 dx \\ &= \int_{\Omega} |\nabla(\Delta^{\frac{l-2}{2}} u_i)|^2 dx = \int_{\Omega} |\nabla^{l-1} v_i|^2 dx \end{aligned}$$

when  $l$  is odd by Schwartz inequality,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m \int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_{i, \ast k}|^2 dx &= \sum_{k=1}^m \int_{\Omega} |\nabla(\Delta^{\frac{l-3}{2}} u_{i, \ast k})|^2 dx \\ &= \sum_{k=1}^m \int_{\Omega} (-\Delta^{\frac{l-1}{2}} u_{i, \ast k})(\Delta^{\frac{l-3}{2}} u_{i, \ast k}) dx \leq \int_{\Omega} \left( \sum_{k=1}^m (\Delta^{\frac{l-1}{2}} u_{i, \ast k})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\cdot \left( \sum_{k=1}^m (\Delta^{\frac{l-3}{2}} u_{i, \ast k})^2 \right)^{\frac{1}{2}} dx = \int_{\Omega} |\nabla(\Delta^{\frac{l-1}{2}} u_i)| |\nabla(\Delta^{\frac{l-3}{2}} u_i)| dx \\ &\leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_i|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

by Lemma 1 we know  $\int_{\Omega} |\nabla^{l-2} u_i|^2 dx \leq \lambda_i^{(l-2)/l}$ ,  $\int_{\Omega} |\nabla^{l-1} u_i|^2 dx \leq \lambda_i^{(l-1)/l}$  then for any integer  $l$  the proved inequality is

$$I \leq \frac{2l+m-2}{2} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(l-1)/l} \right)_{\#}$$

**Lemma 3** For  $\varphi_{ik}$  and  $\lambda_i$ ,  $i=1, 2, \dots, n$ ,  $k=1, 2, \dots, m$ , the following inequality holds

$$\left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \varphi_{ik}^2 \right) \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} \right) \geq \frac{m^2 n^2}{4}$$

**Proof** From the definition of  $\varphi_{ik}$  it knows

$$\sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik} u_{i,sk} dx = \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} x_k u_{i,sk} dx - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^k \int_{\Omega} u_j u_{i,sk} dx$$

$$\int_{\Omega} x_k u_{i,sk} \cdot u_i dx = -\frac{1}{2}, \quad \int_{\Omega} u_j u_{i,sk} dx = -\int_{\Omega} u_i u_{j,sk} dx, \quad a_{ij}^k = a_{ji}^k$$

the result is

$$\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik} u_{i,sk} dx = -\frac{mn}{2}$$

By virtue of Schwartz inequality,

$$\frac{m^2 n^2}{4} \leq \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} u_{i,sk}^2 dx \right) = \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \left( \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 dx \right)$$

and using Lemma 1 the following is obtained:

$$\left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} \right) \geq \frac{m^2 n^2}{4} \quad \#$$

## 2 Main Results

It is now possible to formulate main results.

**Theorem 1** Suppose  $\lambda_i, i=1,2,\dots,n$ , are eigenvalues of problem (1), then it holds

$$\lambda_{n+1} \leq \lambda_n + \frac{4l(2l+m-2)}{m^2 n^2} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1-\frac{1}{l}} \right) \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} \right) \quad (8)$$

$$\lambda_{n+1} \leq \frac{(m^2 + 4lm - 8l + 8l^2) \lambda_n}{m^2} \quad (9)$$

**Proof** By lemma 3, it yields

$$\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \geq \frac{m^2 n^2}{4} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} \right)^{-1}$$

By inserting above inequality and the estimate value of  $I$  into (6), it results in estimate (8). Furthermore, replacing  $\lambda_i$  by  $\lambda_n$  in (8) produces estimate (9) #

**Theorem 2** For  $m \geq 2$  and  $n \geq 1$ , the estimates are

$$\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^{1/l}}{\lambda_{n+1} - \lambda_i} \geq \frac{m^2 n^2}{4l(2l+m-2)} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(l-1)/l} \right)^{-1} \quad (10)$$

**Proof** Choosing the parameter  $\beta > \lambda_n$  and rewriting (5) as follows

$$\lambda_{n+1} \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) \leq \beta \left( \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx \right) + \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \beta) \int_{\Omega} \varphi_{ik}^2 dx + 2II \quad (11)$$

By Holder inequality and the equality  $-\frac{mn}{2} = \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{ik} u_{i,sk} dx$ , we find

$$\frac{mn}{2} \leq \frac{\delta}{2} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n (\beta - \lambda_i) \int_{\Omega} \varphi_{i,k}^2 dx + \frac{1}{2\delta} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n (\beta - \lambda_i)^{-1} \int_{\Omega} u_{i,k}^2 dx \quad (12)$$

here  $\delta > 0$  is any real number.

$$\text{Denoting } S \equiv \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \varphi_{i,k}^2 dx, \quad T \equiv \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n (\beta - \lambda_i) \int_{\Omega} \varphi_{i,k}^2 dx$$

then (11) and (12) can be rewritten as the following forms respectively

$$(\lambda_{n+1} - \beta)S + T \leq 2lI \quad (11)'$$

$$mn \leq \delta T + \delta^{-1} \left( \sum_{i=1}^n (\beta - \lambda_i)^{-1} \int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 dx \right) \quad (12)'$$

By the inequality  $\int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 dx \leq \lambda_i^{1/l}$  it is found that  $mn \leq \delta T + \delta^{-1} \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^{1/l}}{\beta - \lambda_i}$

holds where the right hand side of inequality sign attains its minimum when

$$\delta = T^{-\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} / (\beta - \lambda_i) \right)^{\frac{1}{2}}$$

therefore,

$$T \geq \frac{m^2 n^2}{4} \left( \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^{1/l}}{\beta - \lambda_i} \right)^{-1}$$

By inserting the above inequality into (11)' and using Lemma 2, it yields

$$(\lambda_{n+1} - \beta)S \leq l(2l + m - 2) \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(l-1)/l} \right) - \frac{m^2 n^2}{4} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} / (\beta - \lambda_i) \right)^{-1} \quad (13)$$

where  $\beta > \lambda_n$ . Choosing  $\beta$  such that the right hand side of (13) equals to zero, i. e.,

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} / (\beta - \lambda_i) = \frac{m^2 n^2}{4l(2l + m - 2)} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(l-1)/l} \right)^{-1} \quad (14)$$

Denoting  $f(\beta) = \lambda_i^{1/l} / (\beta - \lambda_i)$ , it is obvious that  $f(\beta)$  is a monotonic decreasing function on  $(\lambda_n, +\infty)$ . Hence the value of  $\beta$  which guarantees the equality (14) is determined uniquely. For this  $\beta$  and (13) it is seen that  $\beta \geq \lambda_{n+1}$ , then by replacing  $\beta$  by  $\lambda_{n+1}$  in (14), it gives the proved inequality

**Remark 1** Estimates (8), (9) and (10) hold for any positive integer  $l$  while in papers [1]—[4]  $l$  equals to 1, 2 and other certain kind of even numbers. In this sense, it can be said that the results achieved in this work are the last ones for this kind of estimations.

**Remark 2** Estimates (8), (9) and (10) are better than the corresponding ones in papers [1]—[4], e. g., By using the inequality

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^{1-1/l} \leq n^{1/l} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i \right)^{(l-1)/l}$$

the results in [4] from (8) and (10) can be obtained respectively, and so can in [3]. Therefore, the inequalities presented here are sharper.

### 3 A More General Case

To be considered next is the same problem for the polynomial of Laplacian operator as follows

$$\begin{cases} P(\Delta)u = \lambda u, & x \in \Omega \\ u = \frac{\partial u}{\partial n} = \dots = \frac{\partial^{l-1} u}{\partial n^{l-1}} = 0, & x \in \partial \Omega \end{cases} \quad (15)$$

where  $P(t) = (-1)^l a_0 t^l + (-1)^{l-1} a_1 t^{l-1} + \dots - a_{l-1} t + a_l$ ,  $a_0 = 1$ ,  $a_i \geq 0$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$

Suppose the spectrum is discrete, then it is easy to know

$$\lambda_i = a_0 \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx + a_1 \int_{\Omega} |\nabla^{l-1} u_i|^2 dx + \dots + a_{l-1} \int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 dx + a_l \geq \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx$$

Based on the inequality in Lemma 1 it is found that

$$\int_{\Omega} |\nabla^k u_i|^2 dx \leq \left( \int_{\Omega} |\nabla^l u_i|^2 dx \right)^{k/l} \leq \lambda_i^{k/l}, \quad k = 1, 2, \dots, l$$

The further arguments are as the same as the ones in the preceding context so the proof is omitted and only the results are given here.

**Theorem 3** Suppose  $\lambda_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n+1$ , are the eigenvalues of problem (15) then we have

$$\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^{1/l}}{\lambda_{n+1} - \lambda_i} \geq \frac{m^2 n^2}{4} \left( \sum_{k=0}^{l-1} \sum_{i=1}^n (l-k)(2l-2k+m-2) a_k \lambda_i^{(l-k-1)/l} \right)^{-1} \quad (16)$$

$$\lambda_{n+1} \leq \lambda_n + \frac{4}{m^2 n^2} \left( \sum_{k=0}^{l-1} \sum_{i=1}^n (l-k)(2l-2k+m-2) a_k \lambda_i^{(l-k-1)/l} \right) \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/l} \right) \quad (17)$$

**Remark 3** Choosing  $a_i = 0$  for  $i = 1, 2, \dots$ , in (16) and (17) it results in (10) and (8) respectively. Therefore Theorem 3 is an important generalization of all the estimates in [1]—[4] and of Theorem 1 and 2.

### References

- [1] Payne L E, Polya G and Weinberger H F, *J. Math. and Physics*, **35** (1956), 282—289.
- [2] Hile G N and Protter M H, *Indiana Univ. Math. J.*, **29** (1980), 535—538.
- [3] Hile G N and Yeh R Z, *Pacific J. Math.*, **112** (1984), 115—133.
- [4] Chen Zuchi, *Applicable Analysis An international journal*, **27** (1988), 289—314.

# 任意阶调和算子的离散谱估计

陈祖墀 钱椿林

(数学系)

## 摘 要

讨论任意阶调和算子的离散谱估计,同时给出调和算子多项式的离散谱估计.所得结果是前人工作的一个全面的推广,不但包含了已有的同类工作的结果,而且改进了已有的估计.

**关键词:** 离散谱, 拉普拉斯算子, 特征值, 特征函数.

**中图法分类号:** O175.25

**AMS:** 35P15



# Symmetries and the Related Lie Algebraic Structure of the Principal Chiral Field Equation

Zhang Youjin

(Department of Mathematics)

## Abstract

In this paper the principal chiral field equation is considered. By using the correspondent linear system and the infinitesimal version of the 'dressing' method, infinite numbers are obtained of symmetries which constitute a loop algebra and an infinite dimensional Lie algebra similar to a Virasoro algebra.

**Key words:** Lax pair, principal chiral field equation, symmetry.

## 1 Introduction

In the past few years, symmetries and their Lie algebraic structure of integrable nonlinear evolution equations have provided a major contribution to a better understanding of these equations. It is well known that these equations in general possess an infinite number of classical conservation laws. Associated with these conservation laws are classical symmetries. Chen *et al* (1982), Li and Zhu (1986) found that for many integrable nonlinear evolution equations there exists another infinite set of symmetries, which, together with the classical symmetries, constitute an infinite dimensional Lie algebra which has a Virasoro algebra as subalgebra. The discovery of the new set of symmetries and their algebraic structure has much more significance.

The principal chiral field equation is relevant to many physical phenomena. Dolan (1981), Ge and Wu (1982), and Wu (1983) found an infinite number of

symmetries associated with an infinite number of conservation laws; these symmetries constitute a loop algebra. Later, Hou and Lee (1987) proved that there exists a Virasoro algebraic structure in nonlinear  $\sigma$ -model. The approach to the study is to use the regular infinitesimal Riemann-Hilbert transform. In this paper, the infinitesimal version of the 'dressing' method and its modification proposed by Orlov and Schulman (1986), as well as the idea of Tu (1987), is used to get infinite numbers of symmetries for the principal chiral field equation, and to prove that these symmetries constitute a loop algebra and an infinite dimensional Lie algebra similar to a Virasoro algebra.

## 2 Symmetries and Their Algebraic Structure for System (7)

First, the infinitesimal version of the 'dressing' method is to be introduced. Consider the following linear system

$$\varphi_\xi = L\varphi = L(\xi, \eta, \lambda)\varphi \quad (1a)$$

$$\varphi_\eta = M\varphi = M(\xi, \eta, \lambda)\varphi \quad (1b)$$

The integrability condition is

$$L_\eta - M_\xi + [L, M] = 0 \quad (2)$$

Let  $\Phi$  be a fundamental solution matrix for the system (1). An infinitesimal 'dressing' of  $L$  and  $M$  is generated by an infinitesimal gauge transformation  $\Phi \mapsto (1 + \delta\chi)\Phi$ , under this transformation,  $L \mapsto L + \delta L$ ,  $M \mapsto M + \delta M$ , where

$$\delta L = (\delta\chi)_\xi - [L, \delta\chi] = [\partial_\xi - L, \delta\chi] \quad (3a)$$

$$\delta M = (\delta\chi)_\eta - [M, \delta\chi] = [\partial_\eta - M, \delta\chi] \quad (3b)$$

By using the Jacobi identity and (2) we get

$$(\delta L)_\eta - (\delta M)_\xi + [\delta L, M] + [L, \delta M] = 0 \quad (4)$$

Now we consider the principal chiral field equation

$$(g^{-1}g_\xi)_\eta + (g^{-1}g_\eta)_\xi = 0 \quad (5)$$

where  $g(\xi, \eta)$  belongs to a  $N \times N$  matrix group. Let  $A = g^{-1}g_\xi$ ,  $B = g^{-1}g_\eta$ , then the system corresponding to (5) and their integrability conditions become

$$\varphi_\xi = -\frac{A(\xi, \eta)}{\lambda + 1}\varphi = L\varphi \quad (6a)$$

$$\varphi_\eta = \frac{B(\xi, \eta)}{\lambda - 1}\varphi = M\varphi \quad (6b)$$

$$A_\eta + B_\xi = 0 \quad (7a)$$

$$A_\eta - B_\xi - [A, B] = 0 \quad (7b)$$

Equations (7a) and (7b) are equivalent to equation (5).

Let

$$\delta\chi_n = \alpha(\lambda^n - \lambda^{n-2})\partial_\lambda + \sum_{i=0}^n K_i(\xi, \eta)\lambda^{n-i} \quad (8)$$

where  $\alpha=0$  or  $\alpha=1$ . Put  $\delta\mathcal{X}=\delta\mathcal{X}_n$  and  $L=-\frac{A}{\lambda+1}$ ,  $M=\frac{B}{\lambda-1}$  into (3a) and (3b)

$$-\frac{\delta A}{\lambda+1}=\left[\partial_\xi+\frac{A}{\lambda+1},\alpha(\lambda^n-\lambda^{n-2})\partial_\lambda+\sum_{i=0}^n K_i\lambda^{n-i}\right] \quad (9a)$$

$$\frac{\delta B}{\lambda-1}=\left[\partial_\eta-\frac{B}{\lambda-1},\alpha(\lambda^n-\lambda^{n-2})\partial_\lambda+\sum_{i=0}^n K_i\lambda^{n-i}\right] \quad (9b)$$

It is required that  $\delta A$  and  $\delta B$  which are determined by (9) should be independent of  $\lambda$ , and the necessary and sufficient conditions to meet the requirement are

$$K_{0\xi}=0, K_{0\eta}=0 \quad (10)$$

$$K_{l\xi}+K_{l-1\eta}+\alpha(\delta_{l,2}-\delta_{l,3})A+[A,K_{l-1}]=0 \quad (11a)$$

$$K_{l\eta}-K_{l-1\eta}-\alpha(\delta_{l,2}+\delta_{l,3})B-[B,K_{l-1}]=0 \quad (11b)$$

$$\delta A=K_{n+1\xi}, \delta B=-K_{n+1\eta} \quad (12)$$

where  $l=1,2,\dots$ , and  $\delta_{l,l}=1$ ,  $\delta_{l,l}=0$  for  $j\neq l$ . It can be checked by induction that (11a) and (11b) are compatible whenever A and B satisfy (7), so system (11) has solutions. From (4)

$$(\delta A)_\eta+(\delta B)_\xi=0 \quad (13a)$$

$$(\delta A)_\eta-(\delta B)_\xi-[\delta A,B]-[A,\delta B]=0 \quad (13b)$$

The above two equations imply that  $\delta A$  and  $\delta B$ , determined by equations (10) ~ (12), constitute a symmetry of (7). Thus infinite numbers of symmetries of (7) can be obtained by varying  $n$ ,  $K_0$  and  $\alpha$  in (8).

In considering the algebraic structure of the symmetries obtained above, it can be assumed, for simplicity, that when  $\xi$  or  $\eta$  tends to negative infinity,  $A$  and  $B$  tend to zero sufficient rapidly. Then by choosing any  $N \times N$  constant matrix  $K_0$ , a unique solution  $\{K_i\}_{i=1}^n$  of system (11) is got such that  $\lim_{\xi \rightarrow -\infty} K_i = \lim_{\eta \rightarrow -\infty} K_i = 0$ ,  $j=1,2,\dots$ . For example, in the case of  $K_1 = -\int_{-\infty}^{\xi} [A, K_0] d\xi' = \int_{-\infty}^{\eta} [B, K_0] d\eta'$ . The solution is uniquely determined by  $K_0$  and  $\alpha$ , so  $K_i$  is denoted by  $K_i^{a,\alpha}$ , where  $\alpha=K_0$ , and the corresponding  $\delta\mathcal{X}_n$ ,  $\delta A$  and  $\delta B$  are denoted by  $\delta\mathcal{X}_n^{a,\alpha}$ ,  $\delta A_n^{a,\alpha}$  and  $\delta B_n^{a,\alpha}$ .  $\delta A_n^{a,\alpha}$  and  $\delta B_n^{a,\alpha}$  determine an infinitesimal transformation of  $A$  and  $B$ , and this transformation is denoted by  $A \rightarrow A_n^{a,\alpha} = A_n^{a,\alpha}(\eta_n^{a,\alpha})$ ,  $B \rightarrow B_n^{a,\alpha} = B_n^{a,\alpha}(\eta_n^{a,\alpha})$ , where

$$\frac{\partial A_n^{a,\alpha}}{\partial \eta_n^{a,\alpha}} = \delta A_n^{a,\alpha}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha}) \quad (14a)$$

$$\frac{\partial B_n^{a,\alpha}}{\partial \eta_n^{a,\alpha}} = \delta B_n^{a,\alpha}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha}) \quad (14b)$$

$$A_n^{a,\alpha} |_{\eta_n^{a,\alpha}=0} = A \quad (14c)$$

$$B_n^{a,\alpha} |_{\eta_n^{a,\alpha}=0} = B \quad (14d)$$

we define

$$[[\delta A_n^{a,\alpha}, \delta A_m^{b,\beta}]] = \frac{\partial \delta A_n^{a,\alpha}(A_m^{b,\beta}, B_m^{b,\beta})}{\partial \eta_m^{b,\beta}} \Big|_{\eta_m^{b,\beta}=0} - \frac{\partial \delta A_m^{b,\beta}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha})}{\partial \eta_n^{a,\alpha}} \Big|_{\eta_n^{a,\alpha}=0} \quad (15a)$$

$$[[\delta B_n^{a,\alpha}, \delta B_m^{b,\beta}]] = \frac{\partial \delta B_n^{a,\alpha}(A_m^{b,\beta}, B_m^{b,\beta})}{\partial \eta_m^{b,\beta}} \Big|_{\eta_m^{b,\beta}=0} - \frac{\partial \delta B_m^{b,\beta}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha})}{\partial \eta_n^{a,\alpha}} \Big|_{\eta_n^{a,\alpha}=0} \quad (15b)$$

$[[\delta A_n^{a,\alpha}, \delta A_m^{b,\beta}]]$  and  $[[\delta B_n^{a,\alpha}, \delta B_m^{b,\beta}]]$  measure the noncommutativity of the infinitesimal transformations determined by  $\delta A_n^{a,\alpha}$ ,  $\delta B_n^{a,\alpha}$  and  $\delta A_m^{b,\beta}$ ,  $\delta B_m^{b,\beta}$ . In the following text,  $[[\delta A_n^{a,\alpha}, \delta A_m^{b,\beta}]]$  and  $[[\delta B_n^{a,\alpha}, \delta B_m^{b,\beta}]]$  will be computed.

Let  $G$  be a subalgebra of  $gl(N, R)$ , and  $\{a, b, c, \dots\}$  be a basis of  $G$ , then by using (11) the following can be obtained:

$$\sum_{i=0}^l [K_i^{a,0}, K_{l-i}^{b,0}] = C_{a,b}, K_l^{a,0} \quad (16)$$

$$\sum_{i=0}^1 [K_i^{a,\alpha}, K_{1-i}^{b,\beta}] = 0 \quad (17a)$$

$$\sum_{i=0}^2 [K_i^{a,\alpha}, K_{2-i}^{b,\beta}] = \alpha K_1^{b,\beta} - \beta K_1^{a,\alpha} \quad (17b)$$

$$\sum_{i=0}^l [K_i^{a,\alpha}, K_{l-i}^{b,\beta}] = (l-1)(\alpha K_{l-1}^{b,\beta} - \beta K_{l-1}^{a,\alpha}) - (l-3)(\alpha K_{l-3}^{b,\beta} - \beta K_{l-3}^{a,\alpha}) \quad (17c)$$

where  $l \geq 3$  and  $a, b$  belong to an Abelian subalgebra  $\tilde{G}$  of  $gl(N, R)$ . Also by induction and using (11), (14), the following can be got:

$$\frac{\partial K_1^{a,\alpha}}{\partial \eta_n^{b,\beta}} = [K_0^{a,\alpha}, K_{n+1}^{b,\beta}] \quad (18a)$$

$$\frac{\partial K_2^{a,\alpha}}{\partial \eta_n^{b,\beta}} = [K_0^{a,\alpha}, K_{n+2}^{b,\beta}] + [K_1^{a,\alpha}, K_{n+1}^{b,\beta}] - \alpha K_{n+1}^{b,\beta} \quad (18b)$$

$$\frac{\partial K_l^{a,\alpha}}{\partial \eta_n^{b,\beta}} = \sum_{k=0}^{l-1} [K_k^{a,\alpha}, K_{n+l-k}^{b,\beta}] - (l-1)\alpha K_{n+l-1}^{b,\beta} + (l-3)\alpha K_{n+l-3}^{b,\beta} \quad (18c)$$

where  $l \geq 3$ ,  $a = K_0^{a,\alpha}$ ,  $b = K_0^{b,\beta}$ ,  $K_j^{a,\alpha} = K_j^{a,\alpha}(A_n^{b,\beta}, B_n^{b,\beta})$ ,  $K_j^{b,\beta} = K_j^{b,\beta}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha})$ ,  $A$  and  $B$  satisfy (7). Note that  $A_n^{b,\beta}$  and  $B_n^{b,\beta}$  satisfy (7), so  $\{K_j^{a,\alpha}(A_n^{b,\beta}, B_n^{b,\beta})\}_{j=1}^{n+1}$  satisfy (11) with  $K_0 = a$ ,  $A = A_n^{b,\beta}$ ,  $B = B_n^{b,\beta}$  and  $\{K_j^{b,\beta}(A_n^{a,\alpha}, B_n^{a,\alpha})\}_{j=1}^{n+1}$  satisfy (11) with  $K_0 = a$ ,  $A = A_n^{b,\beta}$ ,  $B = B_n^{b,\beta}$ .

Let  $a, b$  be basis elements of  $G$ , by using (15), (16) and (18), the result is

$$[[\delta A_n^{a,0}, \delta B_n^{a,0}]] = \frac{\partial K_{n+1}^{a,0}(A_m^{b,0}, B_m^{b,0})}{\partial \eta_m^{b,0}} \Big|_{\eta_m^{b,0}=0} - \frac{\partial K_{m+1}^{b,0}(A_n^{a,0}, B_n^{a,0})}{\partial \eta_n^{a,0}} \Big|_{\eta_n^{a,0}=0}$$

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{k=0}^m [K_k^{b,0}(A, B), K_{n+m+1-k}^{a,0}(A, B)]_\xi + \sum_{k=0}^n [K_k^{a,0}(A, B), K_{n+m+1-k}^{b,0}(A, B)]_\xi \\
&= \sum_{k=0}^{m+n+1} [K_k^{a,0}(A, B), K_{n+m+1-k}^{b,0}(A, B)] = C_{abc} K_{m+n+1}^{c,0}
\end{aligned}$$

so

$$[[\delta A_n^{a,0}, \delta A_m^{b,0}]] = C_{abc} \delta A_{m+n}^{c,0}, \quad a, b \in G \quad (19)$$

similarly,

$$[[\delta B_n^{a,0}, \delta B_m^{b,0}]] = C_{abc} \delta B_{m+n}^{c,0}, \quad a, b \in G \quad (20)$$

and for  $a, b \in \tilde{G}$ , by using (15), (17) and (18), the results are

$$[[\delta A_n^{a,0}, \delta A_m^{b,0}]] = 0 \quad (21a)$$

$$[[\delta A_n^{a,0}, \delta A_m^{b,1}]] = n(\delta A_{m+n-3}^{a,0} - \delta A_{m+n-1}^{a,0}) \quad (21b)$$

$$[[\delta A_n^{a,1}, \delta A_m^{b,1}]] = n(\delta A_{m+n-3}^{a,1} - \delta A_{m+n-1}^{a,1}) - m(\delta A_{m+n-3}^{b,1} - \delta A_{m+n-1}^{b,1}) \quad (21c)$$

$$[[\delta B_n^{a,0}, \delta B_m^{b,0}]] = 0 \quad (22a)$$

$$[[\delta B_n^{a,0}, \delta B_m^{b,1}]] = n(\delta B_{m+n-3}^{a,0} - \delta B_{m+n-1}^{a,0}) \quad (22b)$$

$$[[\delta B_n^{a,1}, \delta B_m^{b,1}]] = n(\delta B_{m+n-3}^{a,1} - \delta B_{m+n-1}^{a,1}) - m(\delta B_{m+n-3}^{b,1} - \delta B_{m+n-1}^{b,1}) \quad (22c)$$

### 3 Symmetries and Algebraic Structure of the Principal Chiral Field Equation

Assume that when  $\xi$  or  $\eta$  tends to negative infinity,  $g$  tends to a nonsingular constant matrix sufficient rapidly then  $A = g^{-1}g_\xi$  and  $B = g^{-1}g_\eta$  satisfy the boundary conditions of section two. From  $A = g^{-1}g_\xi$ , and  $B = g^{-1}g_\eta$  the following can be concluded:

$$(\delta g)_\xi = \delta g \cdot A + g \cdot \delta A \quad (23a)$$

$$(\delta g)_\eta = \delta g \cdot B + g \cdot \delta B \quad (23b)$$

Equations (23a) and (23b) are compatible whenever  $\delta A$  and  $\delta B$  satisfy (13), and any solution of (23) is a symmetry of (5). Now let  $\delta A = \delta A_n^{a,a}$ ,  $\delta B = \delta B_n^{a,a}$ , then (23) has a unique solution  $\delta g_n^{a,a}$  such that when  $\xi$  or  $\eta$  tends to negative infinity  $\delta g_n^{a,a}$  tends to zero. Now, when it is defined that  $g_n^{a,a} = g_n^{a,a}(\xi, \eta, \eta_n^{a,a})$  such that

$$A_n^{a,a} = (g_n^{a,a})^{-1} (g_n^{a,a})_\xi \quad (24a)$$

$$B_n^{a,a} = (g_n^{a,a})^{-1} (g_n^{a,a})_\eta \quad (24b)$$

$$g_n^{a,a} |_{\eta_n^{a,a} = 0} = g \quad (24c)$$

then  $\frac{\partial g_n^{a,a}}{\partial \eta_n^{a,a}}$  satisfies equations (23a) and (23b) with  $A = A_n^{a,a}$ ,  $B = B_n^{a,a}$ ,  $\delta A =$

$\delta A_n^{a,a}$  and  $\delta B = \delta B_n^{a,a}$ . By the uniqueness of  $\delta g_n^{a,a}$  the following

$$\frac{\partial g_n^{a,a}}{\partial \eta_n^{a,a}} = \delta g_n^{a,a} (g_n^{a,a}) \quad (25a)$$

$$g_n^{a,\alpha} |_{\eta_n^{a,\alpha}=0} = g \quad (25b)$$

are obtained. In the same manner as for (15), a definition is given as

$$\llbracket \delta g_n^{a,\alpha}, \delta g_m^{b,\beta} \rrbracket = \left. \frac{\partial \delta g_n^{a,\alpha}(g_m^{b,\beta})}{\partial \eta_m^{b,\beta}} \right|_{\eta_m^{b,\beta}=0} - \left. \frac{\partial \delta g_m^{b,\beta}(g_n^{a,\alpha})}{\partial \eta_n^{a,\alpha}} \right|_{\eta_n^{a,\alpha}=0} \quad (26)$$

By using (15), (23) and (25) the following can be checked

$$\llbracket \delta g_n^{a,\alpha}, \delta g_m^{b,\beta} \rrbracket_\xi = \llbracket \delta g_n^{a,\alpha}, \delta g_m^{b,\beta} \rrbracket A + g \llbracket \delta A_n^{a,\alpha}, \delta A_m^{b,\beta} \rrbracket \quad (27a)$$

$$\llbracket \delta g_n^{a,\alpha}, \delta g_m^{b,\beta} \rrbracket_\eta = \llbracket \delta g_n^{a,\alpha}, \delta g_m^{b,\beta} \rrbracket B + g \llbracket \delta B_n^{a,\alpha}, \delta B_m^{b,\beta} \rrbracket \quad (27b)$$

Let

$$\mathcal{L}_1 = \{ \delta g_n^{a,0} | a \text{ is basis element of } G, G \text{ is a subalgebra of } gl(N, R), n \geq 0 \}.$$

$$\mathcal{L}_2 = \{ \delta g_n^{a,\alpha} | a \text{ is basis element of } \tilde{G}, \tilde{G} \text{ is an Abelian subalgebra of } gl(N, R), n \geq 2, \alpha = 0 \text{ or } \alpha = 1 \}.$$

Then from (19)~(23), (27) and the uniqueness of  $\delta g_n^{a,\alpha}$ , the following are obtained:

i) Let  $\delta g_n^{a,0}, \delta g_m^{b,0} \in \mathcal{L}_1$ , then

$$\llbracket \delta g_n^{a,0}, \delta g_m^{b,0} \rrbracket = C_{abc} \delta g_{m+n}^{c,0} \quad (28)$$

ii) Let  $\delta g_n^{a,0}, \delta g_m^{b,0} \in \mathcal{L}_2$ , then

$$\llbracket \delta g_n^{a,0}, \delta g_m^{b,0} \rrbracket = 0, \quad (29a)$$

$$\llbracket \delta g_n^{a,0}, \delta g_m^{b,1} \rrbracket = n(\delta g_{m+n-3}^{a,0} - \delta g_{m+n-1}^{a,0}), \quad (29b)$$

$$\llbracket \delta g_n^{a,1}, \delta g_m^{b,1} \rrbracket = n(\delta g_{m+n-3}^{a,1} - \delta g_{m+n-1}^{a,1}) - m(\delta g_{m+n-3}^{b,1} - \delta g_{m+n-1}^{b,1}). \quad (29c)$$

From (28) and (29) it is seen that  $\mathcal{L}_1$  and  $\mathcal{L}_2$ , which are sets of symmetries of the principal chiral field equation, are two sets of bases for two infinite dimensional Lie algebras respectively. The algebra corresponding to  $\mathcal{L}_1$  is a Loop algebra; and the one corresponding to  $\mathcal{L}_2$  has a subalgebra similar to a Virasoro algebra. Moreover, the set of symmetries  $\mathcal{L}_1$  is just the same as the one given by Ge (1982), in that it corresponds to a set of infinitely many nonlocal conservation laws for the principal chiral field equation.

The approach of this paper can also be used to get infinite numbers of symmetries for the self-dual Yang-Mills equation; these symmetries constitute a Loop algebra and a Virasoro algebra. The details will be given in another paper.

The author would like to express his sincere thanks to Prof. Li Yishen, Prof. Tian Chou and Dr. Cheng Yi for their encouragement and advice.

# 主手征场方程的对称及其构成的李代数

张友金

(数学系)

## 摘 要

利用主手征场方程的 Lax 对及无穷小意义下的“穿衣服”方法,得到了主手征场方程的无穷多串对称,并且证明了它们构成一圈代数以及某一与 Virasors 代数类似的无穷维李代数.

**关键词:** Lax 对, 主手征场方程, 对称.

**中图法分类号:** O175.29

**AMS:** 35Q

# 自动限温加热带电—热性能的研究

苏洪钊 蒋淮渭

(中国科学技术大学)

方铎荣 胡文友\* 陆显洁

(中国科学院力学研究所)

## 摘 要

研究了自动限温加热带的电—热性能,得到的结果表明:主动电阻与温度为双曲线关系,功率与温度成线性关系,二者是相互关联的。这是由于加热带通电工作时具有自动限温能力,而自动限温的能力来自加热带的被动电阻具有很高的正温度系数的(PTC)特性所致。讨论了影响加热带输出功率的因素。

**关键词:** 自动限温加热带, 电—热性能, PTC 效应。

**中图法分类号:** TM924.2, TM243

## 1 引言

自动限温加热带(简称加热带)是由具有电阻率高正温度系数(简称PTC)的高聚物复合材料制成的带状电加热器<sup>[1]</sup>。

对于PTC材料的性能前人已作了较多的研究<sup>[2-6]</sup>,相比之下,对加热带性能的报道则甚少<sup>[7]</sup>。加热带的电热性能不仅与使用时的热工设计有关,而且也涉及对加热带质量的评价。本文对加热带的电热性能,如电阻率及功率与温度的关系、自限温度与电压的关系等作了实验研究。并用红外热象仪测定了加热带通电时的温度分布。

## 2 实验

加热带样品由芜湖市电线厂制造,其基本结构如图1,样品净长为1m,端头用快干胶

1989年元月21日收到。

\* 航天工业部二院207所。



密封绝缘。

恒温水循环流过夹套，夹套的温度为环境温度。加热带放在夹套中心，夹套二端用隔热材料封闭。测定恒电压时的稳定电流，由此计算在该环境温度下的电阻及功率。实验装置见图 2。另一方法是将加热带全部浸入恒温水中测试功率。

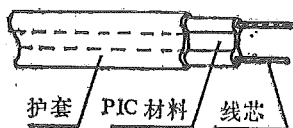


图 1 加热带的基本结构

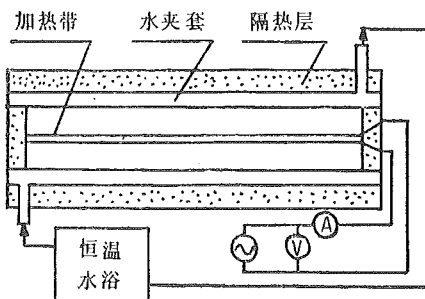


图 2 实验装置

将加热带平直地固定在平板上，白纸衬底，使背景表面发射率均匀，用高灵敏度热象仪（瑞典AGA780），选波长为  $2-5.6\mu\text{m}$  的红外线，测量稳定态时加热带的热象图。在背景为  $30^\circ\text{C}$  时测温灵敏度为  $0.1^\circ\text{C}$ 。

### 3 结果和讨论

#### 3.1 主动电阻与被动电阻

由于 PTC 材料的电阻率对温度十分敏感，测量电阻时样品的功率耗散（简称 功耗）对测得的电阻值有很大影响。J.Oakes 等<sup>[7]</sup>定义功耗较小时测得的电阻为被动电阻，恒电压下，在电流稳定后，用电压和电流计算的电阻为主动电阻。对 PTC 材料的伏—安特性的研究表明，在低电压时（小于  $1.0\text{V}$ ）、电阻与电压无关，为常数；但当电压升至一定程度（大于  $3\text{V}$ ），电阻随电压升高而下降。测得的电阻—电压特性见图 3<sup>[8]</sup>。

为了方便，称图 3 中电阻的水平段为欧姆区，倾斜段为为非欧姆区。规定被动电阻为欧姆区的电阻，因此时样品的功耗很小，样品的温度等于环境温度。由于样品处于平衡态，被动电阻反映的是材料本身的性质。另一方面，主动电阻是在高电压即加热带的工作电压下测定的，因电压、电流较大，功耗增加，样品的温度较环境温度为高，如通电时间足够长，二者的温差达到恒定，即稳定态。主动电阻为稳定态电阻，它反映了加热带实际应用的情况，其数据可直接用于热电设计。

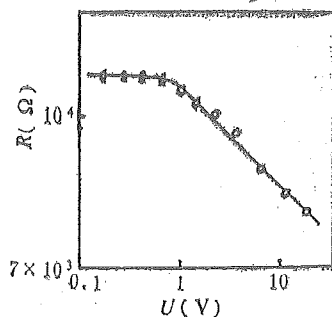


图 3 电阻电压特性

#### 3.2 电阻与温度的关系

PTC 材料的主要特点是其电阻率在某一温度区间内急剧上升，加热带保留了这一特点。用同一加热带样品在同一装置中（见图 2）测试不同环境温度时的被动电阻和主动电阻，得

到的结果绘于图 4。

由图 4 可见，两种电阻均在一定温区急剧上升，但上升的规律不同，被动电阻与温度呈指数关系<sup>[9]</sup>，而主动电阻与温度为双曲线，后者可从稳定态的概念加以证明（见后）。

图 4 的温度指环境温度即水夹套的温度。测主动电阻时，带温高于夹套温度，达到稳定态后，加热带与夹套之间形成稳定的温度场。将热电偶紧贴在加热带的中部，测得其表面温度与电压的关系如图 5。

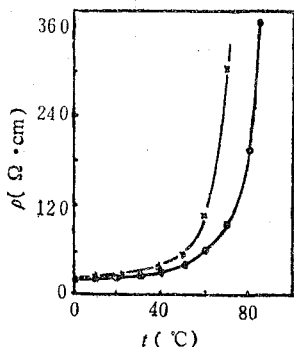


图 4 电阻率与温度的关系  
×被动电阻率，○主动电阻率

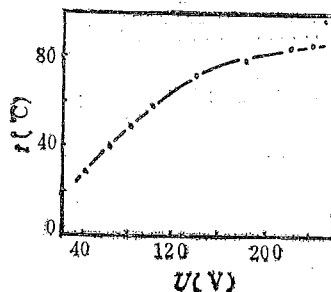


图 5 表面温度与电压的关系

图 5 表明，加热带与环境的温差随电压升高而增加，但渐趋恒定，如图中电压 220V 和 240V 的差别已经很小，这一现象在功率—温度图中亦有反映。

### 3.3 功率与温度的关系

加热带的功率是稳定态参数，它与温度、测试方法、测试条件、传热因素有关。在充分搅拌的与静止的水中及在图 2 的装置中，在不同电压下，测得的功率—温度特性见图 6。

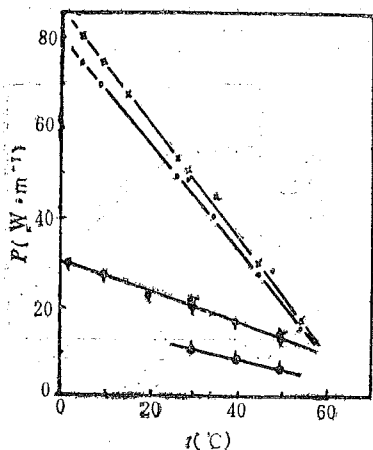


图 6 功率与测试条件的关系  
×水中搅拌，·水中静止，(220V)；○-○-○在图 2 装置中进行(分别为 240V、220V、160V)

设加热带在一定环境下，通电时间足够长（5 分钟以上），电流值即不再改变，说明已达到稳定状态，加热带的电功率等于单位时间内加热带向环境传递的热量，后者符合 Fourier 公式。即

$$P = Q/t = -K(T_A - T_H) \quad (1)$$

其中  $P$ 、 $Q$  和  $t$  分别为功率、热量和时间； $K$  为传热系数； $T_A$  和  $T_H$  分别为环境温度和加热带的工作温度。

式 (1) 表明： $P$  与  $T_A$  成线性关系，这与图 6 的测量结果相符（注意图 6 的横轴即为  $T_A$ ）；其次，当  $P=0$  时， $T_A = T_H$ 。为求  $T_H$ ，可将测得的  $P-T_A$  曲线外

延至  $P=0$ ；第三，当  $T_A = 0^\circ\text{C}$  时， $P_0 = KT_H$ ，由此求得  $K$  值。另外由图 6 可见， $P$ —

$T_A$  线的斜率为  $-K$ ，其物理意义为环境温度每增加 1 度时加热带功率的减少量，反映了功率随温度调节的能力。另一方面  $K$  的值取决于传热的因素，在充分搅拌的水中测试时， $T_A$  可看作加热带的表面温度， $K$  的值仅取决于加热带本身的参数，如护套材料的导热系数、面积及与芯带接触的程度等。图 6 的结果表明，在水中测得的  $K$  值比在空气中测得的  $K$  值大，反映了前者的热阻较后者的小。虽然电压不同时  $T_H$  也不相同，但同一样品在同一装置中的  $K$  值是相同的，这是图 6 中用同一装置不同电压下测得的功率—温度线大致平行的原因。

### 3.4 主动电阻与功率

主动电阻与温度以及功率与温度的关系可通过式 (1) 联系起来。设电压为  $U$  且恒定，主动电阻为  $R_a$ ，代入式 (1) 得

$$R_a = \frac{-U^2}{K(T_A - T_H)} \quad (2)$$

由式 (2) 可见， $R_a$  与  $(T_A - T_H)$  成反比，在  $R_a - T_A$  图上 (见图 4) 为双曲线，其渐近线为横轴及直线  $T_A = T_H$ 。

由式 (1) 和式 (2) 可见，加热带的功率随温度调节的性能与其主动电阻在工作温度时趋于极大的性能相关，这是与传统的恒功率加热器的主要差别。

### 3.5 加热带表面温度的分布——热象图

加热带的温度分布与加热带的质量有关，为此，用热象仪测量了其温度分布。测量的热象图表明，加热带工作时的温度在沿长度方向及垂直方向都比较均匀，温差不大于  $\pm 2^\circ\text{C}$ 。利用热象仪还可以测定通电开始阶段即暂态的温度分布，这是值得进一步研究的课题。

## 4 结论

主动电阻与被动电阻的概念对讨论自动限温加热带的热电性能是有益的。被动电阻之值不能用来计算加热带在使用时的电流和功率。

主动电阻与加热带的工作温度和环境温度之差成反比，比例系数与电压和传热的因素有关。

加热的功率与温度成线性关系，功率—温度直线的斜率取决于传热的因素并反映了功率随温度自动调节的能力。

加热带的工作温度主要取决于制造加热带的 PTC 材料，其值可由加热带功率—温度曲线外延到功率为零求得。

热象仪是研究加热带温度分布的理想手段。

## 参 考 文 献

- [1] Bedard R L, USP 3, 914, 363 (1975).
- [2] Nakis M, Ram A and Stein Z, *J. Appl. Polym. Sci.*, **25** (1980), 1515.
- [3] Nakis M, Ram A and Stein Z, *Polym. Eng. Sci.*, **21** (1981), 1049.
- [4] Nekis M and Vaxman A, *J. Appl. Polym. Sci.*, **29** (1984), 1639.
- [5] Meyer J, *Polym. Eng. Sci.*, **13** (1973), 462.
- [6] Meyer J, *Polym. Eng. Sci.*, **14** (1974), 706.
- [7] Oakes J A and Sandberg C L, *IEEE Transactins*, **9** (1973), 462.
- [8] 苏洪钐、祝晓虹、蒋淮渭、黄义博, 化学物理学报, **2** (1989), 151.
- [9] 苏洪钐等, 应用化学, 待发表.

## On the Electrothermic Behaviour of Self - Temperature-Limiting Heating Strip

Su Hongyu      Jiang Huaiwei

*(University of Science and Technology of China)*

Fang Duorong      Hu Wenyong      Lu Xianjie

*(Institute of Mechanics, Academia Sinica)*

### Abstract

The electrothermic behaviour of self-temperature-limiting heating strip was investigated. The results obtained showed that the hyperbolic relation of active resistance and temperature was correlated with the linear relation of power output and temperature. The correlation mentioned above was due to the self-temperature-limiting character of the heating strip at work and such character resulted from the high positive temperature coefficient (PTC) of the passive resistance. The factors that influenced the power output of the heating strip were discussed.

**Key words:** self-temperature-limiting heating strip, electrothermic behaviour, PTC effect.

# O(<sup>3</sup>p)原子和丙烯醇化学反应动力学研究

陈从香 高义德 朱梦霞 俞书勤

(近代化学系)

## 摘 要

用流动放电—化学发光方法测定O(<sup>3</sup>p)原子和丙烯醇分子化学反应速率常数。在293K—473K范围内,反应速率常数的Arrhenius形式为

$$k = \left( \begin{matrix} 6.41 & +0.67 \\ & -0.61 \end{matrix} \right) \times 10^{-11} \exp[-(6.4 \pm 0.3) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT] \text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

并对该反应的反应机理进行了讨论。

**关键词:** O(<sup>3</sup>p)原子, 丙烯醇, 反应动力学。

**中图法分类号:** O643.11

## 1 引言

我们曾经测定过O(<sup>3</sup>p)原子与C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>化学反应速率常数<sup>[1]</sup>,最近又对O(<sup>3</sup>p)原子与醇类分子化学反应速率常数作了系列测定<sup>[1,2]</sup>。因丙烯醇分子既具有稀烃的不饱和性,又具有醇的性质,所以O(<sup>3</sup>p)原子与丙烯醇化学反应动力学研究是一个有趣的课题。我们采用流动微波放电—化学发光技术测定了这一反应的速率常数,并对其反应机理进行了讨论。

## 2 实验

实验方法在文献[1,2]中已经作了详细描述,在此只作简要介绍。通过微波放电腔,将O<sub>2</sub>(Ar中浓度约为0.5%)离解成O(<sup>3</sup>p)原子。O(<sup>3</sup>p)原子流入流动反应管后,与从可移动注入器流入的丙烯醇(Ar气中)分子反应。经历一定反应时间后流入检测器。往检测器中注入过量的NO(Ar气中)。O(<sup>3</sup>p)与NO反应生成电子激发态的NO<sub>2</sub><sup>\*</sup>。NO<sub>2</sub><sup>\*</sup>放出光子被光电倍增管接收。保持NO的浓度恒定并远大于O(<sup>3</sup>p)的浓度,该化学发光的强度正比于O(<sup>3</sup>p)原子的浓度<sup>[3]</sup>。实验中保持丙烯醇的浓度比O(<sup>3</sup>p)原子初始浓度高100倍以上,以满足关于O(<sup>3</sup>p)原子的假一级反应条件。数据处理方法同文献[1,2]。

实验中使用的 O<sub>2</sub>, Ar 和 NO 气体都同文献[1,2]。丙烯醇 (98%, 上海试剂一厂) 在配气前经减压蒸馏纯化。

### 3 结果和讨论

各温度下实验测得的 O(<sup>3</sup>p) 原子与丙烯醇化学反应假一级反应速度常数  $k'$  和二级反应

表 1 O(<sup>3</sup>p) 与丙烯醇反应速率常数测定结果

$T$ (K)	丙烯醇 ( $10^{13}$ molec·cm <sup>-3</sup> )	$k'$ s <sup>-1</sup>	$k$ ( $10^{-12}$ cm <sup>3</sup> ·molec <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )
293	4.78	118	$3.07 \pm 0.23$
	4.81	122	
	5.11	152	
	5.30	151	
	5.76	179	
	5.78	172	
	6.18	182	
	6.71	211	
333	4.31	162	$4.16 \pm 0.25$
	4.52	182	
	5.00	186	
	5.47	240	
	5.97	241	
	6.38	269	
	3.75	213	
	3.79	188	
373	3.93	181	$5.94 \pm 0.50$
	4.25	209	
	4.64	257	
	4.94	299	
	5.33	326	
	5.75	332	
	3.24	211	
	3.74	238	
423	4.17	297	$7.85 \pm 0.55$
	4.38	334	
	4.56	356	
	5.01	399	

表 1 (续)

	5.19	397	
	3.50	307	
	3.55	328	
473	3.73	356	$9.52 \pm 0.37$
	3.80	358	
	4.00	382	
	4.12	405	

速率常数  $k$  值列于表 1。反应速率常数  $k$  与温度的 Arrhenius 关系示于图 1。在 293K—473K 范围内, 用最小二乘法线性拟合得到的反应速率常数的 Arrhenius 关系为

$$k = \left( \begin{matrix} 6.41 & +0.67 \\ & -0.61 \end{matrix} \right) \times 10^{-11} \exp[-(6.4 \pm 0.3) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT] \text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

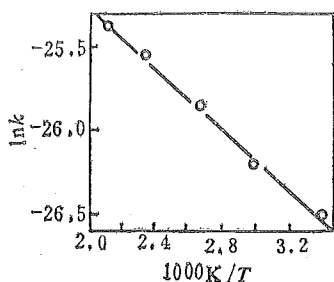


图 1  $\text{O}(^3p)$  和丙烯醇化学反应速率常数的 Arrhenius 关系图

表 1 和上式中的误差为标准偏差, 即  $1\sigma$ 。

既然丙烯醇具有一个乙烯基和一个羟基, 它与  $\text{O}(^3p)$  原子的反应是否类似于  $\text{O}(^3p)$  原子与  $\text{C}_2\text{H}_4$  或醇分子反应, 表 2 列出了不同作者测得的  $\text{O}(^3p)$  原子与丙烯醇、乙烯及丙醇的反应速率常数。

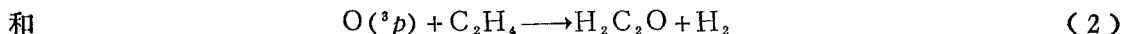
表 2 数据表明, 在 298K 下,  $\text{O}(^3p)$  与丙稀醇反应速率常数约是  $\text{O}(^3p)$  与乙稀反应速率常数的 3—5 倍, 高温下则更高, 而比  $\text{O}(^3p)$  与丙醇反应的速率常数高数十倍直至近两个数量级。下文就反应分子的结构和可能的反应机理对此进行讨论。

表 2  $\text{O}(^3p)$  原子与乙烯、丙醇及丙烯醇的化学反应速率常数

作 者	$k(T)$	$k(298\text{K})$
$\text{O}(^3p) + \text{乙 烯}$		
Perry 等 <sup>[4]</sup>	$1.6 \times 10^{-14} T^{1.0} \exp(-4.18 \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT)$	$8.2 \times 10^{-13}$
Browarzik <sup>[5]</sup>	$(8.4 \pm 2.7) \times 10^{-12} \exp[-(6.3 \pm 0.4) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT]$	$6.6 \times 10^{-13}$
陈从香等 <sup>[1]</sup>		$9.2 \times 10^{-13}$
$\text{O}(^3p) + \text{丙 醇}$		
Roscoe 等 <sup>[6]</sup>	$(1.32 \pm 0.12) \times 10^{-12} \exp[-(12.5 \pm 0.4) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT]$	$8.5 \times 10^{-15}$
陈从香等 <sup>[10]</sup>	$\left( \begin{matrix} 3.22 & +1.67 \\ & -1.08 \end{matrix} \right) \times 10^{-11} \exp[-(15.0 \pm 1.3) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT]$	$7.5 \times 10^{-14}$
$\text{O}(^3p) + \text{丙 烯 醇}$		
本工作	$\left( \begin{matrix} 6.41 & +0.67 \\ & -0.61 \end{matrix} \right) \times 10^{-11} \exp[-(6.4 \pm 0.3) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT]$	$3.17 \times 10^{-12}$

$k$  的单位:  $\text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

首先讨论  $O(^3p)$  与乙烯的反应机理。通常认为  $O(^3p)$  原子和  $C_2H_4$  的反应通道为

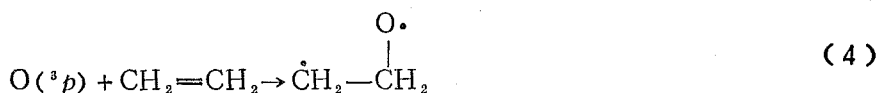


Buss 等人<sup>[7]</sup>用交叉分子束装置, 结合质谱技术, 测定了  $O(^3p)$  与  $C_2H_4$  反应产物的角度分布, 得出在单次碰撞条件下, 该反应的通道仅是



的结论, 并认为通道 (1) 涉及 H 原子从一个碳原子转移到另一个碳原子的过程, 反应位垒高, 实验检测到的  $CH_3$  实为  $C_2H_3O$  的次级反应产物, 而通道 (2) 是三中心去  $H_2$  过程, 反应位垒高。近年来, Endo 等人<sup>[8]</sup>用微波动力学光谱方法对  $O(^3p)$  和  $C_2H_4$  反应机理进行了研究, 认为存在 (1) 和 (3) 两个通道。

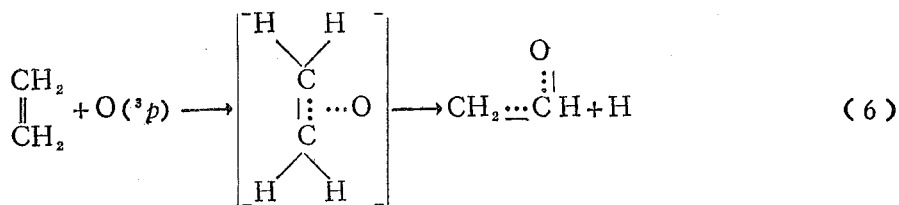
我们认为通道 (3) 是主要反应通道。理由是: 在反应过程中,  $O(^3p)$  原子首先进攻  $CH_2=CH_2$  的  $\pi$  键, 发生游离基加成反应



这一步是放热反应,  $\Delta E = E_{\text{生成键}} - E_{\text{被破坏的键}} = E_{C-O} + E_{C-C} - E_{C=C} = 359 + 347 - 610 = 96(\text{kJ})$ , 这部分热量可能转化为生成物的振动能而使其分解,



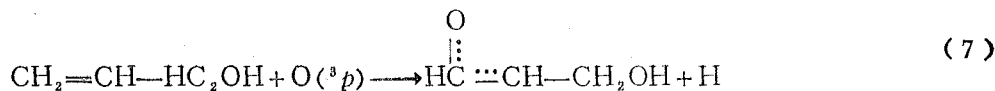
并形成  $C-C-O$  的 3 中心 4 电子  $\pi$  键。4 和 5 两步反应也可以看做是类似于协同反应



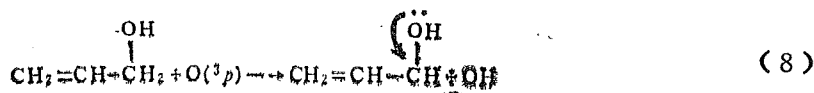
的一步过程。

我们在 [10] 中对  $O(^3p)$  和丙醇反应速率常数作了详细讨论。按分子性质加和性原理, 估算了  $O(^3p)$  对各类  $C-H$  键上的 H 原子抽提反应速率常数的 Arrhenius 参数。其中羟基  $\alpha$  位的 H 原子被抽提的活化能为  $8.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 指前因子为  $8.97 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 其它 H 原子被抽提的活化能为  $21 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$  以上。

丙烯醇分子可分成两部分, 即乙烯基和  $-CH_2OH$  基来考虑。与  $O(^3p)$  原子反应, 相应可按两个反应通道来分析。乙烯基的双键受到  $O(^3p)$  的攻击, 发生类似 (3) 的反应,



假定反应速率常数同反应 (3) 的速率常数。 $-CH_2OH$  和  $O(^3p)$  反应为 H 原子抽提反应







该反应产物分子  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}$  的三个 C 原子均是  $sp^2$  杂化, O 原子则以不等性  $sp^2$  杂化轨道与  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}$  基团及 H 原子成键, 余下的  $p$  轨道上的一对电子则与三个 C 原子形成共轭体系  $\pi_4^2$  大  $\pi$  键, 且这四个原子均在一个平面上。该共轭体系的离域能大, 通道 (8) 要比通道 (7) 有利。O( $^3p$ ) 和丙醇反应时, 产物无大  $\pi$  键共轭结构形成, 所以 O( $^3p$ ) 与丙烯醇反应比与丙醇反应有利得多, 反应速率常数也就大得多。我们按文献[5]报道的 O( $^3p$ ) 与乙烯反应速率常数, 从测出的 O( $^3p$ ) 原子和丙烯醇反应速率常数中扣除掉这部分贡献, 拟合出 O( $^3p$ ) 和单个羟基  $\alpha$  位 H 原子反应的 Arrhenius 参数, 指前因子为  $2.9 \times 10^{-11} \text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 活化能为  $7.8 \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。与丙醇的单个羟基  $\alpha$  位 H 原子被抽提活化能相比二者相近, 而指前因子约大 31 倍。

以上分析似乎可以解释表 2 中所列乙稀、丙醇和丙烯醇与 O( $^3p$ ) 原子反应速率常数的差异。我们认为还需要更多更精密的实验测定和深入一步的理论研究来弄清这一有趣的课题。

### 参 考 文 献

- [1] 陈从香、罗志坚、戴静华、刘军, 中国科学技术大学学报, 18 (1988), 115.
- [2] 陈从香、罗志坚、戴静华、俞书勤, 化学物理学报, 1 (1988), 93.
- [3] Kaufman F, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 247 (1958), 123.
- [4] Perry R A, 8th International Symposium on Gas Kinetics, Nottingham, Abstracts, K40, 1984.
- [5] Browarzik R and Stuhl F, 8th International Symposium on Gas Kinetics, Nottingham, Abstracts, K49, 1984.
- [6] Ayub A L and Roscoe J M, *Can. J. Chem.*, 57 (1979), 1269.
- [7] Buss R J, Baseman R J, He G (何国钟) Lee Y T (李远哲), *J. Photochem.*, 17 (1981), 389
- [8] Endo Y *et al.*, *J. Chem. Phys.*, 85 (1986), 4446.
- [9] Roscoe J M, *Can. J. Chem.*, 61 (1983), 2716.
- [10] 陈从香、高义德、朱梦霞、王利、俞书勤、化学物理学报, 3 (1990), 186.

# The Kinetic Study on Reaction of $O(^3p)$ With Allyl Alcohol

Chen Congxiang Gao Yide Zhu Mengxia Yu Shuqin

(*Department of Modern Chemistry*)

## Abstract

The measured data of the second order rate constant of reaction between  $O(^3p)$  and allyl alcohol by using discharge flow-chemiluminescence technique are presented. The Arrhenius expression of the rate constants is as follows

$$k = \left( 6.41 \begin{matrix} +0.67 \\ -0.61 \end{matrix} \right) \times 10^{-11} \exp(-6.4 \pm 0.3) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} / RT \text{ cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

In addition, the mechanism of this reaction is discussed.

**Key words:**  $O(^3p)$  atom, allyl alcohol, reaction kinetics.

## La-Cu-O催化剂的结构和形貌\*

陈勇 林培琰 俞寿明

(近代化学系)

### 摘 要

研究了La-Cu-O (La/Cu=1.0) 催化剂以及用H<sub>2</sub>还原, 加痕量Pt后的催化剂, 它们的体相和表面结构, 表面铜平均价态。测定了这三个催化剂的形貌、晶粒大小和分布。从而得到以低价态Cu<sup>+</sup>, Cu<sup>0</sup>为主, 并且存在痕量Pt的No.3样品对于CO-O<sub>2</sub>, NO-CO反应活性最高的结论。此外, 比表面大、晶粒轮廓不规整、有毛刺、晶粒大小分布范围较宽的催化剂, 由于提供了更多的活性中心, 而有利于提高反应活性。

**关键词:** 催化剂, CO氧化, NO还原, 形貌, 结构, 铜。

**中图法分类号:** O643.36

### 1 引言

含稀土的ABO<sub>3</sub>, A<sub>2</sub>BO<sub>4</sub>等复合氧化物催化剂已被发现具有一氧化碳和烃类氧化、甲醇氧化、氨氧化、氧化氮还原、氧化二氮分解、加氢、氢解以及二氧化硫还原等催化活性。这类催化剂一般具有高热稳定性、良好的晶型、独特的电学及磁学性质等特点。因此是研究结构和性能关系的理想样品。其中, 同时具有CO-O<sub>2</sub>和NO-CO反应活性, 能够除去有害的CO, HC和NO的催化剂<sup>[1-3]</sup>, 在环境保护方面有重要应用。它可以取代贵金属Pt, Pd, Ru等催化剂。含铜的复合氧化物催化剂具有很高的氧化和还原活性。Mizuno等<sup>[4]</sup>发现LaMn<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>O<sub>3</sub>对CO-O<sub>2</sub>和NO-CO反应同时具有高活性。并提出体相和表面的铜氧化数可以用取代某些不同价态的元素来控制, 而不影响La<sub>2-x</sub>A'<sub>x</sub>Cu<sub>1-x</sub>B'<sub>2</sub>O<sub>4±δ</sub> (A': Sr, Ce; B': Al, Zr)的K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub>型的结构<sup>[5]</sup>。此外, YaO等<sup>[6]</sup>在铂钨锅中焙烧La<sub>0.7</sub>Pb<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub>样品, 或者在该样品上浸渍100ppm Pt后再焙烧, 均能使CO氧化活性提高, 并且增强抗硫中毒的功能。但是在La<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub>中加微量Pt, 活性仅略有提高<sup>[7]</sup>, 在LaMn<sub>0.5</sub>Cu<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>中加微量Pt, 反而使CO氧化活性下降<sup>[7]</sup>。

我们曾分别对La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub>, La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub>, Nd<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub>和La-Cu-O催

1989年9月10日收到。

\*国家自然科学基金项目;科学院“七五”重大课题之分项目。

剂上的 CO-O<sub>2</sub> 和 NO-CO 反应活性, 生成 N<sub>2</sub> 的选择性进行研究<sup>[6]</sup>. 发现用原子比 La/Cu = 1.0, 共沉淀法制备的催化剂 (No.1), 具有较高的 CO 氧化和 NO 还原活性, 并且生成 N<sub>2</sub> 的选择性在 85% 以上. No.1 催化剂在纯 H<sub>2</sub> 气流中, 500℃ 还原 2 h (No.2), 活性有所提高. 将 No.1 催化剂再浸渍 H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub> 水溶液, 在纯 H<sub>2</sub> 气流中, 500℃ 还原 2 h (No.3), 使含 Pt 量为 50ppm, 它的活性更为提高. 氧化活性优于 Pt(0.15%)/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 而 Pt/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的还原活性是很差的. 因而此类催化剂具有开发前景. 为了对该系列催化剂的作用机制有所了解, 本文研究了该系列催化剂的形貌和结构.

## 2 实验

用 D/max-rA 旋转阳极 X 射线衍射仪 (XRD) 进行催化剂的相分析. 使用管电流 100mA, CuKα 辐射.

用 HITACHI H-800 型透射电子显微镜 (TEM) 进行电子衍射选区分析. 电子波长  $\lambda = 0.0251 \text{ \AA}$ , 相机长度  $L = 0.851 \text{ m}$ ,  $L \cdot \lambda = 21.36 \text{ mm \AA}$ .

用 HITACHI X-650 型扫描电子显微镜 (SEM) 对催化剂形貌进行观察. 加速电压 20kV, 放大倍数为 12.0k. 并用 H-800 (TEM) 作了催化剂的粒度分布估计.

用 VG ESCALAB MKII X 光电子能谱仪 (XPS) 研究了结合能, Cu 的平均表面价态. 光源 MgKα, 能量  $h\nu = 1253.6 \text{ eV}$ , 每次测定均用表面污染碳 C<sub>1s</sub> 峰作电荷校正.

## 3 结果

### 3.1 催化剂的相结构

三个样品的 XRD  $d$  值和  $I/I_0$ . 见表 1. 由表 1 参数对照 JCRDS 卡片可知: No.1 样品的相结构为 La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> 和 CuO 的混合物; No.2 样品为 Cu<sub>2</sub>O, Cu<sup>0</sup> 和 La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的混合物, 并含少量 CuO. No.3 样品的主组成和 No.2 类似, 但含少量 La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> ( $d = 2.867$ 、 $2.700$ 、 $2.669$  等).

表 1 XRD 参数面间距  $d$  值 (Å) 和相对强度  $I/I_0$ .

No.1	$d(\text{Å})$	3.654	3.289	2.872	2.688	2.191	2.161	2.080	1.900	1.590	1.579
	$I/I_0$	26	16	100	23	14	25	17	30	17	18
	$d(\text{Å})$	2.524	2.322	1.864	1.503						
	$I/I_0$	87	100	41	38						
No.2	$d(\text{Å})$	3.255	3.176	2.815	2.486	2.274	2.131	2.081	1.925	1.879	
	$I/I_0$	66	100	14	9	63	13	73	13	43	
	$d(\text{Å})$	1.865	1.803	1.656							
	$I/I_0$	54	26	16							
No.3	$d(\text{Å})$	3.266	3.182	2.932	2.867	2.876	2.700	2.669	2.278	2.136	
	$I/I_0$	69	100	18	30	26	16	15	63	22	
	$d(\text{Å})$	2.084	1.869	1.805	1.660						
	$I/I_0$	100	56	38	24						

从 TEM 电子衍射选区分析照片可见到, No.1 样品的衍射点较杂乱, 没有形成多晶环。这些杂乱衍射点很可能是  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  和  $\text{CuO}$  的衍射点交叠在一起的结果。No.2 和 No.3 样品均在选区形成多晶环。圆环的半径  $R$  和  $[hkl]$  晶面族面间距的关系符合下式:

$$L \cdot \lambda = R \cdot d \quad (1)$$

按前述, 仪器常数  $L \cdot \lambda = 21.36 \text{mm} \text{Å}$ 。故 (1) 式可写成

$$d(\text{Å}) = \frac{L \cdot \lambda}{R} = \frac{21.36}{R} \quad (2)$$

(2) 式中衍射环  $R$  的数值系用读数显微镜 (精确度为  $0.01 \text{mm}$ ) 直接测量底片得到。计算 No.2 和 No.3 样品的  $d$  值见表 2。对照 JCRDS 卡片也可以证明 No.2, No.3 样品中均有  $\text{Cu}_2\text{O}$  和  $\text{Cu}^0$ 。由于 No.3 样品中的 Pt 含量极为低微, 所以无论是用 XRD 或 TEM, 均无法检测到。

表 2 No.2 和 No.3 样品的 TEM  $d$  值(Å)

JCRDS	JCRDS 卡片值	No.2	No.3
晶相	$d(\text{Å})$	$d(\text{Å})$	$d(\text{Å})$
$\text{Cu}_2\text{O}$	2.465	2.470	2.470
	1.510	1.514	1.504
Cu	2.088	2.077	2.077
	1.808	1.801	1.808
	1.090	1.089	
	1.043		1.057

从 XRD 和 TEM 物相分析说明:

(i) 以共沉淀法  $\text{La}/\text{Cu} = 1$  所制得的 No.1 样品晶相不是  $\text{ABO}_3$  钙钛矿型, 而是  $\text{A}_2\text{BO}_4$  尖晶石型和 BO 的混合物。

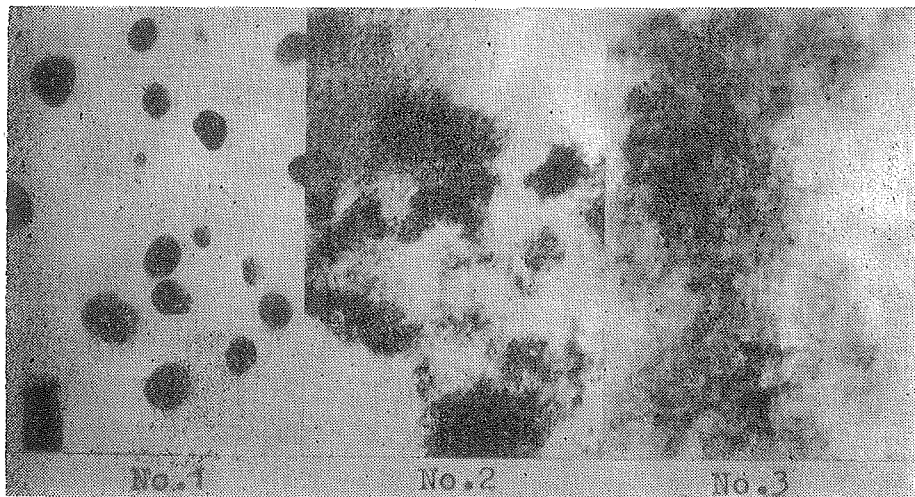


图 1 三种样品的形貌照片(均放大50000倍)

(ii) No.1 样品还原成 No.2 样品后,  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  晶相被破坏,  $\text{Cu}^{2+}$  被还原, 形成  $\text{Cu}_2\text{O}$ ,  $\text{Cu}^0$  和  $\text{La}_2\text{O}_3$  为主的混合物。

(iii) No.3 样品的晶相和 No.2 类似。

### 3.2 催化剂的形成和晶粒分布

用 SEM 仪测定的表面形貌照片分别见图 1, 晶粒分布见图 2。

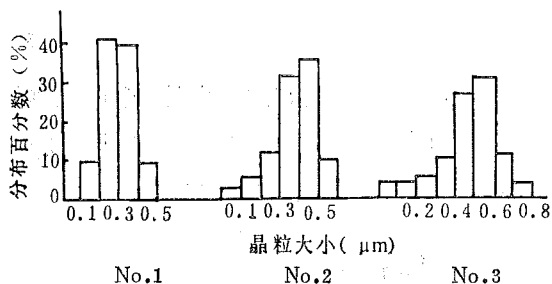


图 2 催化剂的晶粒大小分布

从形貌照片可看到 No.1 的晶粒大小较均匀, 颗粒轮廓规整, 晶粒大小分布在  $0.1-0.5\mu\text{m}$  之间。其中  $0.2-0.4\mu\text{m}$  的晶粒占  $\sim 80\%$ 。No.2 样品的轮廓不规整、不光滑、边缘有毛刺, 还存在多角形晶粒。这可能是用  $\text{H}_2$  还原后, 晶格中的部份  $\text{O}^{2-}$  被移去, 生成氧空位的表面缺陷。No.2 的比表面比 No.1 大 5 倍, 也说明了这一点。(经测定, No.1 的比表面为  $2.1\text{m}^2/\text{g}$ , No.2 为  $10.6\text{m}^2/\text{g}$ )。No.2 的晶粒分布在  $0.05-0.6\mu\text{m}$  间。其中  $0.3-0.5\mu\text{m}$  的晶粒占  $\sim 68\%$ 。No.3 样品的颗粒轮廓也不规整, 有大量毛刺, 晶粒分布范围更宽, 在  $0.05-0.8\mu\text{m}$  间, 其中  $0.4-0.7\mu\text{m}$  的颗粒占  $\sim 50\%$ , 平均粒度比 No.2 大些, 比表面为  $7.1\text{m}^2/\text{g}$ 。

### 3.3 催化剂的表面相和表面价态

用 XPS 测定的结合能及 Cu 的表面平均价态见表 3。

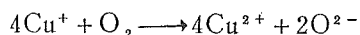
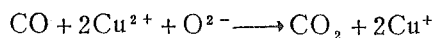
表 3 结合能和 Cu 的表面平均价态

样品	结 合 能 (eV)			铜的表面平均价态
	$\text{Cu}2p_{3/2}$	$\text{La}3d_{5/2}$	$\text{O}1s$	
No.1	933.4	835.6	531.3	1.7
No.2	932.6	835.1	530.4	1.5
No.3	932.2	834.7	530.8	1.3

将样品的  $\text{Cu}2p_{3/2}$ ,  $\text{La}3d_{5/2}$  结合能各自和手册中  $\text{CuO}$  ( $933.6\text{eV}$ ),  $\text{Cu}_2\text{O}$  ( $932.2\text{eV}$ ) 和  $\text{La}_2\text{O}_3$  ( $834.9\text{eV}$ ) 相结合能值比较, 说明 No.1 的  $\text{Cu}2p_{3/2}$  结合能更接近  $\text{CuO}$  的结合能值。而 No.2, No.3 的  $\text{La}3d_{5/2}$  的结合能更接近  $\text{La}_2\text{O}_3$  的值。铜的表面平均价态规律也和结合能数据相一致。

## 4 讨论

(1) 体相和表面的晶相分析是一致的。将晶相组成和对  $\text{CO}-\text{O}_2$ ,  $\text{NO}-\text{CO}$  反应活性<sup>[1]</sup>相关联, 说明以低价态  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^0$  为主, 并且存在痕量 Pt 的 No.3 样品活性最高。以  $\text{Cu}^{2+}$  为主的 No.1 样品活性相对较低。说明在氧化还原循环中, 存在适当比例的  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^0$  及  $\text{Cu}^{2+}$ , 将有利于反应的进行及活性中心的再生。对  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  来说, 可能存在以下过程:



No.3 中存在的痕量 Pt, 本身也是良好的氧化活性中心。

(2) 催化剂表面形貌、比表面、晶粒大小和分布对反应活性有一定影响。一般来说, 比表面大、结构疏松、晶粒外形不光滑、有毛刺、晶粒分布较宽的催化剂, 由于提供了更多的活性中心, 有利于提高反应活性。

### 参 考 文 献

- (1) Yao Y F Y, *J. Catal.*, **39** (1975), 104.
- (2) Fu C M, Deeba M & Hall W K, *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Develop.*, **19** (1980), 299.
- (3) Tascon J M D, Tejuca L G & Rochester C H, *J. Catal.*, **95** (1985), 558.
- (4) Mizuno N, Fujiwara Y & Misono M, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, **316** (1989)
- (5) Mizuno N, Yamato M, Tanaka M & Misono M, *Chem. of Mater.*, **1** (1989), 232.
- (6) Yao Y F Y, *J. Catal.*, **36** (1975), 266.
- (7) Johnson D W, Gallagher P K, Wertheim G K & Vogel E M, *J. Catal.*, **48** (1977), 87.
- (8) 陈勇、林培琰、俞寿明, 石油化工, **12** (1989), 834.

## Structure and Morphology Of La-Cu-O Catalysts

Chen Yong    Lin Peiyan    Yu Shoumin

(*Department of Modern Chemistry*)

### Abstract

The bulk and surface structures and the average valence of copper on surface of three La-Cu-O catalysts (La/Cu=1.0) were studied by XRD, TEM and XPS.

The morphology and size distribution of crystal grain were measured by TEM and SEM.

It was concluded that the catalyst composed of  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^0$  and trace amount of Pt possessed the highest activities of the reactions of  $\text{CO-O}_2$  and  $\text{NO-CO}$ .

The catalyst had larger specific surface. The edge of the crystal grain was not smooth and the size distribution of crystal grain was more broad. Because it provided more active centers, a high reaction activity was exhibited.

**Key words:** catalyst, oxidation of CO, reduction of NO, structure, morphology, copper.



# 带电粒子在电磁波驻波中的随机运动

汪秉宏

(近代物理系)

## 摘 要

对带电粒子在电磁波驻波中的运动作为一个不可积哈密顿体系的动力学问题进行了研究。在庞加勒映射截面上考察了稳定周期岛、KAM环及混沌区随驻波场强的变化。对不同场强下随机轨道的李雅普诺夫指数和柯尔莫哥罗夫熵进行了数值计算。应用哈密顿变分原理对表征定态的不动点岛被混沌海淹没的临界参数进行了解析确定。

**关键词:** KAM 环, 随机轨道, 柯尔莫哥罗夫熵, 周期轨道劈裂, 哈密顿变分原理。  
**中图法分类号:** O316

## 1 电磁波驻波中粒子的运动方程

一个带电粒子在两个以上的波的势场中的运动, 一般来说是不可积的力学问题。带电粒子在空腔共振器产生电磁波驻波中的运动, 即属于这种情形。经典粒子在驻波中的运动, 可以是规则的, 也可以是混沌的。驻波中粒子的混沌运动, 对于粒子的随机加热是非常有意义的。例如大振幅的等离子体纵向驻波对于电子具有明显的随机加热效应<sup>[1]</sup>。因此, 讨论空腔共振器所产生的电磁波驻波中带电粒子的运动如何从有序转变为混沌是等离子体湍流加热和其它一些物理实验感兴趣的问题。

我们考虑一种最简单的空腔共振器: 一个平面偏振波在两块平行的镜面之间来回振荡而形成驻波。设镜面平行于  $xy$  平面, 取波的极化方向为  $y$  轴方向。这样的电磁波可由满足库仑规范的如下矢势描写:

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}_y A(z, t) = \mathbf{e}_y a \sin \omega t \sin kz \quad (1)$$

其中  $a$  是矢势振幅,  $\omega$  和  $k$  是电磁波的频率和波矢, 相速率  $\omega/k = c$  是光速。置于大振幅电磁波中的带电粒子必须处理为相对论性的, 它的哈密顿量是

$$H = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + \left(p_y - \frac{qA}{c}\right)^2 + p_z^2} \quad (2)$$

1989年9月13日收到。  
国家自然科学基金资助课题。

这里  $m_0$  为粒子静止质量,  $q$  为粒子电荷,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  是粒子的正则动量. 因为  $H$  与  $x$  和  $y$  无关, 故  $p_x$  和  $p_y$  是运动常数. 为简单起见, 可设它们是零. 这并不失去一般性, 因为我们总可通过洛伦兹变换而将这些常数消去.

由哈密顿量  $H(z, p_z, t)$  所得到的正则运动方程是

$$\begin{aligned} \dot{z} &= \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{cp_z}{\sqrt{m_0^2 c^2 + q^2 A^2 / c^2 + p_z^2}} \\ \dot{p}_z &= -\frac{\partial H}{\partial z} = -\frac{q^2 A \partial A / \partial z}{c \sqrt{m_0^2 c^2 + q^2 A^2 / c^2 + p_z^2}} \end{aligned} \quad (3)$$

引进无量纲时间  $\omega t \rightarrow \pi t$  和无量纲坐标  $kz \rightarrow \pi Z$ , 并令  $P = p_z / (mc)$ ,  $K = [qa / (mc^2)]^2$  则运动方程化为如下的无量纲形式:

$$\begin{aligned} \dot{Z} &= \frac{P}{\sqrt{1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z + P^2}} \\ \dot{P} &= -\frac{\frac{\pi}{2} K \sin 2\pi Z \sin^2 \pi t}{\sqrt{1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z + P^2}} \end{aligned} \quad (4)$$

这是一个不可积的一个自由度的非自治哈密顿体系. 表征动力学体系的不可积性的参数只有一个, 是电磁波驻波的场强  $K$ , 当  $K = 0$  时, 退化为可积体系. 由于哈密顿量是三个变量  $Z, P, t$  的函数, 相空间是三维的. 可以注意到这个方程组在  $Z$  和  $t$  的方向上都具有以 1 为周期的周期性. 还可以注意到方程具有下述两种对称性. 对于变换  $t \rightarrow -t, Z \rightarrow -Z$  及变换  $t \rightarrow -t, P \rightarrow -P$ , 方程皆保持不变. 因此, 对于相平面上的反射变换  $Z \rightarrow -Z, P \rightarrow -P$ , 方程也是不变的. 这表明相空间中的轨道关于  $Z$  轴和  $P$  轴都是对称的.

## 2 庞加勒截面上的映射

经典粒子在三维相空间中的轨道可以通过庞加勒 (Poincaré) 截面上的映射来表示. 运动方程 (4) 的庞加勒映射可以通过相平面上对应于整数时间的点  $(Z, P)$  的“单位时间映射”得到. 方程的对称性告诉我们这一哈密顿系统的庞加勒映射是以  $Z$  轴和  $P$  轴为对称线的可逆保面积映射<sup>[2]</sup>. 保面积映射具有不动点和无穷多个周期轨道, 其中一半是稳定的 (椭圆型), 另一半是不稳定的 (双曲型). 随着不可积性参数  $K$  的增加, 稳定不动点将失稳 (椭圆型转换为双曲型), 产生局域混沌, 并在其邻域发出新的倍周期或同周期的稳定不动点, 这就是导致混沌的倍周期分叉和同周期分叉<sup>[3]</sup>. 对于哈密顿体系或保面积映射, 轨道的失稳标志着局域混沌的起始. 对于电磁波驻波中的粒子运动, 一个稳定不动点及其周围的稳定周期岛标志着相空间中的一个捕获区, 而不稳定不动点及周围的局域混沌则意味着粒子的随机运动. 在这些随机区域中, 粒子的运动是非常无规的, 无论初始条件如何靠近, 它们的相空间轨道都将随时间作指数的分离. 随着场强  $K$  的增长, 这些随机区将弥散和并合, 吞没那些残存的捕获区, 而导致更大范围的混沌.

图 1 和图 2 分别显示了对微分方程 (4) 进行积分所得到的  $K = 1$  和  $K = 2$  的庞加勒截面映射. 周期轨道、KAM 轨道、混沌轨道在图中是清楚可辨的. 可以看到有一些 KAM 曲线包围着混沌海中的一些岛屿, 另一些连通 KAM 曲线则成为阻拦混沌海水向外泛滥的堤坝.

$K=1$ 的映射图中心是拓扑为圆的KAM曲线，包围着稳定不动点 $Z=0, P=0$ 而形成相空间的中心岛。从中心向外，图中依次显示了较大的两组周期2岛和两组周期3岛。周期3岛链外面有一条连通KAM曲线，如堤坝一样包围着混沌海及稳定岛。在 $K=2$ 的映射图中，可以看到混沌区域更为扩大。图1中的那条连通KAM曲线已经破裂而被混沌海水所淹没。图2中的所有混沌点都属于同一条轨道。新的混沌海堤坝让位于 $|P|$ 值更大的连通KAM曲线。而与图1大为不同的是，中心岛已经分裂成两个周期2岛。

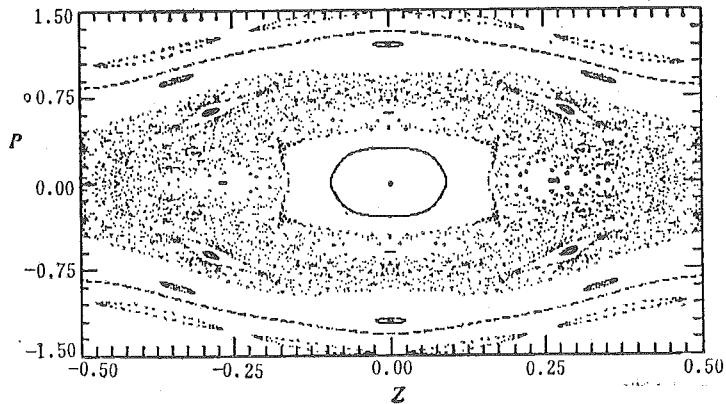


图1  $K=1$ 的运动方程(4)的庞加勒截面上的映射

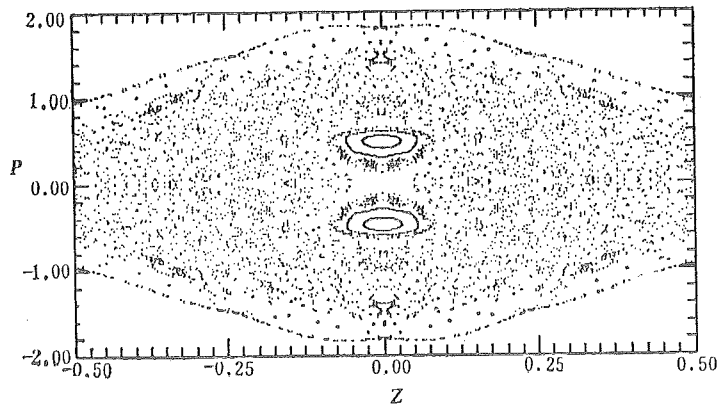


图2  $K=2$ 的运动方程(4)的庞加勒截面上的映射

### 3 随机轨道的柯尔莫哥罗夫熵

不动点 $Z = \pm 0.5, P = 0$ 是双曲型不动点，总是不稳定的，从其邻域出发的轨道是主要的随机轨道。表征随机运动区中两条初始邻近的轨道的发散性的量是李雅普诺夫(Ляпунов)特征指数 $\sigma$ ，它的定义是

$$\sigma = \lim_{\|\Delta x\| \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|x(x_0, t) - x(x_0 + \Delta x, t)\|}{\|\Delta x\|} \quad (5)$$

其中 $x_0 = (Z_0, P_0)$ 是随机轨道的初始点， $x_0 + \Delta x$ 则是另一条相邻近的轨道的初始点，偏离 $\Delta x$ 很小。 $x(x_0, t) = (Z(Z_0, P_0, t), P(Z_0, P_0, t))$ 是微分方程(4)所给出的初始点为 $x_0$ 的 $t$ 时刻的解。

三维相空间中的哈密顿流具有两个不同的李雅普诺夫指数  $\sigma_1, \sigma_2$ 。对于随机区，可以证明这两个特征指数正负相反而绝对值相等：

$$\sigma_1 > 0, \sigma_2 = -\sigma_1 < 0 \quad (6)$$

对于哈密顿体系的单连通随机区，又可证明正李雅普诺夫指数与表征随机轨道混沌程度的柯尔莫哥罗夫(Колмогоров)熵  $h$  是相等的<sup>[4]</sup>。

图3显示了  $K = 1, 2, 3, 4, 5$  的混沌海的柯尔莫哥罗夫熵

$$h(\|\Delta \mathbf{x}\|, t) = \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t) - \mathbf{x}(\mathbf{x}_0 + \Delta \mathbf{x}, t)\|}{\|\Delta \mathbf{x}\|} \quad (7)$$

作为时间  $t$  的函数的数值计算结果。图中随机轨道的初始点都取作  $Z_0 = -0.49, P_0 = 0.01$ ，初始偏离取  $\|\Delta \mathbf{x}\| = 10^{-4}$  自下而上的五条曲线分别对应  $K = 1, 2, 3, 4, 5$ 。当  $t$  较小时，

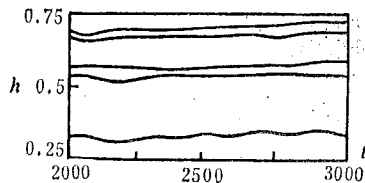


图3 不同K值下混沌轨道的柯尔莫哥罗夫熵h随时间t的变化

$h$  的涨落较大，但当  $t$  足够大， $h$  将收敛于确定的极限。图中显示了  $2000 \leq t \leq 3000$  这一时域中的结果，可以看到它们的值分别收敛于： $h(K=1) = 0.34, h(K=2) = 0.55, h(K=3) = 0.60, h(K=4) = 0.71, h(K=5) = 0.73$ 。这些计算结果表明电磁波驻波场强  $K$  的增长将引起随机轨道混沌程度的增长，从而导致粒子的加热效应的增长。关于粒子的随机加热效应与场强的关系的计算，将在另文中给出。

#### 4 混沌海淹没中心岛临界参数的解析确定

物理上感兴趣的一个问题是：庞加勒截面映射的中心岛何时劈裂为周期2稳定岛？这是因为，对于保面积映射，不动点的倍周期分岔失稳就意味着局域混沌的起始。中心岛被混沌海开始淹没的时刻，正好是电磁波驻波场中粒子的稳定的定态失稳而进入混沌运动的标志。

用数值积分方法，可以画出不动点  $Z=0, P=0$  的倍周期分岔树，从而确定中心岛被混沌海淹没的临界参数是  $K \sim 1.3$ 。

另一种方法是讨论不动点  $Z=0, P=1$  的稳定性。对于不动点邻域的点，可设  $Z \ll 1, P \ll 1$ ，因而可以对方程(4)作泰勒(Taylor)展开，得

$$\begin{aligned} \dot{Z} &= P \\ \dot{P} &= -\pi^2 K \sin^2(\pi t) Z \end{aligned} \quad (8)$$

或者写成二阶微分方程

$$\ddot{Z} + \pi^2 K \sin^2(\pi t) \cdot Z = 0 \quad (9)$$

这是马提厄(Marthieu)方程，其稳定性已得到很好的研究。从制表数值<sup>[5]</sup>可以求出稳定解仅当  $K < 1.316$  可能存在。

本文要叙述的是用哈密顿变分原理来计算周期轨道劈裂的解析方法<sup>[6]</sup>。这种解析方法可以逐次给出对临界  $K$  值的收敛极快的逼近。

经典力学的哈密顿原理告诉我们：拉格朗日函数是  $L(x_i, \dot{x}_i, t)$  的力学体系，对于物理轨道而言，其作用量

$$S = \int_{x_i(t_0)}^{x_i(t_1)} L dt \quad (10)$$

位于极值驻点, 即其一阶变分  $\delta S = 0$ 。问题在于这个驻点是极小点还是极大点或是鞍点呢? 雅可比已经知道, 仅仅对于足够短的时间间隔  $t_1 - t_0$ , 这个驻点才可能是极小点<sup>[7]</sup>。对于充分长的时间, 这个驻点一般说来都是鞍点<sup>[8]</sup>。而我们感兴趣的恰恰是非线性动力学的长时间的渐近行为。可以证明, 由方程 (4) 所描述的哈密顿体系, 仅当  $K = 0$  化为可积体系的情形, 物理轨道的无穷长时间的作用量  $S$  是极小值, 而对于  $K \neq 0$  的不可积体系, 物理轨道的  $S$  是鞍点。

相应于运动方程 (4) 的拉格朗日函数是

$$L = -\sqrt{(1 - \dot{Z}^2)(1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z)} \quad (11)$$

对于周期 2 轨道, 其作用量的二阶变分是

$$\delta^2 S(K) = \int_0^2 \left[ \left( \frac{\partial^2 L}{\partial Z^2} \right) (\delta Z)^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial Z \partial \dot{Z}} (\delta Z) (\delta \dot{Z}) + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Z}^2} (\delta \dot{Z})^2 \right] dt \quad (12)$$

其中

$$\frac{\partial^2 L}{\partial Z^2} = -\frac{\pi^2 K \sqrt{1 - \dot{Z}^2} \sin^2 \pi t}{\sqrt{1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z}} \left( \frac{\cos^2 \pi Z}{1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z} - \sin^2 \pi Z \right) \quad (13)$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial Z \partial \dot{Z}} = \frac{\pi K \dot{Z} \sin^2 \pi t \sin 2\pi Z}{2\sqrt{(1 - \dot{Z}^2)(1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z)}} \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Z}^2} = (1 - \dot{Z}^2)^{-3/2} \sqrt{1 + K \sin^2 \pi t \sin^2 \pi Z} \quad (15)$$

因此对于不动点  $Z = 0, P = 0$  有

$$\delta^2 S(K) = \int_0^2 [-\pi^2 K \sin^2 \pi t (\delta Z)^2 + (\delta \dot{Z})^2] dt \quad (16)$$

由此可见, 当  $K = 0$ , 显然有  $\delta^2 S(K) \geq 0$ 。因而作用量是极小值。而当  $K \neq 0$ , 这一般是鞍点。如果不动点  $Z = 0, P = 0$  已经劈裂为周期 2 轨道, 那么  $S(K) = \int_0^2 L dt$  必须是一个鞍点, 亦即  $\delta^2 S(K) = 0$ , 这使我们得到

$$K = \frac{W_1}{\pi^2 W_2} \quad (17)$$

其中

$$W_1 = \int_0^2 (\delta \dot{Z})^2 dt \quad (18)$$

$$W_2 = \int_0^2 \sin^2 \pi t (\delta Z)^2 dt \quad (19)$$

可以设

$$\delta Z(t) = \sum_n (a_n \sin n\pi t + b_n \cos n\pi t) \quad (20)$$

于是有

$$W_1 = \int_0^2 \left[ \sum_n (n\pi) (a_n \cos n\pi t - b_n \sin n\pi t) \right]^2 dt = \pi^2 \sum_n n^2 (a_n^2 + b_n^2) \quad (21)$$

$$W_2 = \int_0^2 \sin^2 \pi t \left[ \sum_n (a_n \sin n\pi t + b_n \cos n\pi t) \right]^2 dt$$

$$= \frac{1}{2} \sum_n (a_n^2 + b_n^2) + \frac{1}{4} (a_1^2 - b_1^2) - \frac{1}{4} \sum_n [a_n (a_{n-2} + a_{n+2}) + b_n (b_{n-2} + b_{n+2})] \quad (22)$$

因此, 导致不动点  $Z=0, P=0$  失稳的倍周期分岔发生于临界  $K$  值:

$$K_c = 4 \min \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 (a_n^2 + b_n^2)}{3a_1^2 - b_1^2 + 2(a_2^2 + b_2^2) + \sum_{n=3}^{\infty} [a_n (2a_n - a_{n-2} - a_{n+2}) + b_n (2b_n - b_{n-2} - b_{n+2})]} \quad (23)$$

$K_c$  的上限可以通过截断富里叶级数而得到。这个过程收敛速度是很快的。仅保留  $n=1$  的富里叶模 ( $a_n = b_n = 0$ , 当  $n \geq 2$ ), 即给出

$$K_c < K_c^{(1)} = 4 \min \frac{a_1^2 + b_1^2}{3a_1^2 + b_1^2} \quad (24)$$

不难看出上限为

$$K_c^{(1)} = 4 \min \frac{1 + \beta^2}{3 + \beta^2} = \frac{4}{3} \approx 1.333$$

这个上限的第一次逼近对于精确值  $K_c = 1.316$  已经是一个很好的近似!

截取到  $n=3$  的富里叶模, 有  $K_c < K_c^{(3)}$ 。这里的  $K_c^{(3)}$  是上限的第三次逼近:

$$K_c^{(3)} = 4 \min \frac{a_1^2 + b_1^2 + 4(a_2^2 + b_2^2) + 9(a_3^2 + b_3^2)}{3a_1^2 + b_1^2 + 2(a_2^2 + b_2^2) + 2(a_3^2 + b_3^2) - (a_1 a_3 + b_1 b_3)} \\ = 4 \min f(\beta_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3) \quad (25)$$

其中  $f$  函数为

$$f(\beta_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3) = \frac{1 + \beta_1^2 + 4(\alpha_2^2 + \beta_2^2) + 9(\alpha_3^2 + \beta_3^2)}{3 + \beta_1^2 + 2(\alpha_2^2 + \beta_2^2) + 2(\alpha_3^2 + \beta_3^2) - (\alpha_3 + \beta_1 \beta_3)} \quad (26)$$

令  $f$  函数关于独立变量  $\beta_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3$  的偏导数为零, 可以求得当  $\alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 0$ ,  $\alpha_3 = -0.01993$  时,  $f(\beta_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3)$  取极小值:

$$f_{\min} = 0.33222986$$

因而

$$K_c^{(3)} = 4f_{\min} = 1.3289$$

这是对混沌海淹没中心岛的临界  $K$  值亦即定态不动点的倍周期分岔失稳  $K$  值的一个更好的逼近。

### 参 考 文 献

- [1] Schmidt G and Wang B H (汪秉宏), *Comments Plasma Phys. Controlled Fusion*, **8** (1983), 69.
- [2] Greene J M et al., *Physica*, **3D** (1981), 468.
- [3] 汪秉宏, *物理学报*, **37** (1988), 77.
- [4] Pesin B Ya, *Russ. Math. Survey*, **32** (1977), 55.
- [5] Tamir T, *Mathematics of Computation*, **16** (1962), 100.

- [6] Schmidt G, Nonequilibrium Problems in Statistical Mechanics, Vol. 3 (Horton C W Jr., Reichl L E eds.), Wiley, New York, 1984, 57.
- [7] Whittaker E J Analytical Dynamics, Cambridge Univ. Press(1964)Cambridge.
- [8] Helleman R H G, Topics in Nonlinear Dynamics Jorna S ed., Am. Inst. Phys.Conf.Proc. 46, New York, 1978, 264—285.

## Stochastic Motion of Charged Particles in Electromagnetic Standing Waves

Wang Binghong

(*Department of Modern Physics*)

### Abstract

The motion of charged particles in electromagnetic standing waves is discussed as a dynamic problem of nonintegrable Hamiltonian system. The changes of stable periodic islands, KAM tori and chaotic regions with field strength of standing wave are observed on Poincarè surface of section. Liapunov exponents and Kolmogorov entropy of stochastic orbits for different field strength are calculated numerically. The critical parameters where a fixed point island characterizing stationary state is submerged in chaotic sea is determined analytically by Hamiltonian variational principle.

**Key words:** KAM tori, stochastic orbits, Kolmogorov entropy, splitting of periodic trajectory, Hamiltonian variational principle.

## 冲击下c轴硫化镉单晶的相变特性

唐志平

Y.M. Gupta

(中国科学技术大学)

(美国华盛顿州立大学)

### 摘 要

采用前后压电石英计方法系统地研究了c轴硫化镉单晶在高速平面撞击下的相变特性,首次得到了这种材料的冲击 Hugoniot 曲线,并观察到与相变机制有关的应力松弛和双波结构现象。与弹塑性波不同的是,这种由于相变引起的双波结构波形的弹性前驱波,在一定压力范围内,其幅值不随传播距离而衰减。实验结果推断出,相变点同时可能又是屈服点,相变与塑性两种机制也许存在某种耦合作用。

**关键词:** 冲击相变, 硫化镉单晶, 石英计, 塑性耦合, 时间相关性。

**中图法分类号:** O521.2

硫化镉 (CdS) 晶体是一种重要的半导体材料, 高压下会从六角纤锌矿 (wurtzite) 结构转变为面心立方岩盐矿 (rock salt) 结构, 并伴有比容、电导率等一系列力学、物理性质的显著变化。八十年代初因发现经所谓压力淬火处理的 CdS 试样可能与高温超导有关而引起浓厚兴趣。在动高压范围内, 文献报道很少。1966 年 Kennedy 等人<sup>[1]</sup>发表了 c 轴和 a 轴 CdS 单晶的一个石英计纪录波形, 呈双波结构, 并推断出在动载下发生了相变。由于 CdS 材料相变区的本构行为未知, 他们的处理方法便存在质疑。1982 年 Dodson 等人<sup>[2]</sup>在冲击回收的 CdS 粉末试样中观察到高密度的缺陷分布并认为也许与相变有关。迄今为止尚未见到有关 CdS 材料冲击相变特性的系统研究。另一方面, 由于 CdS 晶体具有很高的屈服强度, 也许会对认识剪力对相变压力有无影响这一重要问题有所裨益<sup>[3]</sup>。

实验研究主要分两类进行, 第一类用 CdS 粉末均布于一种橡胶类弹性体 (BAMO: THF) 中制成复合材料, 利用基体的近似流体般性质, 研究 CdS 在受一维平面应变冲击波作用下无剪力存在时的响应。这部分的结果见文献[4]。第二类实验用 c 轴 CdS 单晶试样, 研究在一维平面撞击下有高剪应力存在时的响应。这部分的结果, 关于剪应力对相变起始压力的影响的讨论见文献<sup>[5]</sup>。本文主要介绍 c 轴 CdS 单晶在受平面冲击载荷作用下的相变 Hugoniot 数据、波传播等方面的特性。

1989年9月7日收到。



## 2 实验方法

$c$  轴 CdS 单晶试样由 Clevite 晶体公司提供, 并加工成直径 2.54cm, 厚度 0.1—0.17cm 的半圆片。试样呈棕色, 具纤锌矿晶格结构 (I 相)。并检验了样品的纯度与轴的取向, 未检测到杂质成分, 切片轴向与晶格  $c$  轴偏差在  $2^\circ$  以内。每一试样在试验前, 均用 Mettler H20 天平和 Panametric 公司 5033 型超声时间间隔仪测试其初始密度与声速, 测得的平均密度  $\rho_0 = 4.8275\text{g/cm}^3$ 。利用 10MHz 的超声探头测得纵波与横波波速分别为  $c_L = 4.4289\text{mm}/\mu\text{s}$  和  $c_T = 1.7680\text{mm}/\mu\text{s}$ 。

实验在美国华盛顿州立大学击波动力学实验室的 6.35cm 口径轻气炮装置上进行, 采用  $\phi 12.7\text{mm}$  短路型压电石英计测量试样表面的应力波形。实验布置如图 1 所示。CdS 试样随弹体以速度  $u_0$  撞出一个固定在靶座上的短路型石英应力计, 该应力计记录下撞击面上的应力历史。本文中称之为前石英计。为测量应力波在 CdS 样品内部的传播规律, 在样品后表面上, 也安装了一块相同的石英计, 称为后石英计。两应力计信号均通过  $50\Omega$  电缆馈至 400MHz 带宽的 Tektronix 7844 型双线示波器, 信号由 Polaroid 3300 或 612 胶卷记录。由于后应力计是随弹体一起高速飞行的, 为输出其信号, 特殊设计了一种碰撞接点。因为 CdS 是一种半导体材料, 具有强压电性, 因此在试样表面均镀屏蔽层, 以防止对石英计信号的干扰。通常短路型石英计只能用来测量 40kbar 以下的压力, 对于更高压力的实验, 在样品与前应力计之间插入一块蓝宝石 (sapphire) 填块, 以变换压力 (见图 1)。不过这时的前应力计测得的应力波形要换算到 CdS 与蓝宝石的撞击面上。我们曾把蓝宝石和石英计均当作非线性弹性材料进行这样的转换, 发现这种非线性影响是很小的, 可采用下式进行转换, 误差不大于 0.1%。

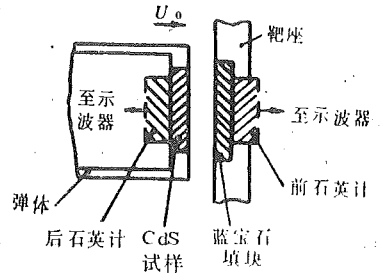


图 1 实验简图

$$\sigma_1(t) = 1.9782\sigma_2(\tau - d_2/11.4) \quad (1)$$

式中  $\sigma_1$  表示试样前表面应力,  $\sigma_2$  表示石英计测到的应力,  $d_2$  为蓝宝石填块厚度 (mm),  $t, \tau$  表示时间 ( $\mu\text{s}$ )。

短路型石英计由于电流斜升 (ramping) 现象严重, 使得记录波形的后面部分变得不可信。我们最近的研究表明, 这种短路型石英计已能用于测量后面时刻的应力历史, 其误差与初始应力相比小于  $1.2\%^{[6]}$ 。

## 3 实验结果

在 6.35cm 口径轻气炮上共进行了 8 次成功的实验。有两发 (实验 1 和 2) 撞击应力在 30kbar 以下, 按 [6] 方法经石英计数据处理后, 得到的是典型的弹性波波。这说明应力小于 30kbar 时, 材料未发生相变。其余的实验均超过 30kbar, 波形发生质的变化。图 2 所示为典型的记录波形 (实验 6)。图中虚线是前石英计记录波形 (已换算成应力), 实线所示的是经蓝宝石填块转换后的试样前后表面上的应力波形。图中前表面波形仅保留第一个台阶, 这是由于蓝宝石填块与石英计波抗的差异会引起多次反射, 使问题变得复杂。由此可见, 蓝

宝石填块的使用, 虽然可增大石英计的测力范围, 但是降低了有效观测时间。本例中, 填块厚约 1.6mm, 对应的有效测量时间约为  $0.28\mu\text{s}$ 。所幸的是, 在此时间内样品前表面上的应力松弛已趋向其平衡状态。

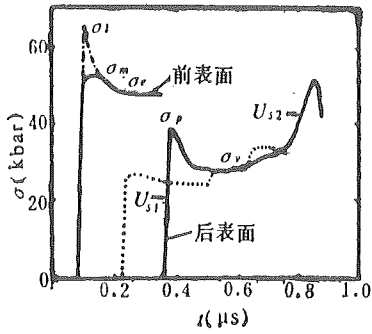


图 2 典型实验波形

图 2 可见, 撞击面上的应力首先上升到  $\sigma_m$ , 然后由于应力松弛逐渐下降到准平衡态应力  $\sigma_e$ 。  $\sigma_m$  是可测到的暂稳态应力, 图中所示的  $\sigma_i$  为第 I 相的理论暂稳态应力。后应力计记录显示出双波结构, 第一个波以弹性波速传播, 并可观察到应力松弛现象 (峰位应力  $\sigma_p$ , 平台应力  $\sigma_v$ )。

表 1 列出实验参数及直接测量的结果。第一击波波速的平均值为  $4.40\text{mm}/\mu\text{s}$ , 接近第 I 相  $c$  轴的声速值。对于第二个波来说, 仅 6 和 7 两次实验记下了完整的波形, 其他几次由于样品较厚或噪声干扰等原因, 未给出有价值的第二波的记录。根据半波高原则, 测得其第二波波速分别为  $1.68\text{mm}/\mu\text{s}$  和  $1.74\text{mm}/\mu\text{s}$ 。不过, 由于第二波波阵面不陡峭, 误差会较大。

表 1 实验参数及测量数据

实验序号	试样厚度 (mm)	填块厚度 (mm)	撞击速度 $u_0$ ( $\text{mm}/\mu\text{s}$ )	第一击波速度 $u_{s1}$ ( $\text{mm}/\mu\text{s}$ )	前表面		后表面	
					暂稳态应力 $\sigma_m$ (kbar)	平衡态应力 $\sigma_e$ (kbar)	峰值应力 $\sigma_p$ (kbar)	平台应力 $\sigma_v$ (kbar)
1. (87508)	1.511	0.	0.203	4.32	18.01	18.01	14.77	14.77
2. (87517)	1.160	0.	0.303	4.30	26.36	26.36	22.28	22.28
3. (87518)	1.160	0.	0.426	4.42	36.18	34.38	31.18	—
4. (87516)	1.194	1.59	0.361	4.37	42.90	39.40	—	—
5. (87540)	1.700	1.55	0.492	4.45	51.72	47.74	36.64	28.35
6. (87514)	1.194	1.59	0.496	4.43	53.78	48.01	38.80	28.02
7. (87532)	1.200	1.57	0.566	4.51	60.07	54.47	44.99*	28.72
8. (87541)	1.550	1.57	0.724	4.43	75.68	73.81	35.43	29.05

\* 此值已超过石英计标定范围, 仅作参考。

虽然试样前表面上的应力由于松弛作用, 随时间而变化, 但其应力、质点速度状态受到与其相接触的材料 (石英计或蓝宝石) 的制约, 只能沿处于弹性状态的石英计或蓝宝石的 Hugoniot 移动, 它们的 Hugoniot 方程分别为

$$\sigma = 148.76u + 23.56u^2 \quad (\text{石英计}) \quad (2)$$

$$\sigma = 445.9u + 37.85u^2 \quad (\text{蓝宝石}) \quad (3)$$

式中  $\sigma, u$  为轴向应力和质点速度, 单位分别为 kbar 和  $\text{mm}/\mu\text{s}$ 。利用表 1 中所测得的样品前表面的应力以及上述 Hugoniot 方程, 即可求得 CdS 的实验  $\sigma-u$  状态点。由此求出的暂稳态和平衡态数据列于表 2, 并在图 3 中分别用圆和方块符号表示, 这些状态点给出了  $c$  轴

CdS 单晶在  $\sigma-u$  平面上的 Hugoniot 曲线。图 3 中的虚划线为根据 Fuller<sup>[5]</sup> 弹性常数算出的 I 相弹性 Hugoniot 线, 虚点线为根据 Samara 和 Giar—dini<sup>[7]</sup> 静高压数据标出的静水压  $p-u$  曲线。由图可看出, 低于 30kbar 的实验, 其暂稳态与平衡态点相重合且落在 I 相  $\sigma-u$  Hugoniot 线上。高于 30kbar, 实验点越来越偏离 I 相  $H$  线, 并且  $\sigma_m$  和  $\sigma_e$  之间的距离一开始增大, 后来又减小。为了确定相变起始应力, 延伸  $\sigma_m-u$  和  $\sigma_e-u$  曲线, 交 I 相  $H$  线于  $T$  点, 我们假定  $T$  就是相变起始点,  $\sigma_T \approx 32.5$  kbar, 并算出对应的质点速度为  $\Delta u_T = 0.1525$  mm/ $\mu$ s。

后应力记录可给出第一击波到达时间, 并可观察双波结构现象。但是当波到达试样后表面后, 就存在复杂的波相互

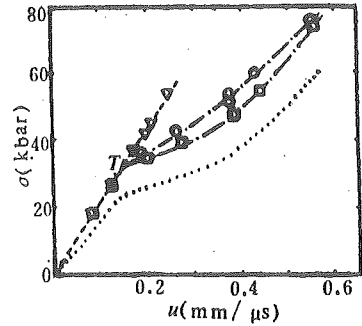


图 3 c 轴 CdS  $\sigma-u$  实验结果  
 $\circ$   $\sigma_m$ ,  $\square$   $\sigma_e$ ,  $\Delta$   $\sigma_{A4}$

表 2 c 轴 CdS 的 Hugoniot 数据\*

实验 序号	前表面(撞击面)						后表面					
	暂稳态	平衡态										
$\sigma_i$	$\sigma_m$	$\Delta u_m$	$v_m/v_0$	$\epsilon_m$	$\sigma_e$	$\Delta u_e$	$v_e/v_0$	$\epsilon_e$	$\bar{p}$	$\sigma_{A4}$	$\Delta u_{A4}$	
1	18.0	18.01	0.0840	0.9811	0.0189	18.01	0.0840	0.9811	0.0189	12.38	17.58	0.0843
2	26.7	26.36	0.1305	0.9688	0.0312	26.36	0.1305	0.9688	0.0312	17.51	26.35	0.1268
3	37.7	36.18	0.1915	0.9455	0.0545	34.38	0.2028	0.9003	0.0997	24.74	37.27	0.1745
4	51.6	42.90	0.2656	0.9060	0.0940	39.40	0.2733	0.8632	0.1368	29.76	—	—
5	70.5	51.72	0.3772	0.8385	0.1615	47.74	0.3859	0.7927	0.2073	38.10	45.61	0.2128
6	71.0	53.78	0.3767	0.8517	0.1483	48.01	0.3893	0.7914	0.2086	38.37	45.63	0.2132
7	82.0	60.07	0.4329	0.8277	0.1723	54.47	0.4451	0.7772	0.2228	44.83	53.91	0.2480
8	105.0	75.68	0.5568	0.7826	0.2174	73.81	0.5608	0.7705	0.2295	64.17	42.22	0.1980

★相变点参数:  $\sigma_T = 32.5$ ,  $\Delta u_T = 0.1525$ ,  $v_T/v_0 = 0.9655$ ,  $\epsilon_T = 0.0345$ ,  $\bar{p}_T = 22.86$ 。

单位: 应力 kbar, 速度 mm/ $\mu$ s。

作用。由于 CdS 在相变时是一种时间相关材料, 这一点由第一波峰后的应力松弛可反映出来, 其本构关系未知, 因此后应力计的记录信息, 除了第一个峰值外(因它处于 I 相弹性

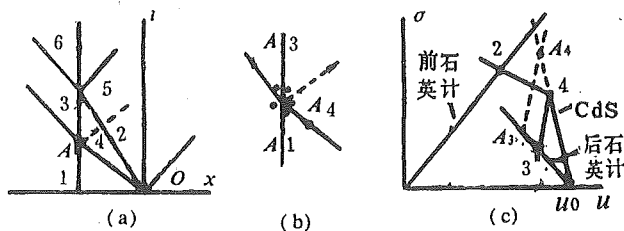


图 4 后表面入射波第一峰值应力  $\sigma_{A4}$  的决定

(a) 波作用图 (b) A 点邻域 (c)  $\sigma-u$  图

其波速与入射波一样。这样我们就可以根据 A 点邻域的跳跃条件, 从测到的应力  $\sigma_{A4}$  (即图

态), 不能直接利用。

图 4(a) 是样品后表面处的波相互作用示意图, 对于图中 A 点的一个微小邻域(见图 4(b)), 可假定区域  $A_4$  处于第 I 相弹性态, 因为入射波是弹性波, 而 c 轴 CdS I 相的波抗大于石英计, 故在该点反射的是一道卸载波, 所以  $A_4$  仍处于弹性状态,

2 中的  $\sigma_p$ ) 计算出状态  $\sigma_{A4}$  和  $u_{A4}$  (即入射波的第一峰值点):

$$u_{A4} = \frac{1}{2}(u_{A3} + u_{A1}) - \sigma_{A3}/(20\rho_0 u_{s1}) \quad (4)$$

$$\sigma_{A4} = -10\rho_0 u_{s1}(u_{A4} - u_{A1}) \quad (5)$$

式中  $u_{A3}$  可由  $\sigma_{A3}$  代入 (2) 式得到,  $\rho_0$ ,  $u_{s1}$  分别为 CdS 样品的初始密度和第一击波波速. 计算结果列于表 2 并在图 3 中用倒三角表示, 从图 3 中可见, 它们位于 I 相的弹性  $H$  线上.

$\sigma-u$  平面上的击波数据, 可以转换到  $\sigma-v$  平面上, 从而得到  $\sigma-v$  Hugoniot 曲线. 对于低于  $\sigma_T$  的实验点, 可利用 I 相弹性关系求出相应的比容. 对高于  $\sigma_T$  的实验点, 其比容可用下述跳跃条件来计算.

$$\frac{v}{v_0} = \frac{v_T}{v_0} - \frac{u - u_T}{u_{s2}} \quad (6)$$

$$u_{s2} = v_0(\sigma - \sigma_T)/(u - u_T) \quad (7)$$

式中  $v$  为比容,  $u_{s2}$  为第二击波波速, 下标  $T$  表示相变起始点参数, 具体数值见表 2 的脚注.

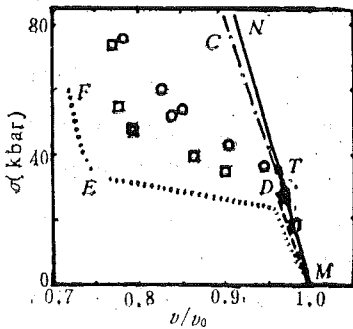


图 5 c 轴 CdS  $\sigma-v/v_0$  实验结果  
○ 暂稳态 □ 平衡态

算出的相对比容  $v/v_0$  和对应的应变  $\epsilon = (v_0 - v)/v_0$  列于表 2. 图 5 表示  $\sigma-v/v_0$  结果, 符号意义与图 3 相同. 实线  $MTN$  表示由 Fuller<sup>[5]</sup> 的考虑三阶弹性常数算出的 I 相  $\sigma-v/v_0$  弹性响应, 虚线  $MD$  为根据 Fuller 弹性常数求出的平均压力—比容曲线, 点划线  $TC$  是假设  $T$  点同时为屈服点时计算出的 I 相塑性 Hugoniot 线. Fuller 所测的弹性常数以及考虑各向异性弹性关系的计算见 [5]. 图 5 中虚线  $MEF$  为 Samara 和 Giardini<sup>[7]</sup> 的静高压数据. 图中可见, 由 Fuller 数据得到的第 I 相平均压力—比容曲线  $MD$  与 Samara 和 Giardini 的静高压结果相比, 有较大差别, 下

文还要讨论, 本文采用 Fuller 数据.

#### 4 分析和讨论

由图 5 可见, 高于  $\sigma_T$  的实验点远远偏离 I 相的塑性  $H$  线  $TC$ , 这说明应力高于  $\sigma_T$  的实验, 样品材料确实发生了相变, 因此, 实验中所观测到的双波结构确实由于相变而引起. 我们的动态实验还表明, 这一转变似乎可以在  $0.2\mu s$  内完成, 因为在这段时间内就趋向于平衡态, 这就排除了相变类型是扩散型的可能.

由 Fuller 弹性常数出发, 可求出对应于相变起始点  $\sigma_T = 32.5\text{kbar}$  的平均压力  $\bar{p} = 22.86\text{kbar}$ , 这与 Samara 和 Giardini<sup>[7]</sup> 的静高压测到的相变起始压力  $\bar{p}_T = 23\text{kbar}$  很接近, 而这时  $T$  点对应的剪应力  $\tau_T = 7.21\text{kbar}$ , 高达平均压力  $\bar{p}_T$  的 31.5%. 由此看来, CdS 单晶的相变起始压力仅取决于平均压力(或临界比容), 而与应力偏量无关. 有关剪力对  $\bar{p}_T$  的影响的详细讨论见文献 [5].

图 6 给出弹性前驱波幅值与传播距离的关系. 图中三角符号表示算出的样品前表面上的理论瞬态应力  $\sigma_i$ , 圆形和正方形符号分别表示前表面测到的暂稳态应力  $\sigma_m$  和准平衡态应

力 $\sigma_s$ 。所有这三种符号在图6中应当在同一横坐标位置(即距离为0处),为清楚起见,我们在图中把它们分离画出。倒三角符号表示试样后表面上的入射弹性前驱波波峰的应力,即表2中的 $\sigma_{A_i}$ 。图6显示,应力低于 $\sigma_T$ 的一次实验得到的4个点位于同一水平线上,这是典型的弹性响应。高于 $\sigma_T$ 的实验,瞬态应力 $\sigma_i$ 很快降至 $\sigma_m$ ,且 $\sigma_i - \sigma_m$ 之差随撞击应力的增加而扩大。在样品前表面,应力 $\sigma_m$ 逐渐松弛到 $\sigma_s$ ,同时,应力波向样品内部传播,当传至后表面时,前驱波幅变为 $\sigma_{A_i}$ 。

图6表明,前表面(撞击面)上的平衡应力 $\sigma_s$ 与前驱波在后表面的入射应力 $\sigma_{A_i}$ 几乎相同。实验5和6是两次重复性实验,撞击速度等条件相同,仅样品厚度不一样。由前表面得到的状态点在图3和图5中重合很好,这说明实验的重复性误差是很小的。图6中,这两次实验的 $\sigma_{A_i}$ 几乎相同,似乎说明弹性前驱波幅在很短的传播距离内很快降至 $\sigma_s$ ,然后保持其幅值不变,呈现稳定状态。这与弹性前驱波随传播距离而衰减的现象不同,说明它们的机理也不相同,这是一个值得注意的现象。实验8是个例外,其前驱波具有很大的衰减。计算出的 $\sigma_i$ 达105kbar,测到的平衡态应力为 $\sigma_s = 73.8$ kbar,但其 $\sigma_{A_i} = 42.2$ kbar,比 $\sigma_s$ 低得多,甚至比其他几次实验的 $\sigma_{A_i}$ 低。看来,c轴CdS单晶材料可能存在一个阈值,当驱动应力高于这一阈值,某种衰减机制将被激发,使得前驱波随传播距离而衰减,低于这一阈值,前驱波则是稳定的。

Duff和Minshall<sup>[9]</sup>指出, $p-T$ (压力-温度)平面上的两相共存线(即相边界)的斜率可由击波测量数据定出,计算公式如下:

$$\left(\frac{dp}{d\theta}\right)^2 + \left(\frac{2\alpha}{\kappa_{AB} - \kappa}\right) \frac{dp}{d\theta} = \frac{c_p}{\theta v(\kappa_{AB} - \kappa)} \quad (10)$$

式中 $\alpha = (1/v)(\partial v/\partial \theta)_p$ 是热膨胀系数, $\kappa = -(1/v)(\partial v/\partial p)_\theta$ 为初始相等温压缩性, $\kappa_{AB} = -(1/v)\lim_{B \rightarrow A} \{(v_B - v_A)/(p_B - p_A)\}$ 是与第二击波波速有关的击波压缩性,这里A是相变起始点,B为两相共存线上的点,其他参数均为I相A点的值。(10)式要求代入平均压力。由于高于相变应力时本构关系未知,平均压力不能得到。为此我们作一个假定,假定相变点T同时是屈服点且服从理想塑性行为,如此得到的各试验点的平均压力值列于表2并在图7中用三角符号表示。这样由图7求出 $\kappa_{AB}$ 进而可求出 $\frac{dp}{d\theta}$ ,具体数据如下:

$$\alpha = 2.5 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$$

$$\theta = 300 \text{K}$$

$$v = 0.9655 v_0$$

$$c_p = 8.21 \times 10^{-2} \text{ cal g}^{-1} \text{K}^{-1}$$

$$\kappa_A = 1.4723 \text{ Mbar}^{-1}$$

$$\kappa_{AB} = 0.3587 \text{ Mbar}^{-1}$$

其中 $\alpha$ 和 $c_p$ 引自文献[9]和[10]。

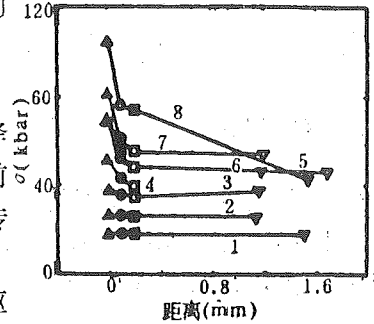


图6 c轴CdS单晶中弹性前驱波幅随传播距离的变化

由 (10) 式算出的  $p-\theta$  平面上相变起始点处的相边界斜率  $\frac{dp}{d\theta} \approx \pm 0.041 \text{ kbar/K}$ 。静高压  $\frac{dp}{d\theta}$  结果为, Osugi 等人<sup>[11]</sup>:  $-0.013$ , Samara 和 Giardini<sup>[7]</sup>:  $0.012$ 。单位均为  $\text{kbar/K}$ 。

我们的结果与静高压结果较接近。当图 7 中  $S$  点趋近于相变点  $T$ ,  $\frac{dp}{d\theta}$  值预计将更接近于静态值。动静高压结果均表明相变压力与温度的依赖关系不大。

上文提到图 5 中 Samara 和 Giardini 的第 I 相  $p-\tau/v_0$  曲线 (虚点线) 与 Fuller (虚划线) 相差较大, 原因不详。表 3 列出 I 相静高压数据的比较, 按相变点应变  $\epsilon_T = 0.0345$  求

表 3 c 轴 CdS I 相静高压数据比较

作者	方法	弹性常数 (kbar)*	$\epsilon_T = 0.0345$ 时的 工程平均压力 $\bar{p}$ (kbar)
Samara & Giardini <sup>[7]</sup>	电感法	$K = 546.4$	18.85
Kabalkina & Troiskaya <sup>[12]</sup>	X 线衍射	$K = 653.6$	22.55
Corll <sup>[13]</sup>	超声	$c_{33} = 936.1, c_{13} = 461.4$	21.76
Fuller <sup>[5]</sup>	超声	$c_{33} = 936.2, c_{13} = 461.4$ $c_{333} = -3270, c_{133} = -3060$	22.86

\*  $K$  为体模,  $c$  为弹性系数, 下标 3 表示  $c$  轴方向,  $c$  轴 CdS 是横观各向同性材料, 有  $c_{13} = c_{23}, c_{133} = c_{233}$ 。

出的平均工程压力, 文献 [12]、[13] 与 Fuller 的结果较接近。Fuller 和 Corll 测到的 5

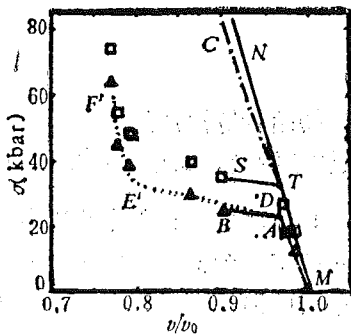


图 7 修正后的 Samara 和 Giardini 静高压曲线与实验数据的比较

个二阶常数几乎是一致的, 可以认为他们之间的差别在于 Fuller 考虑了三阶弹性系数。我们第 I 相击波实验点与 Fuller 吻合得也很好。Samara 等人的结果则相差较大, 也许由于他们采用电感法测量体积改变的缘故。为了作进一步的讨论, 我们发现, 如果把 Samara 等人的应变值乘以 0.814, 那末其 I 相  $p-v/v_0$  曲线与 Fuller 的结果相符很好 (参见图 7), 图 7 中修正后的 Samara 的结果用虚点线表示。令人鼓舞的是, 修正后的 Samara 的  $p-v/v_0$  曲线的 II 相部分也接近了击波实验点。图中的三角符号是击波实验数据点, 它们是假定相变点  $T$  同时为屈服点并按理想塑性模

型得到的, 有意思的是, 它们与修正后的 Samara 和 Giardini 的静高压  $p-v/v_0$  曲线吻合很好。也许这不仅仅是巧合, 它说明了, 虽然剪应力不能明显影响相变的起始压力, 但由于高剪应力的存在, 相变运动也许能激发塑性变形机制。文献 [2] 所报道的回收粉末试样中存在高密度缺陷也许与此有关。因此可以初步认为, 相变机制与塑性机制在微观上有一定的耦合作用, 相变能够激发微观缺陷的生成与发展, 而高剪应力的存在可加快晶格元素的微观运动, 使相变可在更短的时间内完成。当然这种耦合机制尚待进一步深入的研究。

华盛顿州立大学击波动力学实验室的 J. Thomson 先生制作试样总成并协助实验, 作者

表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] Kennedy J D and Benedick W B, *J. Phys. Chem. Solids*, **27** (1966), 125.
- [2] Dodson B W and Venturini E L, In: *Shock Waves in Condensed Matter 1981* (Menlo Park) (eds: W.J. Nellis *et al*), AIP, New York, 1982; 335.
- [3] Duvall G E and Graham R A, *Rev. Modern Phys.*, **49** (1977), 523.
- [4] Tang Zhiping and Gupta Y M, *J. Appl. Phys.*, **64** (1988), 1827.
- [5] 唐志平, Y.M. Gupta, *高压物理学报*, **2** (1989), 290.
- [6] Tang Zhiping, Gupta Y M and Bellamy P M, *Rev. Sci. Instrum.*, **59** (1988), 1189.
- [7] Samara G A and Giardini A A, *Phys. Rev.*, **140** (1A) (1965), 388.
- [8] Duff R E and Minshall F S, *Phys. Rev.*, **108** (1957), 1207.
- [9] Landolt-Börstein, *Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology* (editor in chief: K.H. Hellwege), Springer-Verlag, New York, (1975).
- [10] Touloukian Y S and Buyco E H, *Specific Heat, Nonmetallic Solids, Thermophysical Properties of Matter*, Vol. 5, Plenum, New York, (1970).
- [11] Osugi J, Shimizu K, Nakamura T and Onodera A, *Rev. Phys. Chem. of Japan*, **36** (1966), 59.
- [12] Kalbalkina S S and Troiskaya Z V, *Soviet Phys. Dok.*, **8** (1964), 800.
- [13] Corll J A, *Phys. Rev.*, **153** (1967), 623.

# Phase Transition Behavior of *c*-Axis Cadmium Sulfide Single Crystal Under Shock Loading

Tang Zhiping

Y.M. Gupta

*(University of Science and  
Technology of China)*

*(Washington State University,  
U.S.A.)*

## Abstract

The phase transition behavior of *c*-CdS single crystal under high velocity planar impact is systematically investigated by means of the front and rear quartz gauge technique. The Hugoniot curve of this material with phase transition is obtained for the first time. The stress relaxation and two-wave structure, which are related to phase transition, are observed. Below a threshold of stress the elastic precursors induced by phase transition do not decay apparently with travelling distance. This is quite different from the elastic-plastic waves. Besides, the experimental results show that the initial point of phase transition is also a yield point for this material, and consequently there may exist some certain coupling interaction between the mechanisms of phase transition and yielding.

**Key words:** impact phase transition, CdS single crystal, quartz gauge, plasticity coupling, time dependence.



# Provincial Long Distance Transmission Equipment Surveillance System in China

Shen Lansun Li Zhiqun

*(Department of Radio and Electronics)*

## Abstract

This paper describes the design and implementation of a provincial long distance transmission equipment surveillance system (PTESS) in China. It will also discuss the specifications, network structure, data transmission method, controlled maintenance method, composition and functions of the PTESS, and the user-friendly man-machine interface.

**Key words:** surveillance system, controlled maintenance, man-machine interface.

## 1 Introduction

Communication network in China is still in its beginning period of development. It is important to ensure reliable performance of the communication network and reinforce its maintenance management. At present the communication network maintenance management shows both low efficiency and poor reliability; therefore, it cannot meet the demand for communication construction

The provincial long distance transmission equipment surveillance system (PTESS) can keep maintenance manager informed of the working state of the network transmission equipment so that they can repair and dispatch them when necessary. In this way, maintenance work can be economical and reasonable, maintenance management quality can be improved and the number of servicemen can be reduced. This paper describes the design and implementation of PTESS in China, and discusses some concepts.

## 2 Specifications

The long distance communication network in China is a fourlevel hierarchical star and mesh combined network. PTESS is composed of a provincial transmission surveillance center (PTSC), a master station and a slave station. Interface of PTSC to the national transmission surveillance center (NTSC) and the provincial network management center (PNMC) should be set (Fig. 1).

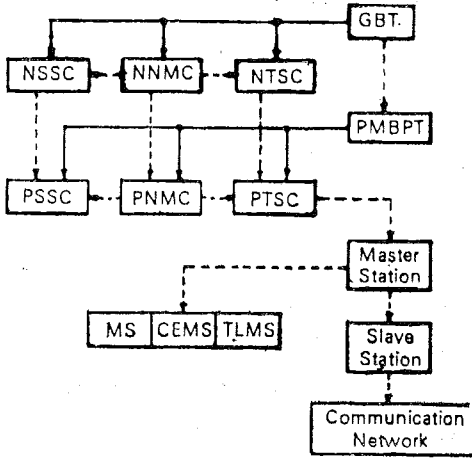


Fig 1. PTESS

—Technical Leadership ---Administrial Leadership  
 PMBPT—Provincial Management Bureau of Posts and Telecommunications

NSSC—National Switching Surveillance Center  
 NNMC—National Network Management Center  
 PSSC—Provincial Switching Surveillance Center  
 MS—Microwave Station  
 CEMS—Carrier Equipment Maintenance Station  
 TLMS—Transmission Lines Maintenance Station

The provincial surveillance system is a distributed surveillance system with modern computers combined with communication technique. The provincial surveillance system should be designed in accordance with CCITT's suggestions, national communication system and specifications of General Bureau of Telecommunications (GBT) of Ministry of Posts and Telecommunications. It should meet the following specifications:

(1) Collecting, displaying, automatically noting and processing alarm information as well as state-surveillance information of every kind of equipment and circuits (carrier, cable, microwave, optic fiber and satellite communication, etc.) the provincial transmission system. Locating obstacles by analyzing the obstacles.

(2) Maintaining a database of every kind of equipment and circuit management the provincial transmission system so as to administrate circuit quality and perform storing, indexing and polling of obstacle and poor quality notes.

(3) Reporting to NTSC and PNMC on important obstacle alarm [information of national and provincial toll trunk transmission system equipment and circuits.

(4) Providing user-friendly man-machine interface.

(5) Allowing expansion when the capacity of communication network is

expanded.

(6) Possessing high reliability and self-detection ability.

### 3 Network Structure and Data Transmission Method

To meet the need of national hierarchical star and mesh combined communication network and level-instructing surveillance system, a star network structure is desired. But central node's obstacle will affect the whole network. In contrast, in a net network structure, obstacle can be overcome easily. So the provincial surveillance system adopts a star network structure as its main part with the help of a net network structure. By using redundant technique, a three-level hierarchical star and mesh combined network is realized (Fig. 2). The redundant technique will ensure high reliability of the surveillance system.

Surveillance system can use different data transmission method to transmit data and instruction. In view of the features of surveillance system network structure, data transmission can be controlled by polling-selecting-interrupting technique.

Polling is often used with selecting to control slave data input and send data to the slave. Each node in the network should have a unique address. When polling, master controls link and transmits "send request" information to a special slave. Master receives information from the slave. When selecting, master transmits "receiving request" to one of many slaves and emits information to it. At this time, all information transmission is controlled by the master.

With polling-selecting method, all information transmission is controlled by a master. This is inconvenient when emergency occurs at the slave station. Interrupting method permits slave to give "interrupting request" when necessary, then the master interrupts its routine work to cope with the emergency of the slave.

In a word, master (PTSC or master station) controls the whole communication network conveniently. Slave (master station or slave station) can interrupt master's routine work to deal with emergency. Each slave station sends information to master station at both ends but can only be controlled by higher-level of the two. Once communication channel is interrupted, two slave stations on both sides of the obstacle will be taken over respectively by two respondent master stations.

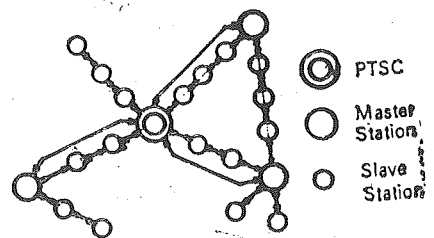


Fig. 2 Network structure

#### **4 Controlled Maintenance Method**

Maintenance of communication equipment includes correction maintenance, prevention maintenance and controlled maintenance. Controlled maintenance is newly put forward in the world. It uses analytic technique systematically to instruct maintenance by concentrative surveillance and sampling test. As a result, service is clearly improved.

PTESS should get following surveillance information: data from related surveillance equipment; data from man's surveillance and data from sampling test.

There have been many maintenance features (e.g. state testing and obstacle diagnosing features) in the data equipment. Therefore, it is suitable to be maintained with controlled maintenance method. While analog equipment needs to be surveyed by external surveillance system. Corrective maintenance and preventive maintenance method should be evaluated suitably. They can also be used, when necessary, to make maintenance quality as high as possible.

#### **5 Composition and Functions of the System**

Composition and functions of a provincial long distance transmission equipment surveillance system are presented in the following four aspects.

##### **5.1 PTSC**

In principle, PTSC should be set up in each province. It receives obstacle information from each provincial master station, performs processing, displaying, alarming and perceives working state of provincial first-level and secondlevel trunk transmission equipment and circuits.

PTSC should report to NTSC and PNMC on important obstacle alarm information of equipment and circuits. It should receive and carry out instructions from NTSC and PNSC.

PTSC should give instructions for important obstacle recovery and dispatching to master station. PTSC should achieve circuit quality management and circuit open management. It should present statistic and analytic reports of obstacle and transmission quality, functions of storing, indexing and polling of information of circuits and equipment's obstacles and poor quality.

##### **5.2 Master Station**

Some master stations can be set up provincially in accordance with the demand of provincial communication network's structure and maintenance management.

Master station receives obstacle information from each respondent slave

station, performs processing, displaying and alarming, and perceives working state of inferior long distance transmission equipment and circuits.

Master station reports to PTSC about important obstacle alarm information of equipment and circuits.

Master station should be able to give inferior slave stations instructions for polling, testing and dispatching.

Master station should achieve circuit quality management and circuit open management. It should present statistic analytic reports of obstacles and transmission quality, functions of storing, indexing and polling of information of equipment and circuit's obstacles and poor quality.

### **5.3 Slave Station**

Some slave stations can be set in accordance with the demand of communication transmission system's structure and maintenance management. Automation should be realized. Slave station perceives working state of respondent long distance transmission equipment and circuit with automatic devices.

Slave station reports to master station automatically about important obstacle alarm information of equipment and circuits and interrupting information of pilot and supervisory frequency. It should carry out master station's instructions automatically.

### **5.4 Items to Be Surveyed**

(1) Displaying and processing in PTSC and each master station alarm signals and pilot and supervisory frequency signals of every kind of transmission system equipment.

(2) Surveying unmanned station's circumstance and power supply.

PTESS should set interface to such transmission systems as data microwave, optic fiber and satellite communication of automation transmission surveillance system to perform collective surveying.

(3) performing automatic test of toll communication transmission features and automatically surveying the equipment's receiving-sending signals, pilot and supervisory frequency signal level, noise, carrier leak and power level of groupcircuits.

(4) performing signal system testing and three requirement testings (net loss, frequency response and noise).

(5) Checking certain items with measurement instruments, compromising automatic testing system by linking general instrumental interface (IEEE-488) with computer.

(6) Checking and processing surveillance data effectively, then detecting obstacle location and tendency of equipment deterioration and report to the

center about related information.

(7) Setting up a database of communication network surveillance so as to realize complete management of equipment and circuit's information of every kind of PTESS. Finally, setting up a distributed intelligent database to realize resources sharing between PTSC and master stations.

## 6 Design of PTESS

### 6.1 System Hardware

The design of PTESS is first the design of a distributed computer data collection system. One important task of a surveillance system is to collect information from every kind of transmission system equipment and circuit. The information includes digital and analog signals.

STD bus technique is used in the design of data collection hardware. It associates small board structure with VLSI technique to present a new function model method. Intelligent board of STD bus can work with CPU off-line because of its independent deciding feature. This makes STD bus technique suitable for distributed data collection.

Communication interface of the system should be compatible with CCITT's interface standard. Communication interface standard of data transmission in telephone network (analog network) should use CCITT's V.24 suggestion while communication interface standard of data transmission in data communication network (data network) should use CCITT's X.25 suggestion.

### 6.2 Software Structure

Fig.3 is a diagram of the software structure of PTESS. The principles of applied software design are:

(1) Presenting various softwares, with permission of system hardware structure, to meet user's demands for the surveillance system and to make

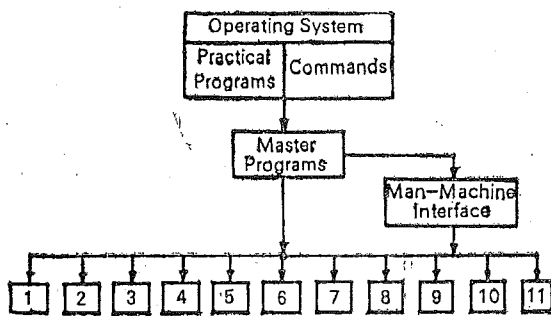


Fig. 3 The Software structure of PTESS

- 1—Self-Detection Program
- 2—Data Acquisition Program
- 3—Digital Signal Output Control Program
- 4—Communication Software of High-Speed Data Channel
- 5—Monitor Analysis Table (MAT)
- 6—Print Program
- 7—Display program
- 8—Bilateral Dialogue Generation Program
- 9—Bilateral Image Generation Program
- 10—Processing Program
- 11—Data Base

data analysis reliable and operation flexible and easy.

(2) Making applied software easy to understand, to test, to measure,

to modify, to maintain and to expand, by using model program design and structural program design method,

(3) Providing advanced user-friendly man-machine interface design, man-machine dialogue; displaying analysis result and printing in Chinese to make maintainer's work convenient.

The applied software of PTESS works under the support of computer real-time multitasking operating system. Supported by the system software, Master program is made core of the surveillance system applied software with performances as: initialization of system, modification selection of surveillance condition, display of instruction, instruction input and explanation, execution of instruction. After finishing the above tasks, the system should be able to returned to the master program and wait for new instructions. Automatic menu and soft key selection technique are used in master program. All necessary data of surveillance condition are included in surveillance-control table (SCT). Unique surveillance task is respondent with unique surveillance-control table.

### 6.3 User-Friendly Man-Machine Interface

Effectiveness of any surveillance system depends on its ability to process emergency and to return to routine state quickly. Effective man-machine interface makes maintainer respond to emergency correctively, analyze obstacle cause and give proper solution automatically.

User-friendly man-machine interface permits maintainer to learn to use the whole surveillance system easily by means of "dialogue". The most important part of man-machine interface is user's interface, which is a bridge between operator and computer. In fact, user's interface software is a series of rules and protocols, which permit users to exchange information with computer in a certain way.

Man-machine interface of PTSC and master station should be designed to be maintainer-oriented by use of CRT, large wall screen, printer, etc. It should include:

(1) Software support: Software support is basic to the realization of friendly man-machine interface which include:

- Operating system;
- Communication software of high-speed data channel;
- Supporting use of high level programming language (e.g. BASIC, FORTRAN, C, etc) and every kind of problem-oriented languages;
- Distributed database;
- Bilateral dialogue generation program;

- Bilateral image generation program;
- Self-detection program.

(2) Presenting instruction: User-friendly man-machine interface should be instructive. It should provide instructions to the maintainer without the help of related handbooks. User-friendly man-machine interface is realized by bilateral dialogue between maintainer and screen information.

(3) Displaying problems: Graphics displaying is the most effective form of man-machine dialogue. It provides the user with graphics inputting, graphics processing and graphics displaying services.

Several CRT displaying units can be set so that maintainer can observe communication network completely. Some of them display situation of communication network, some of them display alarm information of important equipment and circuits, and the others are used to select a certain circuit. Each CRT should have unique keyboard. Displaying of some important information can be operated by a dedicated keyboard. In the controlling room of a provincial transmission surveillance center, a large wall screen board can be set to display working state of the provincial trunk network.

(4) Response time: In man-machine dialogue, terminology and ways of expression familiar to the maintainer should be used frequently. At the same time, response consistence should be kept. This not only depends on program designing but also needs support of dedicated hardware.

#### Referenes

- [1] Osajima Y R, B. S. T. J., 62(1983), 2123—2473.  
 [2] Shen Lansun, Li Zhiqun, *Communications Technology and Management*, 1988, No.4, 15—22.

## 省长途传输设备监控系统的研究

沈兰荪      李智群

(无线电电子学系)

摘            要

本文描述省长途传输设备监控系统(PTESS)的设计与构成,讨论了有关的技术指标、网络结构、数据传输方法、受控性维护方法、系统的组成与功能,以及人机友好接口。

**关键词:** 监控系统, 受控性维护, 人机接口。

**中图法分类号:** TN913.2



# 萃取浮选光度法测定Bi-Sr-Ca-Cu-O 超导薄膜中的铋

朱玉瑞 袁惠敏 金谷

(应用化学系)

## 摘 要

研究了用萃取浮选光度法测定铋的各种条件,还试验了常见离子对本法的影响。研究发现:0~20 $\mu\text{g}/25\text{ml}$ 的铋符合比耳定律,络合物组成比铋:茜素红S:亮绿为1:3:3,平均摩尔吸光系数为 $2.02 \times 10^5$ 。方法用于Bi-Sr-Ca-Cu-O超导薄膜中的铋的测定,获得了较为满意的结果。

**关键词:** 萃取浮选光度法, 铋, 超导薄膜。

**中图法分类号:** O652.3

## 1 前言

浮选光度法是近年来发展较快的灵敏度高、选择性较好的光度分析分支。董慧茹、乐秀毓报道用孔雀绿作捕集剂测定微量钴和铜<sup>[1]</sup>。孟盼兮、江智美用萃取浮选光度法测定铋<sup>[2]</sup>。从微量铋的测定资料来看,若采用一般光度法则灵敏度不很高,如文献[3, 4]报道的测定微量铋的方法,得到的摩尔吸光系数分别为 $4.35 \times 10^4$ 和 $1.56 \times 10^5$ 。

Флинткова, Исаханова<sup>[5]</sup>采用萃取浮选光度法测定砷盐中的微量铋,摩尔吸光系数高达 $2.5 \times 10^5$ 。在[5]的基础上我们对显色体系的各种条件进行了仔细地研究,在某些条件下得到与文献[5]基本一致的结果,但摩尔吸光系数为 $2.02 \times 10^5$ ,比[5]略低,这可能是由于茜素红S纯度不高所致。我们还研究了三元络合物的稳定性,(吸光度至少在40h内稳定不变)改进了洗涤方法解决了空白值不稳的问题,改善了测定方法的重现性,拓宽了比耳定律范围。使用本法测定Bi-Sr-Ca-Cu-O超导薄膜中微量铋含量,获得较为满意的结果。对其中一个薄膜样品进行7次平行测定的相对标准偏差为3.9%,回收率为90~110%。较其它测定铋的光度法更加灵敏,且具有准确、稳定、快速等优点。

## 2 实验

## 2.1 仪器与试剂

**仪器** 岛津 UV-240 分光光度计；721 型分光光度计；PHS-3C 型酸度计。

**试剂** 铋标准溶液：准确称取 0.1000g 金属铋置于 100ml 烧杯中，加入 10ml 优级纯硝酸，加热溶解。待完全溶解后，冷却移入 100ml 容量瓶中（内盛 5 ml 硝酸），用水稀释至刻度，摇匀，此溶液含铋 1.0mg/ml。使用时稀释为含铋 20.0 $\mu$ g/ml 的操作液。茜素红 S：0.05% 水溶液。亮绿：0.05% 水溶液。醋酸—醋酸钠缓冲液：pH5.3。

其它试剂均为分析纯，按一般常规方法配制。

## 2.2 实验方法

于 60ml 分液漏斗中加入 pH5.3 的 HAc-NaAc 缓冲溶液 15ml、0.05% 茜素红 S 水溶液 5ml，铋标准溶液 10.0 $\mu$ g，0.05% 亮绿水溶液 3ml，摇匀，静置 30min；加入甲苯 10ml，振摇 2min，静置分层后，弃去水相；用 10ml 0.9% 的 HCl 和 HAc 各洗一次有机物和浮选物，每次振摇 10—20s，小心弃去水相；将有机物及浮选物一并定量转入 25ml 比色管中，用无水乙醇溶解浮选物并定容，摇匀；以空白浮选物为参比，用 1 cm 比色皿在 630nm 处测定其吸光度。

## 3 样品分析

用 5.0M 硝酸 1ml 溶解一片薄膜，并用蒸馏水稀释至 10.0ml，摇匀。

于 60ml 分液漏斗中加入 pH5.3 的 HAc-NaAc 缓冲液 15ml，0.05% 茜素红 S 5ml、试样 1.0ml、10% 硫脲 0.5ml、0.05% 亮绿 3ml，按一般实验方法操作，根据吸光度，由工作曲线得出样品中铋含量。

按一般实验方法操作，对二个样品分别进行 7 次平行测定，结果见表 1。

表 1 相对标准偏差测定

样品	吸光度				含量 ( $\mu$ g/25ml)			
1	0.370	0.395	0.395	0.415	9.50	10.10	10.10	10.65
	0.385	0.375	0.405		9.90	9.60	10.40	
2	0.167	0.165	0.175	0.160	4.22	4.20	4.50	4.10
	0.155	0.160	0.170		4.00	4.10	4.30	

由此计算出：样品 1 的相对标准偏差为 4.1%，样品 2 为 3.9%。结果表明精密度良好。

按一般实验方法操作，对四组样品进行回收率实验，结果见表 2。回收率一般均在 90~110% 之间。

## 4 结果与讨论

### (1) 试剂与铋络合物的吸收光谱

按一般实验方法，分别采用① $2.0 \times 10^{-5}$  M 茜素红 S 加  $2.0 \times 10^{-5}$  M 亮绿对水；② $5.0 \times 10^{-5}$  M Bi<sup>3+</sup> 加  $2.0 \times 10^{-5}$  M 茜素红 S 加  $2.0 \times 10^{-5}$  M 亮绿对水；③络合物对试剂空白测定吸光度。实验结果发现：试剂及 Bi(III) 与茜素红 S，亮绿生成的蓝绿色三元络合物，其最

大吸收峰均位于 630nm 处。结果见图 1 (曲线 1、2、3、分别表示为①、②、③)。

表 2 回收率实验

样 品	取样量 (ml)	加入 Bi 量 ( $\mu\text{g}$ )	样品含量 (ppm)	测出 Bi 量 ( $\mu\text{g}$ )	回收率 (%)
1	1.0	0.00	6.00	6.00	
	1.0	2.00		8.20	110
	1.0	4.00		10.00	100
2	1.0	0.00	3.10	3.10	
	1.0	3.00		5.80	90
	1.0	6.00		8.90	96.7
3	0.50	0.00	8.40	4.20	
	0.50	2.00		6.00	90
	0.50	5.00		9.30	102
4	0.50	0.00	6.00	3.00	
	0.50	2.00		5.10	105
	0.50	4.00		6.90	97.5

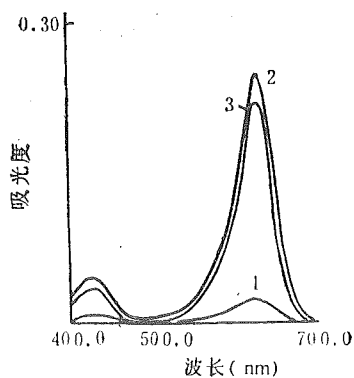


图 1 试剂与络合物吸收光谱

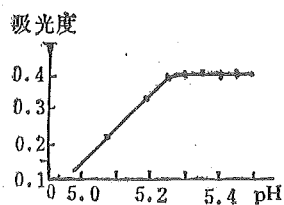


图 2 萃取酸度的影响

### (2) 萃取酸度

除改变溶液 pH 值外其余按一般实验方法, 结果表明: 络合物吸光度随 pH 值升高而增大, 在 pH 值为 5.25~5.50 范围内, 吸光度达最大且恒定, 见图 2。以后实验萃取酸度选用 pH 5.3。

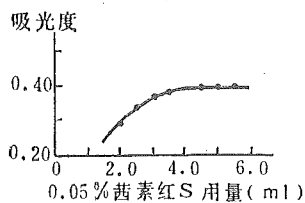


图 3 茜素红 S 用量的影响

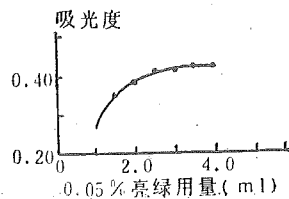


图 4 亮绿用量的影响

### (3) 茜素红 S 用量的影响

试验结果表明：络合物吸光度随茜素红 S 用量增加而增大，当用量在 4.5~5.6ml 时，吸光度达最大且恒定，见图 3。以后实验选用 5ml。

### (4) 亮绿用量的影响

试验结果表明：络合物吸光度随亮绿用量增加而增大，当亮绿用量在 2.4~3.5 ml 时，吸光度达最大且恒定，结果见图 4。以后实验选用 3ml。

### (5) 萃取溶剂的选择

分别采用苯、乙酸乙酯、四氯化碳，1:1 的四氯化碳和甲苯，乙酸异戊酯等有机溶剂进行浮选，与甲苯进行对比试验。发现：络合物不被乙酸乙酯萃取，苯的浮选物不稳定，乙酸异戊酯使结果偏低，四氯化碳比重比水大因此给操作带来麻烦。而选用甲苯，则萃取率高，络合物稳定，容易操作。实验中选用甲苯为萃取溶剂。

### (6) 甲苯与水相体积之比

固定水相体积为 22ml，改变甲苯体积，其余同一般实验方法。结果表明：甲苯与水相体积之比为 0.45~0.60 时，络合物吸光度最大，实验中选用的体积比为 0.45。

### (7) 碱性染料的选择

分别采用孔雀绿、结晶紫、甲基紫等碱性染料与离子络合，其余按一般实验方法操作。结果见图 5。试验表明：上述三种碱性染料均不如亮绿灵敏度高，所以选用亮绿较适宜。

### (8) 洗涤

萃取浮选光度法的关键是洗涤除去共浮物以降低空白值。文献[5]介绍用 0.1N HAc 洗涤两次即可。按此条件试验发现：空白值不稳定，结果重现性差。为此我们试验了几种洗涤剂，发现先用 0.9% HCl 洗一次，再用 0.9% HAc 洗一次效果较好。

### (9) 络合物稳定性

蓝绿色三元络合物性质稳定，在密封比色管中放置 40h，其吸光度稳定不变。

### (10) 络合物组成比

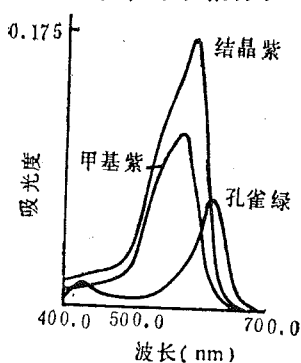


图 5 碱性染料的选择

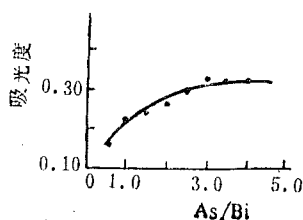


图 6 摩尔比法测定茜素红/Bi 比值

$[Bi] = [茜素红 S] = 1.0 \times 10^{-4} M$

$[亮绿] = 3.78 \times 10^{-4} M$

1:1cm,  $\lambda: 630nm$

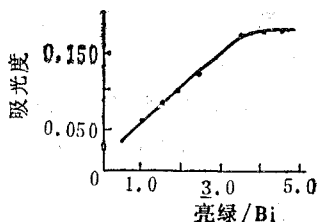


图 7 摩尔比法测定亮绿/Bi 比值

$[Bi] = [亮绿] = 1.0 \times 10^{-4} M$

$[茜素红 S] = 8.33 \times 10^{-4} M$

1:1cm,  $\lambda: 630nm$

用摩尔比法测定络合物组成 (图 6 和图 7)，Bi: 茜素红 S: 亮绿为 1:3:3，结论与文献[5]一致。

### (11) 共存离子试验

对 24 种离子进行试验, 结果表明: 下列大量离子 (单位 mg):  $\text{NH}_4^+$ (5),  $\text{K}^+$ (5),  $\text{Na}^+$ (5),  $\text{Ca}^{2+}$ (5),  $\text{Mg}^{2+}$ (1),  $\text{Ba}^{2+}$ (1),  $\text{Sr}^{2+}$ (1),  $\text{Pb}^{2+}$ (1),  $\text{Mn}^{2+}$ (5),  $\text{Al}^{3+}$ (10),  $\text{Zn}^{2+}$ (5),  $\text{Ni}^{2+}$ (1),  $\text{Sb}^{3+}$ (1),  $\text{Cr}^{6+}$ (1),  $\text{NO}_3^-$ (10),  $\text{F}^-$ (5),  $\text{Cl}^-$ (5),  $\text{SO}_4^{2-}$ (10),  $\text{Mo}^{6+}$ (1); 下列微离子 (单位:  $\mu\text{g}$ ):  $\text{W}^{6+}$ (250),  $\text{Fe}^{3+}$ (100),  $\text{Be}^{2+}$ (100),  $\text{V}^{5+}$ (250) 不干扰  $10\mu\text{g}$  铋的测定。

500  $\mu\text{g}$  铜的干扰可用 10% 硫脲 1ml 掩蔽, 而不干扰  $10\mu\text{g}$  铋的测定。

### (12) 比耳定律

实验结果表明: 铋的浓度在  $0\sim 20\mu\text{g}/25\text{ml}$  时符合比耳定律, 由此计算出络合物的平均摩尔吸光系数为  $2.02 \times 10^5 \text{ l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ , 桑德尔灵敏度为  $1.03 \times 10^{-3} \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , 结果见图 8。

### (13) 与其它光度法比较 (见表 3)

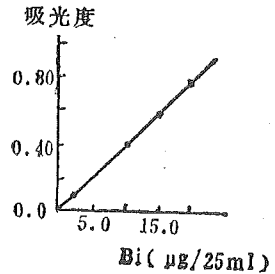


图 8 标准曲线

表 3

方法	显色酸度	稳定时间(h)	比耳定律范围	$\epsilon$ ( $\text{l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ )	桑德尔灵敏度 ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ )
本法	pH5.25~5.50	40h	$0\sim 20\mu\text{g}/25\text{ml}$	$2.02 \times 10^5$	0.0010
PF	pH6.0~11.0	11h	$0\sim 28\mu\text{g}/25\text{ml}$	$1.56 \times 10^5$	0.0013
XO	pH5.0	24h	$0\sim 1.2\mu\text{g}/\text{ml}$	$4.35 \times 10^4$	0.0048

PF: 苯基荧光酮 XO: 二甲酚橙

### 参 考 文 献

- [1] 董慧茹等, 理化检验 (化学分册) 22 (1986), 198.
- [2] 孟盼兮等, 理化检验 (化学分册), 23 (1987), 209.
- [3] 肖志斌, 理化检验 (化学分册), 18 (1982), 6.
- [4] 冯胜等, 分析试验室, 6 (1987), No2.
- [5] Флянтникова Г В, Исаханова А Т, Ж.А.Х., 37 (1982), 1452.

# Extraction Flotation Spectrophotometric Determination of Bismuth in Bi-Sr-Ca-Cu-O Superconducting Film

Zhu Yurui Yuan Huimin Jin Gu

*(Department of Applied Chemistry)*

## Abstract

A highly sensitive method is described for the determination of trace Bi(III) by extraction flotation in the presence of alizarin red S and brilliant green. Bi(III) forms a 1:3:3 stable complex with alizarin red S and brilliant green over the pH range 5.25-5.50. The maximum absorbance of the complex is measured at 630nm, and its apparent molar absorptivity is  $2.02 \times 10^5 \text{ l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ . The calibration curve is linear over the range 0-20  $\mu\text{g Bi}/25\text{ml}$ . Most common metal ions do not interfere. The method is applied to the determination of Bi(III) in Bi-Sr-Ca-Cu-O superconducting film.

**Key words:** extraction flotation spectrophotometric method, bismuth, superconducting film.

# 受浮力响影的湍流模型

范维澄 张辉 郑丽丽

(工程热物理系)

## 摘 要

本文给出将现有湍流模型用于浮力流的若干修正方案;分别运用湍流粘性系数模型和雷诺应力模型及它们的浮力修正型、双流体模型对几种典型的浮力流进行计算机模拟;最后提出选用浮力流湍流模型的建议。

**关键词:** 湍流模型, 浮力流, 数值计算。

**中图法分类号:** TK16

## 1 引言

受浮力影响的流动、传热传质和燃烧过程广泛地存在于周围环境和工程设备之中。例如, 电厂在自然水域的吸排水, 需要了解排出的水在水域中的温度变化及空间分布, 以便合理安排吸排水口的位置和流量。求得高的热效率。这是比较典型的重力分层流问题。建筑物内火灾烟气是引起人员伤亡的主要因素, 需要了解建筑结构、排风系统、火源强度等对烟气传播速度和范围的影响, 以便合理地进行建筑物的防火设计, 求得人员伤亡的减少。这是比较典型的受限自然对流传热传质问题。浮力存在于密度不均匀的流动体系中, 引起密度不均匀的原因通常是温度或成分的差异。浮力的作用既影响平均流场, 又影响湍流结构, 从而影响着流体状态参数(温度、成分等)的空间分布及其随时间的变化。浮力的方向永远是竖直方向, 它对均流和湍流脉动的影响是定向的, 这就进一步强化了湍流运输的各向异性, 增加了湍流模化的难度。

鉴于浮力流的重要性和建立的湍流模型的困难, 尽管国内外已开展了不少工作, 但都仍处于探索和研究模型的阶段。本文拟以室内火灾烟气运动和重力分层流为例, 通过比较采用不同湍流模型得到的数值计算结果, 分析它们的差别, 提出选择模型的建议。文中的湍流模型包括:  $k-\epsilon$  模型及它的浮力修正型、雷诺应力的微分方程模型及它的浮力修正型、双流体模型。

1989年7月6日收到。

国家自然科学基金资助项目。

## 2 湍流模型

### 2.1 $k$ - $\varepsilon$ 模型及它的浮力修正型

$k$  和  $\varepsilon$  方程的通式可写成

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i \phi)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi$$

式中,  $S_k = G + G_B - \rho \varepsilon$

$$S_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{k} [C_1 (G + G_B) (1 + C_3 R_f) - C_2 \rho \varepsilon]$$

浮力的直接影响体现在两个方面, 一是在  $k$  的产生项位置上增加了浮力导致的  $k$  的产生率的变化  $G_B$ , 其表达式可以体现浮力作用的动量方程中导出,  $G$  恒大于零, 而  $G_B$  却可正可负; 一是在  $S_\varepsilon$  中引入参数  $R_f$ , 这体现了浮力作用对  $k$  和  $\varepsilon$  的影响可能有所不同。

$$G_B = -\rho g_i \overline{u_i' T'} = \beta g_i \Gamma_i \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

式中  $\beta$  为体膨胀系数, 定义为

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$$

$$R_f = \begin{cases} -\frac{G_B}{G + G_B} & \text{对水平剪切层} \\ 0 & \text{对竖直剪切层} \end{cases}$$

不难看出, 若  $C_3 = 1$ , 则在水平剪切层中

$$S_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon)$$

与无浮力修正的  $\varepsilon$  方程的源项完全一样, 调整  $C_3$  可以控制对  $S_\varepsilon$  的修程度。

烟气在室内的运动可分为水平和竖切剪切层, 作为一种简便的近似, 本文建议在计算过程中用水平和竖直两个速度分量绝对值的相对大小来确定该位置处于哪种剪切层, 例如, 若水平速度分量绝对值大则处于水平剪切层。

### 2.2 含浮力影响的雷诺应力输运方程模型 (DSM)<sup>[1][2]</sup>

抛弃湍流粘性系数的概念和相应的梯度模拟假设, 建立和直接求解以  $(-\rho \overline{u_i' u_j'})$  和  $(-\rho \overline{u_i' T'})$  为因变量的微分方程, 以期在对湍流输运过程的模拟中尽可能合理地体现客观存在的各向异性, 使模型更接近于实际。DSM有多种形式, 这里基本采用 Launder 1986 推荐的一种, 它较为简便且成功率高。本文在两个方面进行了改进, 一是鉴于室内气体密度变化较大, 去掉了原模型中常密度的假设并相应地修改了方程; 二是在  $\varepsilon$  方程源项中, 引入参数  $R_f$ , 并进行了前述处理。

$$\rho \frac{D \overline{u_i' u_j'}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \underbrace{\mu \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k} + C_\varepsilon \overline{u_k' u_i'} \frac{\rho k}{\varepsilon} \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_i}}_{D_{ij}} \right] + P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \varepsilon$$



$$\rho \frac{D\overline{u'_i T'}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ C_{i,r} \overline{u'_k u'_i} \frac{\rho k}{\varepsilon} \frac{\partial \overline{u'_i T'}}{\partial x_i} \right] + P_{i,r1} + P_{i,r2} + G_{i,r} + \phi_{i,r}$$

式中,

$$k = \overline{u'_k u'_k} / 2$$

$$P_{i,j} = -\rho \left( \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right)$$

$$G_{i,j} = -\rho \frac{C_i}{T} (\overline{u'_j T'} g_i + \overline{u'_i T'} g_j)$$

$$P_{i,r1} = -\rho \overline{u'_k u'_i} \frac{\partial T}{\partial x_k}$$

$$P_{i,r2} = -\rho \overline{u'_k T'} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}$$

$$G_{i,r} = -\rho \frac{\alpha}{T} \cdot \overline{T'^2} g_i$$

$$\phi_{i,j} = \phi_{i,j1} + \phi_{i,j2} + \phi_{i,j3} + \phi_{i,w}$$

$$\phi_{i,j1} = -C_1 \frac{\rho \varepsilon}{k} \left( \overline{u'_i u'_j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{u'_k u'_k} \right)$$

$$\phi_{i,j2} = -C_2 \left( P_{i,j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right)$$

$$\phi_{i,j3} = -C_3 \left( G_{i,j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} G_{kk} \right)$$

$$\phi_{i,r} = \phi_{i,r1} + \phi_{i,r2} + \phi_{i,r3}$$

$$\phi_{i,r1} = -C_{1r} \frac{\rho \varepsilon}{k} \overline{u'_i T'}$$

$$\phi_{i,r2} = -C_{2r} P_{i,r2}$$

$$\phi_{i,r3} = -C_{3r} G_{i,r}$$

$$\begin{aligned} \phi_{i,w} = & \left[ C'_1 \frac{\rho \varepsilon}{k} \left( \overline{u'_k u'_m} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_i} n_k n_j - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_j} n_k n_i \right) \right. \\ & \left. + C'_2 \left( \phi_{km2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ik2} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{kj2} n_k n_i \right) \right] \frac{k^{3/2}}{C_1 \varepsilon x_n} \end{aligned}$$

式中  $n_k$  为壁面的单位法向量,  $x_n$  为到壁面的距离。  $C_i = 2.5$ 。

$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$G_{1r}$	$C_{2r}$	$C_{3r}$	$C_{i,r}$	$C'_1$	$C'_2$
1.8	0.6	0.5	0.22	3.0	0.5	0.33	0.15	0.5	0.3

$\overline{T'^2}$  方程

$$\rho \frac{D\overline{T'^2}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( C_0 \frac{\rho k}{\varepsilon} \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial x_k} + \Gamma \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial x_i} \right) - 2\rho \overline{u'_j T'} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \frac{1}{R} \frac{\rho \varepsilon}{k} \overline{T'^2}$$

式中,  $C_0 = 0.22$   $R = 0.8$ 。

从含浮力影响的 DSM 方程中可以看出: 浮力的影响是广泛和多渠道的, 它对不同方向

的雷诺应力和热流输运通量的影响有所不同。浮力对湍流结构的这种复杂影响在湍流粘性系数模型中是难以如此清晰地表示出来的。

### 2.3 双流体模型<sup>[3][4]</sup>

双流体模型的学术思想是把湍流流场看作两种流体各自的运动及其相互作用综合。在流场整体的模拟方面，不需要通过引入计算雷诺应力 $(-\rho \overline{u'_i u'_j})$ 的表达式来求得方程组的封闭。在两种流体各自的体系中，可以容纳常规的单流体的湍流模型（若这种流体处于湍流状态）。这样一种模拟体系，具有模拟反梯度扩散现象的能力，在重力分层流的计算中，把流入的热水和原水体的冷水考虑成两种流体，重力场对两种流体在竖直方向上有促其分离的作用。热涡团向上，冷水团向下。这正是表现热流与温度梯度方向一致（反梯度扩散），使得重力分层流较难混合和出现温跃的主要原因。

鉴于在水的重力分层流问题中，两种流体的密度差比流体密度本身要小大约3个量级，为了不掩盖流体密度差带来的浮力影响，我们把压力中包含的随水深线性变化的流体静压力分项离开，写成

$$p = p_m + p_s = p_m + p_0 - \rho_2 g y$$

式中， $p_m$ 为相对压力， $p_s$ 为流体静压力， $p_0$ 为参考压力。经过这样处理后，典型二维重力分层流双流体模型的控制方程可表示成：

连续方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_1 \rho_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_1 \rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial y}(r_1 \rho_1 v_1) &= \dot{m} \\ \frac{\partial(r_2 \rho_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_2 \rho_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial y}(r_2 \rho_2 v_2) &= -\dot{m} \end{aligned}$$

动量方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_1 \rho_1 u_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_1 \rho_1 u_1^2) + \frac{\partial}{\partial y}(r_1 \rho_1 u_1 v_1) &= -r_1 \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(r_1 \mu_{eff} \frac{\partial u_1}{\partial x}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y}(r_1 \mu_{eff} \frac{\partial u_1}{\partial y}) + u_2 \cdot \dot{m} + F_{2-1x} \\ \frac{\partial(r_2 \rho_2 u_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_2 \rho_2 u_2^2) + \frac{\partial}{\partial y}(r_2 \rho_2 u_2 v_2) &= -r_2 \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(r_2 \mu_{eff} \frac{\partial u_2}{\partial x}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y}(r_2 \mu_{eff} \frac{\partial u_2}{\partial y}) - u_2 \cdot \dot{m} - F_{2-1x} \\ \frac{\partial(r_1 \rho_1 v_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_1 \rho_1 u_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial y}(r_1 \rho_1 v_1^2) &= -r_1 \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}(r_1 \mu_{eff} \frac{\partial v_1}{\partial x}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y}(r_1 \mu_{eff} \frac{\partial v_1}{\partial y}) + v_2 \dot{m} + F_{2-1y} + r_1(\rho_2 - \rho_1)g \\ \frac{\partial(r_2 \rho_2 v_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(r_2 \rho_2 u_2 v_2) + \frac{\partial}{\partial y}(r_2 \rho_2 v_2^2) &= -r_2 \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}(r_2 \mu_{eff} \frac{\partial v_2}{\partial x}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y}(r_2 \mu_{eff} \frac{\partial v_2}{\partial y}) - v_2 \cdot \dot{m} - F_{2-1y} \end{aligned}$$

动量方程中的压力是相对压力。

控制方程的辅助关系,边界条件和采用的数值方法等均沿用传统关系式和处理方法<sup>[3][5]</sup>。

### 3

## 计算结果

用上述湍流模型对前述两种典型过程进行计算机模拟,得到了大量的计算结果,现将其中部分结果介绍如下。

图1给出了用有浮力修正的 $k-\varepsilon$ 模型得到的室内烟气运动的矢量分布图,可以看出羽流的形成和发展,天棚射流的形成,气流右墙壁处的下转弯浮力射流,水平方向回流和室内上部热气层的初步形成。图2给出了在一个竖直截面上气体温度随高度的变化,分别采用有和没有浮力修正 $k-\varepsilon$ 的模型,可以看出,实线所代表的有浮力修正的结果较好地模拟了气温在冷热气层界面处变化剧烈的客观现象。

图3和图4分别是三层楼房内火灾烟气在起火后2s和20s时的等浓度线分布,可以

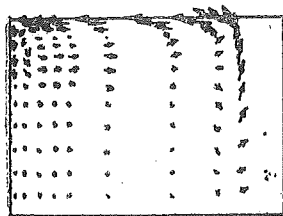


图1 浮力修正 $k-\varepsilon$ 模型结果

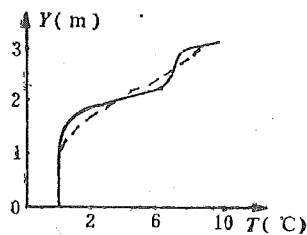


图2 两种 $k-\varepsilon$ 模型比较

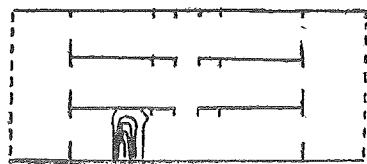


图3 2s时烟气浓度图

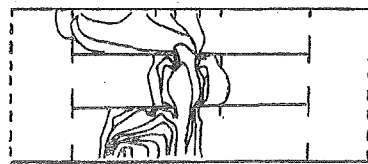


图4 20s时烟气浓度图

清楚地看出,得到的烟气运动趋势是基本合理的:热烟气上升、冷空气由打开的窗户吸入,顶层的窗户冒出烟气。

用考虑浮力作用的雷诺应力分方程模型(DSM)得到的室内烟气运动的计算结果示于图5和图6,图5是气体速度矢量图,可以看出总体图象与图1类似,不同点主要在于,在顶棚与墙壁相交的拐角处出现了第二个回流区,天棚射流发生分离,这个结果与实验观察到的现象一致<sup>[6]</sup>。图6给出了在一个竖直截面上三种湍流模型分别得到的温度分布。从要合理



图5 浮力修正DSM结果

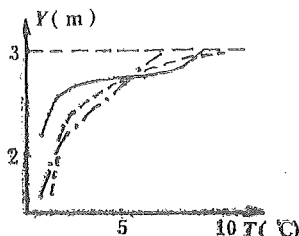


图6 三种模型比较  
— 浮力修正的DSM  
-- 浮力修正的 $k-\varepsilon$   
--- 普通DSM

模拟冷热气层界面处温度突变现象的标准来看,考虑浮力修正的 DSM 的结果比无浮力修正的 DSM 和有浮力修正的  $k-\varepsilon$  的结果好一些。

用双流体模型得到的重力分层流温度横剖面及其在纵向的变化示于图 7,可以看出:温度剖面存在着明显的温跃;温度剖面的形状沿纵向变化不大。这说明热量在竖直方向上的传递较为缓慢。

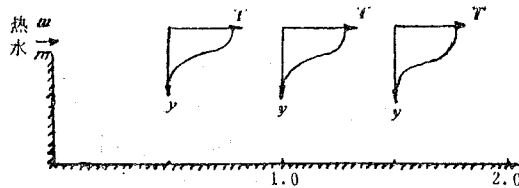


图 7 重力分层流在几个典型位置上的温度剖面

#### 4 讨论

(1) 考虑与不考虑浮力作用的湍流模型所得到的计算结果有明显的差别,  $k-\varepsilon$  模型和 DSM 均如此。在所研究的两种典型过程中,浮力的影响都是起了在竖直方向上抑制湍流混合的作用,导致了冷热流体界面处温度的突变。

(2) 考虑浮力修正的 DSM 成功地算出了顶棚与墙壁衔接处存在的小回流区,这是一种所谓的二次流,DSM 能多渠道地考虑浮力的作用,在 DSM 方程的压力应变项和产生项中都直接包含着浮力的影响;DSM 还能反映雷诺应力及湍流热通量的各向异性,并在一定程度上反映出反梯度扩散现象,这些都是  $k-\varepsilon$  模型所不及的。但是 DSM 所需要的计算量比  $k-\varepsilon$  模型大数倍,湍流模型伴随着的概念的难易和计算的经济性在工程计算中是不能不考虑的。

(3) 双流体模型能更形象如实地反映由体积力的存在所可能导致的反梯度扩散现象,从这点上讲,它应当优于单流体模型,这在本文的计算结果中得到了初步体现,但双流体模型的收敛比 DSM 似乎更加困难。

#### 5 结论

(1) 在受浮力影响或由浮力控制的湍流体系中,湍流模型需要考虑浮力作用。

(2) 在浮力修正的  $k-\varepsilon$  模型可以给出满足工程需要的均流流动图案;考虑浮力作用的雷诺应力微分方程模型可以较好地模拟湍流输运特性。给出较合理的精细的流动图案,但概念复杂,计算量大;双流体模型在模拟反梯度扩散方面有独到之处,但计算的收敛性欠佳。

(3) 作为工程计算的第一步,建议选用有浮力修正的  $k-\varepsilon$  模型。DSM 目前已可在普通微机上求解,且结果的合理性较好。随着计算机能力的提高,DSM 可望有广阔的应用前景。双流体模型在克服了数值求解的困难后,可望更加显示出它在物理上的优越之处。

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Rodi W, Turbulent Buoyant Jets and Plumes, Pergamon Press, UK, 1982:126-146.
- [ 2 ] Launder B E, Low Reynolds Number Turbulence Near Walls, UMIST, Manchester, TFD/86/4.
- [ 3 ] 范维澄、郑丽丽, 中国科技大学学报, 17(1987)。
- [ 4 ] 范维澄, 湍流双流体模型及其改进, 中国科学 A, 1987, 第七期, 704-710。
- [ 5 ] Zhanghui and Fan Weicheng, Field Modeling of Turbulence of Smoke in Fires, CIB/W14, Chengdu Meeting, 1988.
- [ 6 ] 霍然、范维澄, 通风口位置对室内火灾的影响, 消防协会年会, 1988。

## On Buoyancy-Influenced Turbulence Models

Fan Weicheng    Zhanghui    Zheng Lili

*(Department of Engineering Thermophysics)*

### Abstract

Some modifications of the present turbulence models for predictions of buoyant flows are presented. Several typical buoyant flows are predicted by use of the modified turbulence viscosity model, Reynolds stress model and the two-fluid model of turbulence. Finally, the proposals are given for choosing adequate turbulence models of buoyant flows.

**Key words:** turbulence model, buoyant flow, prediction.

# 添加剂和杂质对四方相 $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ 基陶瓷显微结构及性能的影响

刘杏芹                  中田孝夫

(中国科学技术大学)                  (日本茨城研究所)

## 摘 要

研究了添加剂和杂质对  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  基四方氧化锆的制备条件、显微结构和力学性能的影响。结果表明：少量  $\text{Al}_2\text{O}_3$  添加剂可降低烧结温度，改善烧结性，并能提高四方  $\text{ZrO}_2$  的力学性能；工艺过程中混入的  $\text{SiO}_2$  杂质主要聚集在  $\text{ZrO}_2$  晶粒之间，使材料呈现一种特殊的显微结构，还对该材料的低弯曲强度和高断裂韧性的成因进行了讨论。

**关键词：**四方氧化锆，显微结构，陶瓷力学性能。

**中图法分类号：** TB321

## 1 前言

四方  $\text{ZrO}_2$  陶瓷多晶 (TZP) 除了其本身的高晶格强度外，由于特殊的强化机理，使其在室温下具有弯曲强度大和断裂韧性高等优良的力学性能，因而是一种可期待被广泛应用的新型工程结构材料。

但是纯  $\text{ZrO}_2$  在室温下的稳定相为单斜，即便是通过急冷得到四方相，也会自发地向单斜相转变。为了得到高性能的四方相  $\text{ZrO}_2$  陶瓷材料，一方面尝试添加多种稳定剂以使四方相稳定到室温<sup>[1-3]</sup>，另一方面在材料制备过程中采取提高原料纯度，控制烧结条件，添加烧结助剂以改善烧结性能等措施。本工作着重对杂质  $\text{SiO}_2$  和少量烧结助剂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  对四方  $\text{ZrO}_2$  多晶陶瓷材料显微结构及性能的影响进行了研究。

## 2 实验

### 2.1 样品制备

把纯度均匀为 99.4% 以上的  $\text{ZrO}_2$  原料粉和主要稳定剂粉 ( $\text{CeO}_2$ ) 用湿式球磨法混合粉碎 72h，经过干燥 (120℃, 24h)、热处理 (1350℃ 保留 4h)、后再球磨 72h，用喷雾干燥法

1989年6月28日收到。

造粒。所得粉料用冷等静压法以120MPa的压力加压成形，压块体在快速升温炉内以最高温度1450℃~1630℃下烧结4h，烧结体按测试要求用金刚石刀具进行切割、磨光。

三种试料，

No.1 86mol% ZrO<sub>2</sub> + 14mol% CeO<sub>2</sub>，另加0.8wt% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>；

No.2 组成同 No.1，但不加 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>；

No.3 组成同 No.1，不同的是用瓷球磨筒而不是塑料球磨筒做混合粉碎容器。

## 2.2 测试和性能评价

试样的化学组成分析是用X射线荧光分析装置(理学电机工业制 3063M型)进行的。用X射线衍射仪(理学电机制RAD-3A型)确定物相。试样密度和气孔率测定采用阿基米德法，并以氧化铝夹具在膨胀计上做了25℃~1000℃的热膨胀率试验。用三点弯曲法测定了试样的弯曲强度。其断裂韧性是用SENB法(single edge notched beam method)测量的，样品尺寸为3×4×40mm，缺口宽度为0.1mm，深度为试样高度的1/4，十字头的速度为0.5mm/min，跨度为30mm。此外，用扫描电镜和电子探针微区扫描(日立制作所制 X-650)分别对试料的表面，断面进行了形貌观察和特定元素的分析。

## 3 结果与讨论

### 3.1 试样显微结构

图1和图2是烧结体表面与断面的SEM照片。可以看出较低温度(1480℃)下，No.1和No.2试样都未充分烧结，还可以看到粉料团粒的轮廓。1570℃时，No.1试样成为良好的均一致密烧结体，而没有加 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>的No.2则烧结仍不充分，未良好烧结的空隙清晰可见，显示了 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>的助烧结作用。

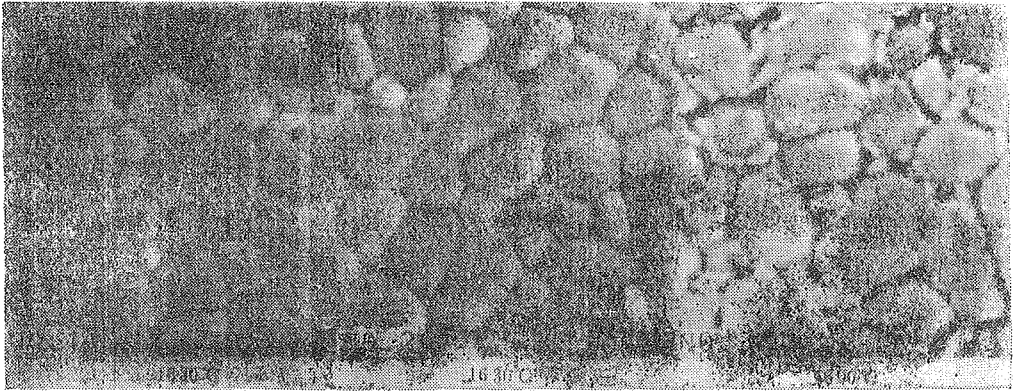


图1 烧结样品自由表面的SEM照片(放大倍数2.00K)

从这些SEM照片还可以看出，No.1和No.2试样的晶粒尺寸和形状都很相近，但No.3则显著不同，其粒径较大而呈圆形，空隙也多。这跟杂质 SiO<sub>2</sub>的混入密切相关。No.3试样是用瓷球磨筒混合粉碎，组成分析表明其中混入了0.67wt% SiO<sub>2</sub>，而另两个样品中则没有检出。XMA的分析指出Si是富集在ZrO<sub>2</sub>晶粒之间(图3)，也就是说以 SiO<sub>2</sub>为主的物相主要充填于晶粒间界。烧结过程中，它们在较低温度即可形成液相，使ZrO<sub>2</sub>晶粒容易移动，粒子变圆，晶粒成长比较容易，所以正如图2中可看到的，No.3试样在较低温度(1480℃)

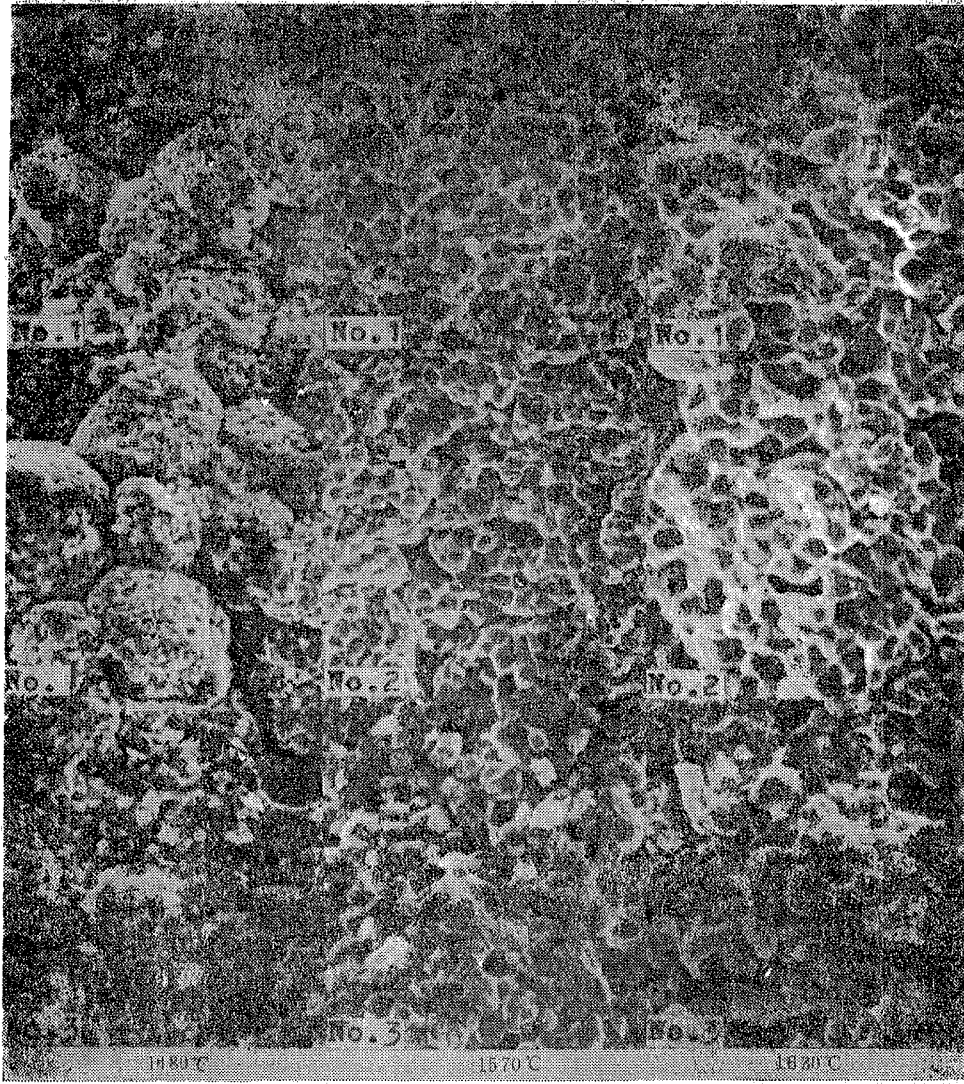


图2 烧结样品断面的SEM照片(放大倍数1.00K)

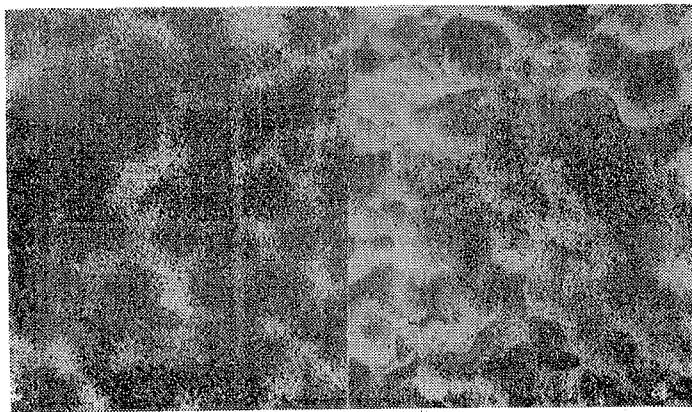


图3 No,3试样的断面SEM照片和Si的XMA照片



就可充分烧结,随着烧结温度的升高,晶粒迅速长大,于是就形成了粒径大、空隙多、粒子呈圆形的微结构。这样的微结构会给材料性能带来很大影响。

### 3.2 试样物相

研究表明,晶粒尺寸对四方  $ZrO_2$  相的稳定性具有明显作用。文献<sup>[2]</sup>指出:存在着一个临界尺寸,只有当粒径小于这一尺寸时四方  $ZrO_2$  才能在室温下稳定,也就是说晶粒尺寸越小四方相越稳定。X射线衍射分析结果表明1450℃~1630℃下制备的No.1和No.2烧结体都是四方相。而No.3由于  $SiO_2$  的存在,随着烧结温度升高,晶粒迅速成长,气孔也随着变大,

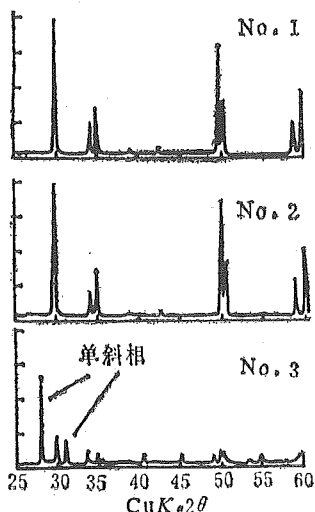


图4 烧结样品的X光衍射谱图

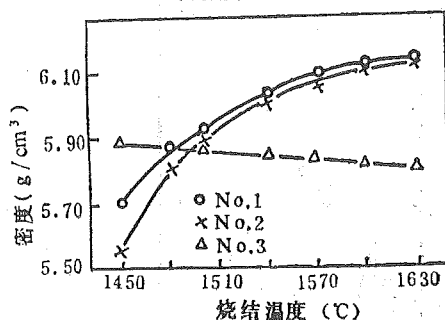


图5 体积密度和烧结温度的关系

材料的致密性差,粒子所受束缚力小,从而易发生马氏体相变。当烧结温度较低时是四方相,在1540℃下的烧结样品就有单斜相生成,随着烧结度升高单斜量增多,1630℃时已达70%。图4所示是1630℃时的烧结样品的X射线衍射谱图,可见No.1和No.2试样为单一四方相,而No.3则以单斜相为主。

### 3.3 材料的烧结状况和热膨胀系数

图5示出了试样密度与烧结温度的关系。可以看出,随着烧结温度提高,No.1和No.2烧结体逐渐致密化,超过1600℃时, No.1试样的相对烧结密度达到97.2%。而没有加  $Al_2O_3$  的No.2试样由于其烧结性不如No.1,直到1630℃时其密度才接近No.1,这跟SEM显微结构观测的结果(图2)完全一致。这些结果证实了  $Al_2O_3$  添加物对  $ZrO_2$  陶瓷的助烧结作用。

试样No.3由于晶粒间界上液态  $SiO_2$  相的存在,使  $ZrO_2$  粒子容易移动,在较低温度比其他样品烧结性好(见图2),从而呈现较高的试样密度和较小气孔率。随着烧结温度升高,形成了粒径过大而又多空隙的微结构,因而体积密度随着温度的升高而明显下降。特别是当烧结温度高于1540℃时,样品中产生大量单斜相,而  $ZrO_2$  的  $T \rightarrow M$  的相变会引起4%的体积膨胀,从而导致开裂,致使样品密度显著下降。1600℃时, No.3的相对烧结密度仅为92.8%而内气孔率则高达7%。

图6是试样(1600℃烧结)热膨胀率测定结果。从图上可以看出No.1和No.2试样在25℃~1000℃温度范围内随温度升高线性增长,在相同温度显示出大致相同的热膨胀率。而

No.3 试样由于已有单斜存在, 在230℃时因单斜向四方相的转变使试样有一较大收缩, 当温度再升高时就显示出和No.1和 No.2 相似的热膨胀特性, 从而形成如图 6 所示这样一种特征的热膨胀曲线。

### 3.4 弯曲强度和断裂韧性

由图 7 可以看出, No.1和No.2试样的弯曲强度随烧结温度升高而增大, No.1在 1600℃ 时达最大值(63.7kg/mm<sup>2</sup>), 而No.2在相同烧结温度下其弯曲强度要比No.1约低10kg/mm<sup>2</sup>. No.3 呈现出相反的趋势, 在低温烧结时弯曲强度较好, 随着温度升高则明显下降, 且越来越低, 到1600℃时仅有34.1kg/mm<sup>2</sup>, 竟比No.1低了约30kg/mm<sup>2</sup>, 这显然与 No.3 试样的特殊显微结构密切相关。

陶瓷材料的强度不仅取决于粒子之间的结合力、材料内所存在的缺陷以及缺陷扩大时的

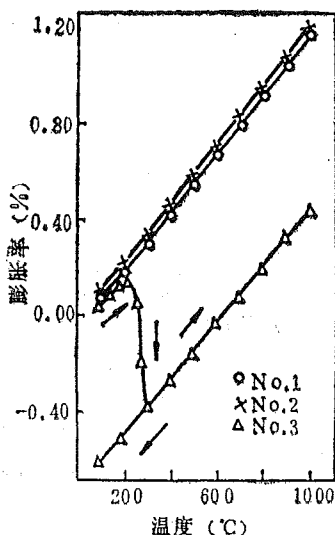


图 6 烧结样品热膨胀曲线

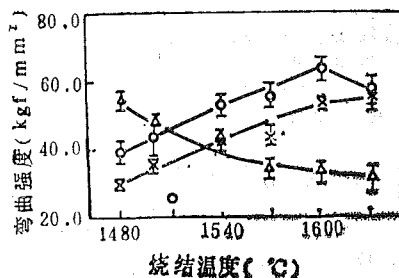


图 7 样品的弯曲强度和烧结温度的关系

阻力即“断裂韧性值”, 而且还与烧结材料粒子的大小有关。强度  $\sigma$  与粒径  $D$  和气孔率  $p$  有如下关系<sup>[3]</sup>

$$\sigma = kD^{-a}e^{-bp}$$

这里  $a, b, k$  均为常数。从此式不难看出, 材料强度随晶粒尺寸和气孔率的增大而降低。No.2 试样由于没有加  $Al_2O_3$  助烧结剂, 烧结性没有 No.1 好, 致密性比 No.1 差 (特别是较低温度), 所以强度也就比较低。

No.3 试样不仅气孔多而且粒径大, 按 Kundsén 公式强度比前两个样品低。聚集于晶粒之间的脆性玻璃态  $SiO_2$  物相可能导致沿晶断裂, 或许是 No.3 试样强度低的重要因素。

根据力学的观点, 强度  $\sigma_f$  和断裂韧性  $K_{IC}$  有如下关系<sup>[4]</sup>

$$\sigma_f = K_{IC} / (\pi c)^{1/2}$$

这里  $c$  是能成为破坏源的缺陷尺寸。遵循这个公式人们通过改善工艺开发了许多高强度的陶瓷材料。图 8 示出材料断裂韧性和烧结温度之间的关系。从图中可以看到在相同烧结温

度下 No.1 的韧性比 No.2 要高  $0.8 \text{ MN/m}^{3/2}$  左右。比较图 7 和图 8 中相应曲线可以发现，弯曲强度和断裂韧性都随试样烧结温度单调上升，根据上式可以推断两种试样的缺陷尺寸相近且遵循相似的形式规律。

从图 8 中还可看出 No.3 的断裂韧性比 No.1 高得多， $1600^\circ\text{C}$  的烧结体， $K_{Ic}$  值比 No.1 要高  $1.3 \text{ MN/m}^{3/2}$ 。  $K_{Ic}$  很高而  $\sigma_f$  值却很低，这似乎可以简单的归因于缺陷尺寸  $c$  很大之故，正如图 1，图 2 试样的 SEM 照片所示，No.3 试样微结构有严重缺陷，强度低，但是，它的  $K_{Ic}$  值却比 No.1，No.2 高。这是因为 No.3 有较大的  $\text{ZrO}_2$  晶粒，加之  $\text{SiO}_2$  杂质对四方相的反稳定作

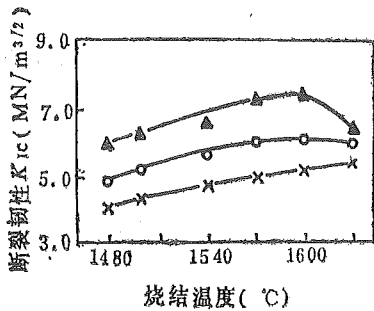


图 8 样品的断裂韧性和烧结温度的关系

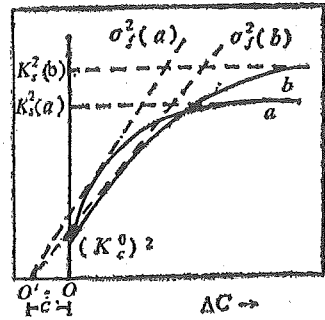


图 9  $\sigma_f$  和  $R$ -曲线行为的关系<sup>[4]</sup>

用，在外应力作用下更容易发生  $T \rightarrow M$  相变。这样不仅在相变量上而且在相变速度上都将超过 No.1，No.2 试样，其增韧作用<sup>[5]</sup>得到充分发挥。 $1630^\circ\text{C}$  烧结的试样，已经自发进行了  $T \rightarrow M$  相变 ( $M$  相占 70%)，因而大大减弱了增韧机制，其韧性显著下降 (图 8)。当然这种解释并不能完全令人信服，因为 No.3 样品那样的微结构 (图 1) 应倾向于沿晶断裂而不是粒内断裂。所以对于这样高的断裂韧性还应考虑另外的增韧机理。

逆井基次<sup>[4]</sup>在讨论强度与韧性的关系时曾指出，那些具有上升型  $R$ -曲线，即裂纹成长阻抗 ( $R$ ) 值随裂纹延伸尺寸而增大的材料体系，完全可能出现  $K_{Ic}$  高而  $\sigma_f$  低的结果。图 9<sup>[4]</sup>

( $K_{Ic}^2$  对裂纹延伸尺寸  $\Delta c$  做图) 可以示意地说明  $R$ -曲线行为和强度，韧性的关系。可以看到  $\sigma_f^2$  是自表征裂纹长度  $c(0')$  的  $O'$  点所做的  $R$ -曲线切线斜率，而断裂韧性则由  $R$ -曲线的极限值  $K_{Ic}^2$  决定。不同材料结构可以有不同的  $R$ -曲线。如图 9 中所示，材料  $a$  的韧性值 (由  $K_{Ic}^2(a)$  决定) 小但强度 (由  $\sigma_f^2(a)$  求得) 大；而材料  $b$  相反。

$R$ -曲线的物理本质，可用残余应变能效应 (residual strain energy effect) 以及粒子之间“咬合”而产生的粒子桥作用 (grain bridging effect or grain interlocking effect) 来解释<sup>[4]</sup>。所谓残余应变能是指在外应力作用下，在裂纹 (由应力产生或早就存在，或人为为缺口等) 边缘附近形成了“加工区域”，在这个“加工区域”中常伴有相转变和微裂纹，产生压缩性的弹性应力部分地抵消在裂纹附近的外应力。所谓粒子桥效应是和纤维增强复合材料中所常见的沿断裂面间的纤维牵伸作用相类似的效应。No.3 试样的  $\text{ZrO}_2$  晶粒之间所充填的非晶  $\text{SiO}_2$  相起到了象纤维复合材料中的那种“纤维”粒子桥作用，从而使外应力降低，韧性值增大。它的高韧性不同于 No.1，No.2 试样的增韧机理。

#### 4 结论

(1) 加少量 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 能改善四方 $\text{ZrO}_2$ 的烧结性能,降低烧结温度,并能使材料的力学性能有明显提高。添加0.8wt%的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,材料强度可提高约 $10\text{kg}/\text{mm}^2$ ,韧性增加约 $0.8\text{MN}/\text{m}^{3/2}$ 。

(2) 杂质 $\text{SiO}_2$ 的混入给材料的微结构和力学性能带来很大影响,使烧结体的粒径大,气孔多,从而致密性差。特别是在较高温度下烧结的试样,含有相当多的单斜相,显示了 $\text{SiO}_2$ 的反稳定作用。这种试样具有很低的强度但断裂韧性却很高。高韧性的来源除了 $T \rightarrow M$ 相变增韧以外,还可能有着类似复合材料的增韧机制。

本工作是在日本日立化成工业株式会社茨城研究所进行的。在此特向曾给予帮助的先生们表示衷心感谢。

#### 参 考 文 献

- [1] 渡部俊也,  $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2$ 系正方晶系ジルコニア烧结体の相转移制御, 窯业协会昭和59年年会讲演予稿集。
- [2] Nettleship and Stevens R, *Int. J. High Technology Ceramics*, **3** (1987), 1-32.
- [3] Kundsén F P, *J. Amer. Ceram. Soc.*, **42** (1959), 376.
- [4] 逆井基次“ファインセラミックスの”评价技術とその应用第十九回高温材料技術讲习会, 社団法人日本セラミックス協会, 1988年, 91~100.
- [5] Claussen N, Rühle M, Heuer A H. (eds) “Advances in Ceramics vol 12” Science and Technology of Zirconia II, pp 325-351, The Am. Ceram. Soc. Columbus, Ohio, 1983.

# Influences of Dopant and Impurity Upon the Microstructure and Mechanical Properties of CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>-Based Ceramics

Liu Xingqin

*(University of Science and Technology of China, China)*

Takao Nakada

*(Ibaraki Research Laboratory, Japan)*

## Abstract

The influences of dopant and impurity on the preparation conditions, the microstructure, mechanical properties, etc. of ceria(CeO<sub>2</sub>)stabilized tetragonal zirconia polycrystal (TZP) were studied. The results showed that small amount of dopant Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> could decrease the sintering temperature and improve the sintering behaviour as well as the mechanical properties of TZP. The introduction of impurity SiO<sub>2</sub> during the preparation process mainly aggregated at the grain boundaries, forming a special microstructure. The low binding strength and high fracture toughness were discussed on the basis of its microstructure.

**Key words:** tetragonal zirconia, microstructure, mechanical properties of ceramics.

# 表面边界模型智能生成的研究

郭立

(电子技术基础部)

## 摘 要

提出一种从拓扑信息智能地产生表面边界模型的算法,这种算法可自动地检测和消除病态表面,正确地产生形体。

**关键词:** 拓扑信息,表面边界模型,病态表面的消除,计算机图形学。

**中图法分类号:** O157.9,TP391.72

## 1 前言

在计算机图形学中,常用线模型和表面边界模型表示形体。线模型结构简单,且易于处理,但只给出了形体的部分信息。表面边界模型可提供形体的表面信息,在实际中有广泛的应用,但它的建立是困难和繁琐的,且不能明确定义由表面所包围的实体。

因此,综合这两种模型的优点,直接由形体的拓扑信息,智能地产生表面边界模型,近来已引起人们的探讨。研究工作有进展,却不能令人满意。

Mesley-Markowsky<sup>[1]</sup>的算法是基于拓扑和集合的概念,但仍需要几何信息,算法只限于形体的边是直线段,形体的面是平面。

Courter-Brewer<sup>[2]</sup>的算法可自动地由线模型转换成表面边界模型,但它不能给出形体的完整信息,又不能处理有空洞的形体。

本文提出的算法可由拓扑信息自动产生形体的表面边界模型,并能完整地描述一个形体。算法给出了网孔、表面、形体的分层信息,并建立了识别与消除病态表面的一组规则;基于这些信息与规则,应用图论的方法,求出基本回路集、网孔集、生成形体的真实表面;利用网孔的有向性表示出表面的方向,从而准确地定义形体。与国际上同类问题的研究相比,它可智能地生成真实表面、消除了病态表面,将形体模型的复盖域扩展到非平面体,并可处理有空洞的形体。

1989年8月24日收到。

## 2 信息输入与基本回路集的产生

### 2.1 信息输入

需输入以下信息:

- ① 顶点信息 顶点的序号及三维坐标值。
- ② 边、顶点关联信息 规定边  $e_k$  是由二个不同顶点  $i, j$  决定的, 若  $i < j$ , 用  $+e_k$  表示从顶点  $i$  到顶点  $j$  的有向边; 反之, 若  $i > j$ , 则用  $-e_k$  表示。边信息包括边的序号、方向、类型(直线段或曲线段)、边的起点和终点。
- ③ 空洞信息 空洞用Hole-name(Vertex subset of hole) within (Vertex Subset) 输入。

其中, Hole-name为空洞名, Vertex subset of hole 为空洞界面的顶点集, Vertex Subset 则为一有界面的顶点集, 它含有顶点集 Vertex subset of hole。

### 2.2 基本回路集的产生

用邻接矩阵  $D$  表示形体的边、顶点关系,  $D$  为一  $v \times v$  二维数组,  $v$  为顶点数。  $D$  的元素  $d_{ij}$  为

$$d_{ij} = 1 \quad \text{若顶点 } i \text{ 与顶点 } j \text{ 存在边}$$

$$d_{ij} = 0 \quad \text{若顶点 } i, j \text{ 间不存在边}$$

$D$  所表示的形体边、顶点关系实质上是一个图, 表示复杂形体的边、顶点关系的图往往是不连通的。为了求出基本回路, 采用顶点融合法<sup>[3]</sup>, 求出图的连通子图、每个连通子图的顶点集和边集。

应用 Paton<sup>[4]</sup> 算法可求出每个连通子图所对应的基本回路集。Paton 算法的输入是邻接矩阵  $D(N, N)$ , 并将图的顶点标记为:  $1, 2, \dots, N$ 。算法的思路是逐个地检查每个顶点的关联边, 并逐步形成一棵生成树, 若每一个新的被检验的边与原来的部分树形成回路, 则输出这一回路, 否则将该边加到树上。程序中用一个变量记录连通子图的个数, 并对生成的每个基本回路编号, 纪录每个基本回路所遍历的边。

图 1 是一个有空洞的形体, 算法产生的连通子图  $G_1$  和  $G_2$  如表 1 所示, 生成的二组基本回路集如表 2 所示。

每个基本回路由树的一个连支和树支构成。若连通图有  $v$  个顶点、 $e$  条边, 则产生  $e - v + 1$  个独立的基本回路, 形成了基本回路集。

Paton 算法是有效的, 它是一种宽度优先搜索算法(BFS), 计算时间为  $O(\max(n, e))$ , 一般  $e \geq n$ , 因此其时间复杂度为  $O(e)$ , 空间复杂度为  $n^2$  ( $n$  为图的顶点数,  $e$  为边数)。

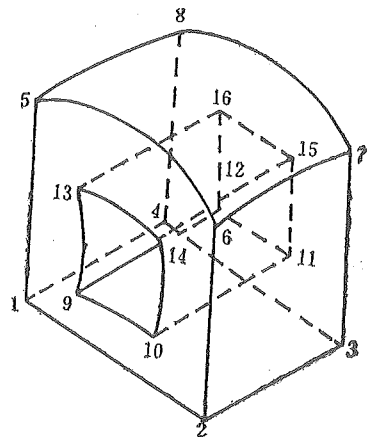


图 1 有空洞的形体

表 1 连通子图 G1 和 G2

G1	边	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$e_5$	$e_6$	$e_7$	$e_8$	$e_9$	$e_{10}$	$e_{11}$	$e_{12}$
	顶点	1,2	1,4	1,5	2,3	2,6	3,4	3,7	4,8	5,6	5,8	6,7	7,8
G2	边	$e_{13}$	$e_{14}$	$e_{15}$	$e_{16}$	$e_{17}$	$e_{18}$	$e_{19}$	$e_{20}$	$e_{21}$	$e_{22}$	$e_{23}$	$e_{24}$
	顶点	9,10	9,12	9,13	10,11	10,14	11,12	11,15	12,16	13,14	13,16	14,15	15,16

表 2 生成基本回路集

G1的基本回路集 $L(G1) = \{l_1, l_2, \dots, l_5\}$	G2的基本回路集 $L(G2) = \{l_6, l_7, \dots, l_{10}\}$
$l_1 = e_1 + e_5 - e_9 - e_3$	$l_6 = e_{13} + e_{17} - e_{21} - e_{15}$
$l_2 = e_9 + e_{11} + e_{12} - e_{10}$	$l_7 = e_{21} + e_{23} + e_{24} - e_{22}$
$l_3 = e_2 + e_8 - e_{10} - e_3$	$l_8 = e_{14} + e_{20} - e_{22} - e_{15}$
$l_4 = -e_{10} + e_9 - e_5 + e_4 + e_7 + e_{12}$	$l_9 = -e_{22} + e_{21} - e_{17} + e_{16} + e_{19} + e_{24}$
$l_5 = -e_6 + e_7 + e_{12} - e_8$	$l_{10} = -e_{18} + e_{19} + e_{24} - e_{20}$

### 3 网孔的求解

**定义** 在一个连通图中，若某一回路所围成的区域内没有任何边或点，则该回路称为网孔；若回路的外部区域不包含有任何边或点，则该回路称为外网孔。

网孔的求解有以下规则：

**规则 1** 网孔的每个顶点的度数都为 2。

**规则 2** 对于一个连通图的全部回路，属于网孔的回路比其它回路的边数要少。

**规则 3** 给定  $e$  条边的连通图和它的回路边数和数组  $F$ ，若存在一个回路组合数组  $C_r$ ，使得  $C_r \cdot F$  为最小且  $C_r \cdot F = 2e$ ，则  $C_r$  所组合的回路是且仅是不同网孔的组合。

网孔的求解步骤：

① 由基本回路集构造基本回路矩阵  $B$ ， $B$  为  $l \times e$  阶， $l$  为基本回路的个数， $e$  为边数。 $B$  的元素  $b_{ij} = 1$ ，则边  $e_j$  属于回路  $i$ ；若  $b_{ij} = 0$ ，则边  $e_j$  不属于回路  $i$ 。

② 对  $B$  的各行，进行所有可能的环和运算，删去冗余项。设  $E(l_1), E(l_2)$  为回路  $l_1, l_2$  的边集，其环和边的集为

$$E(l_1 \oplus l_2) = E(l_1) \cup E(l_2) - E(l_1) \cap E(l_2)$$

若  $E(l_1) \cap E(l_2) = 0$ ，则  $E(l_1 \oplus l_2) = E(l_1) \cup E(l_2)$  为冗余项。

将基本回路矩阵  $B$  与删去冗余项的各环和，按边数和递增的次序排列，得到边递增回路矩阵  $B_1$ ， $B_1$  每行“1”的个数应不少于前一行。

③ 设置回路的边数和数组  $F$ ， $F$  含有  $n$  个元素， $n$  为  $B_1$  的行数； $F$  的第  $k$  个元素  $F(k)$  为  $B_1$  中第  $k$  行的“1”的个数。设置回路组合数组  $C_k$ ， $C_k$  为含有  $n$  个元素的一维数组， $n$  为  $B_1$  的行数； $C_k$  中有  $e - v + 2$  个元素为 1，其余为零，这样使得  $C_k$  所组合的回路数与欧拉公式规定的形体（不含空洞）的面数一致； $C_k$  中各元素 1 所对应的序号即为参加



组合的那些回路的序号。

④ 求出网孔集。边数和数组的每个元素代表每个回路的边数， $C_k$  表示从  $B_1$  中每次选  $e-v+2$  个回路的组合，其中第  $j$  个元素为“1”表示入选的回路  $j$ ，反之则为零；这样  $C_k \cdot F$  为参加组合的那些回路的边数总和。求出  $C_1 \cdot F, C_2 \cdot F, \dots, C_p \cdot F$ ，计算出其中最小项并记为  $C_{\min} \cdot F$ ，检查  $C_{\min} \cdot F$  是否等于  $2e$ ，若是，则  $C_{\min}$  中“1”的元素的序号即为所求的网孔集。求出的网孔数应为  $e-v+2$ 。

例如图 1 的连通子图  $G_1$ ，经上述算法求出  $B_1$  后，得  $F = (4, 4, 4, 4, 4, 4, 0 \dots 0)$ 。

$$C_{\min} = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, \dots 0), C_{\min} \cdot F = 24$$

相应的网孔集为  $L\{l_1, l_2, \dots, l_6\}$

$$\begin{aligned} l_1 &= (e_1 + e_5 - e_9 - e_3) & l_2 &= (e_9 + e_{11} + e_{12} - e_{10}) \\ l_3 &= (e_2 + e_8 - e_{10} - e_3) & l_4 &= (e_4 + e_7 - e_{11} - e_5) \\ l_5 &= (-e_6 + e_7 + e_{12} - e_8) & l_6 &= (e_1 + e_4 + e_6 - e_2) \end{aligned}$$

#### 4 真实表面的生成与形体描述

网孔所围成的区域并不一定就是形体的表面，尤其是对有空洞的形体。因此需要对形体的表面进行精确定义。

由网孔（非外网孔）的边按逆时针方向排列，形成了简单表面的边界。

若  $f$  是一复杂表面，则  $f$  的边界（记为  $\partial f$ ）可由网孔  $l_0, l_1 \dots l_k (k \geq 0)$  表示，且具有以下性质：

①  $\partial f = l_0 \cup l_1 \cup \dots \cup l_k$ 。

②  $l_0$  是外网孔，它是由  $l_0$  的顶点逆时针排列构成的； $l_1, \dots, l_k$  则为相应的网孔顺时针排列组成。 $l_0$  表示复杂表面的外边界， $l_1, \dots, l_k$  则为复杂表面的内边界。

③ 复杂表面是由  $l_0$  内部， $l_i (i \geq 1)$  外部的点集以及  $\bigcup_{i=1}^k l_i$  的点集组成。

④ 网孔  $l_0, l_1, \dots, l_k$  之间均不相交。

##### 4.1 真实表面的生成步骤

首先根据输入信息的空洞描述语句，识别出形体的复杂表面，求出其外边界  $l_0$  和内边界  $l_1, l_2 \dots l_k$  等，在空洞描述语句中，点集 Vertex Subset 为外网孔  $l_0$  的顶点集合，而 Vertex subset of hole 是网孔  $l_1$  的顶点集合，且  $l_0$  包含  $l_1$ 。根据复杂表面的定义知：空洞语句给出了一个复杂表面  $f$ ， $l_0$  为  $f$  的外边界、 $l_1$  为  $f$  的内边界。例如图 1 中输入的空洞描述语句为

Hole-1 (9,10,14,13) Within (1,2,6,5)

可求出： $l_0 = (e_1 + e_5 - e_9 - e_3)$      $l_1 = (-e_{13} + e_{15} + e_{21} - e_{17})$

由  $l_0, l_1$  表示的复杂表面记为  $f_1$ 。且  $\partial f_1 = l_0 \cup l_1$ 。同理可求出复杂表面  $f_2$ ，且  $\partial f_2 = l'_0 \cup l'_1$ ，其中  $l'_0 = (-e_6 + e_7 + e_{12} - e_8)$ ， $l'_1 = (e_{18} + e_{20} - e_{24} - e_{19})$

其次，对其余不是复杂表面边界的网孔，均作简单表面处理。例如图 1 的简单表面的边界为

$$\partial f_3 = e_9 + e_{11} + e_{12} - e_{10}$$

$$\partial f_5 = e_4 + e_7 - e_{11} - e_5$$

$$\partial f_7 = e_{21} + e_{23} + e_{24} - e_{22}$$

$$\partial f_9 = e_{16} + e_{19} - e_{23} - e_{17}$$

$$\partial f_4 = e_2 + e_8 - e_{10} - e_3$$

$$\partial f_6 = e_1 + e_4 + e_6 - e_2$$

$$\partial f_8 = e_{14} + e_{20} - e_{22} - e_{15}$$

$$\partial f_{10} = e_{13} + e_{16} + e_{18} - e_{14}$$

## 4.2 消除病态表面

上述产生的表面，可能有以下三种病态情况：

① 两面相交，但交线不是面的边界线，如图 2 (a) 所示。

② 一个面的一条边的内点位于另一个面内，如图 2 (b)。

③ 一条边同时属于二个以上的面，如图 2 (c) 所示。

为了识别与消除这些病态表面，引入

**规则 1** 两面相交，交线必须是面的边界。

**规则 2** 一个面的边的内点不会落在另一个面内。

**规则 3** 形体的任何一条边，只能属于二个表面的边界。

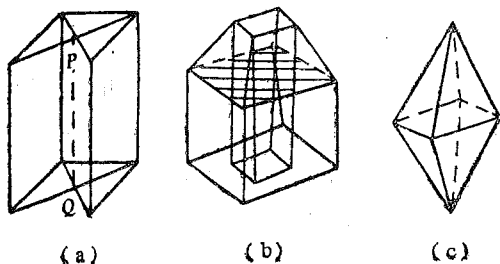


图 2 病态表面

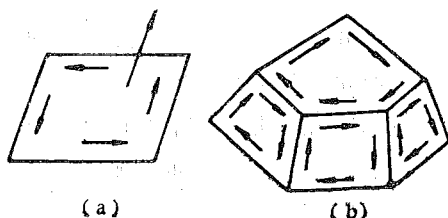


图 3 形体的表示

消除第一种病态，可以引入切割边（交线），如图 2 (a) 中的  $PQ$  线段<sup>[6]</sup>，消除第二种病态可由网孔的定义、规则加以识别与排除；消除第三种病态表面，可通过检查表面边界表达式，找出同时属于二个以上表面的边集，并删去由这些边集组成的边界所表示的表面，即在网孔的求解步骤②中，由  $B_1$  删去由这些边集所构成的回路，重新组成  $B_1$ ，再进行求解。

## 4.3 真实表面的检验

对于仅由简单表面所构成的形体，用欧拉公式检验，对于含复杂表面的形体，则由修正的欧拉公式  $f = e - v + 2(s - h) + r^{[5]}$  来验证（式中  $e$  为边数， $h$  是穿过形体的空洞数， $s$  是不连接形体的个数， $r$  是形体表面所具有的网孔数，不含外网孔）。例如图 1 中， $e = 24$ ， $v = 16$ ， $s = 1$ ， $h = 1$ ， $r = 2$ ，可得  $f = 10$ ，即该形体具有 10 个表面。

## 4.4 形体的描述

形体是  $IR^3$  空间的一个非空、有界的连续封闭子集。形体的边界可由表面的并来描述；我们将形体定义为一组有向表面所包围的实体。

为了明确地指出由表面所包围的实体部分，需要规定表面的方向。由表面边界所具有的方向，按右手法则定出表面的方向如图 3 (a) 所示。当每个表面都给出了方向并确认表面边界线两侧方向相反，则可决定表面的的某一侧是否存在实体，如图 3 (b) 所示。

当所有的边均被二个表面共用时，形体构造完毕。

## 4.5 形体的数据结构

如图4所示,形体用形体表、面表、网孔表、顶点表四个层次来表示。这种数据结构的时间复杂性为  $O(e)$ , 空间复杂性也为  $O(e)$ ,  $e$  为形体的边数。

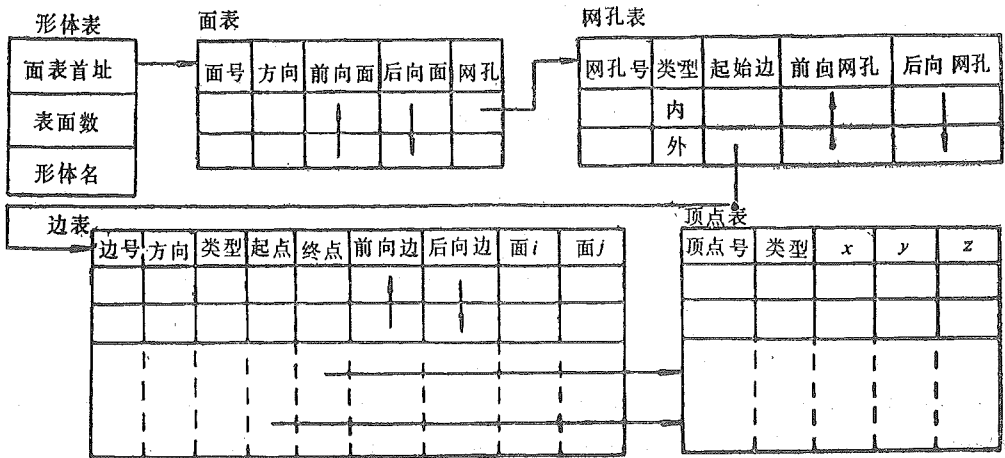


图4 形体的数据结构

## 5 结束语

本算法与文献[1]、[2]相比,有如下改进:

① 采用了由拓扑信息产生基本回路、网孔,进而给出了形体表面的系统算法,可自动建立表面边界模型。

② 引入了内、外网孔的概念,使得算法可处理有空洞的形体;提出了网孔的定义、规则,可消除悬边、孤立顶点和不同面的互相穿透的病态情况,也排除了不同面的互相交迭。

③ 算法中在边表引入了边类型说明,使复盖域可扩充到非平面体;算法删除了由关联二个以上表面边集所组成的伪面,有效地排除了病态解;采用有向边界来标定表面的方向,便于检验形体的封闭性。

## 参 考 文 献

- [1] Wesley M A, Markowsky G, *IBM Journal of Research and Development*, 24 (1980), 582—597.
- [2] Courter S M, Brewer J A, *Computer Graphics*, 20 (1986), 171-178.
- [3] Dunn W R, Chan S P, *Proceedings of the 10th Midwest Symp. on Circuit Theory*, Vol. 5, 1967: 107-114.
- [4] Paton K, *Comm. of ACM*, 12 (1969), 514-518.
- [5] 孙家广、徐隆文, *计算机图形学*, 清华大学出版社, 北京, 1986: 284
- [6] 辜凯宁, *计算机学报*, 9 (1986), 404.

# The Development of the Artificial Production of The Surface Boundary Models

Guo Li

*(Division of Electrical Engineering and Electronics)*

## Abstract

An algorithm is presented for artificilly producing objects with surface boundary models from the topological and geometrical information. It automatically detects and resolves surface anomalies, and eliminates illegal surfaces. This method is a preliminary practice for artificial computer graphics.

**Key words:** topological information, surface boundary models, elimination of illegal surface, computer graphics.

# 微机控制功能性电刺激实验系统\*

周炳和 刘萍  
丁哨卫 吴晓红

(电子技术基础部)

## 摘 要

以 IBM PC/XT 计算机为基础的神经肌肉功能性电刺激实验系统, 根据动物实验原理, 输入适当参数, 产生两路刺激信号的控制电压, 记录相应肌肉的收缩力及其电活动—肌电图 (EMG), 自动控制实验过程。研究具有多种发放率和募集控制方式的肌力调节、电刺激下肌肉的 EMG/力模型、神经肌肉系统的频率响应等。

**关键词:** 功能性神经肌肉电刺激, 肌电图, 募集, 发放率。

**中图法分类号:** R318.04

## 1 引言

在生物医学工程和康复工程中, 功能性神经肌肉电刺激 (FNS, Functional Neuro-muscular Stimulation) 技术是将人工刺激信号作用于那些由脑血管疾病、大脑和脊髓损伤、截瘫等造成的运动功能丧失病人。这些人的损伤部位以下的神经兴奋传导和肌肉收缩功能不受影响, 具有进行功能性运动的潜力, 在外加电刺激脉冲的作用下, 可以恢复一定的运动功能。70 年代以来, 随着电子技术和控制理论以及电子计算机的发展, FNS 技术得到了相当的重视。但是, 由于电刺激技术的限制, 很多 FNS 的研究没有能够提供一种和肌肉随意收缩运动相接近的刺激, 而提供的刺激又往往与生理原理相去甚远。

由已报道的文献[1-3]可知, 大多数上、下肢体的骨骼肌是由肌肉中的运动单位动作电位发放率 (APFR) 和运动单位池中根据“大小原理” (Size Principle) 对运动单位渐次发生顺序募集 (Recruitment) 之间的相互作用而进行随意控制的。这种发放率和募集的控制方案的顺序是, 最小的运动单位首先募集, 其动作电位发放率逐渐增加, 与它相关的肌纤维的收缩力就逐渐增加, 提供小的平滑的肌力增量。随着对肌力增大的要求, 稍大的运动单位通常在某一较高的初始发放率下开始兴奋, 同时发放率逐渐增大, 提供较大的肌力分量。

1989年9月29日收到,

当肌肉中的所有运动单位都已募集而仍要求更大的肌力时，则整个运动单位池同步地增加其发放率，直到肌肉产生最大强直收缩力。

上述过程是所有骨骼肌的一般控制方案，但肌肉之间存在很大的差异。如肱二头肌的快收缩和慢收缩纤维的数量相当平衡，各占 50%。通过运动单位募集可以产生其最大随意收缩力 (MVC) 的 80%，再通过增加动作电位发放率来产生剩余的 20%。第一背侧骨间肌 (FDI) 也是一种成分平衡的肌肉，其纤维的成分与肱二头肌相同，而它使用完全不同的控制模式来产生肌力，运动单位的完全募集只能产生 35% MVC，其余的 65% 则由增加发放率来提供<sup>[2,4,5]</sup>。

由此可知，从肌肉的水平来看，肌肉中各运动单位的 APFR 和运动单位根据“大小原理”发生顺序募集是肌力控制的两个过程。在神经肌肉功能性电刺激实验中，要求实验系统能灵活方便地提供多种刺激信号，实现发放率和募集刺激的不同组合方式，满足不同肌肉的不同控制模式，且尽量符合上述生理原理，并随时可以修改各项参数，适应不同的实验要求。

## 2 实验系统

实验系统的框图如图 1 所示。IBM-PC1 作为主控计算机，由软件通过 D/A 转换器输出两路模拟信号，作为刺激器的控制电压。控制电压 FR 连接至发放率刺激器，其主要部分是一个线性压控振荡器 (VCO)，产生频率随控制电压变化的方波刺激信号，从肌肉的最小运动单位产生融合肌力的频率 (约 10pps，每秒脉冲数) 变化到最大强直肌力的频率 (约 50pps)，宽度为  $100\mu s$ ，输出幅度可调，最大输出时肌肉中的所有运动单位全部兴奋。

控制电压 RE 连接至募集刺激器，它是一个脉冲幅度调制器 (PM)，输出的刺激信号频率为 600pps，宽度为  $100\mu s$ ，幅度则受控制电压的调制。Solomonow<sup>[6]</sup>等报道了这种高频刺激信号可以抑制由发放率刺激产生的动作电位的传导，肌肉的收缩也受到相应的抑制。被阻塞的运动单位的大小与高频刺激信号的幅度有关。关于这种刺激技术的原理将在下面提到。

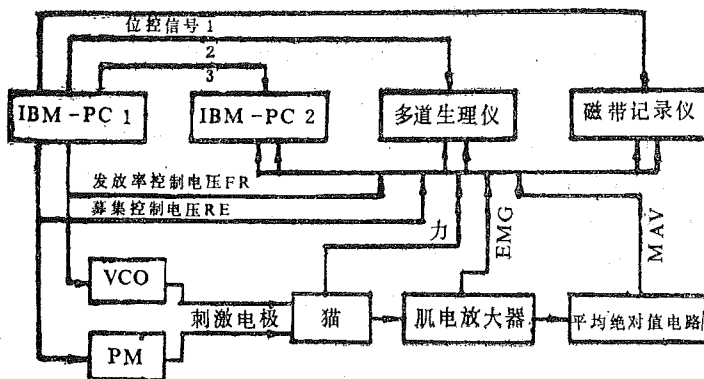


图 1 微机控制神经肌肉电刺激实验系统框图

实验数据包括两路刺激信号的控制电压，EMG 及其平均绝对值 (MAV) 和力，这些数据同时送至 IBM-PC2、多道生理仪和磁带记录仪，它们都受主控机 I/O 口产生的位控信

\* 国家教委“优秀青年教师基金”资助项目。

号的控制。IBM-PC2 在运行数据收集软件的时候，等待位控信号的到达，开始自动收集数据。多道生理仪和磁带记录仪在位控信号到达后开始自动记录实验数据。EMG 由示波器监测。

两个控制电压的参数通过键盘输入，并可以随时更改。主控软件由 BASICA 和汇编语言写成，两路控制电压及其参数在屏幕上显示，便于操作者观察。数据收集软件由 FORTRAN77 和汇编语言写成。

### 3 动物实验

发育成熟的猫用氯醛糖 (60mg/kg) 麻醉后，分离并切除腿部的所有神经分支，仅保留支配所研究肌肉的分支。将坐骨神经上的血液和其它组织清除干净，两组双极性刺激电极置于暴露的坐骨神经上，然后再与各自的刺激器相连，两组电极的间距为 1cm。安放的次序是：发放率刺激施加于近端，而募集刺激施加于远端。两根绝缘的细软导线，顶部裸露 1mm，在运动点和远端肌腱的中间部位借助于注射针头插入肌肉，这样可以得到质量高、重复性好的 EMG 信号，并能减小运动和刺激引起的干扰。EMG 检测电极的间距为 3-5mm。

切断猫的跟腱和骨之间的连接，然后把它固定在一个金属夹固器具上，后者再与力传感器连接。用针穿透股髌骨，再连接到稳固的实验平台上，并将动物按等长收缩状态固定，使踝、膝和髌关节均成直角，以保证肌肉处于生理静止状态。

### 4 应用简介与讨论

我们以前的文章<sup>[7]</sup>指出，很长一段时间里，在功能性神经肌肉电刺激研究中，一般都使用单一的刺激信号，通过改变刺激信号的频率 (APFR) 或幅度来控制肌肉输出力的大小。这种方法虽然可以得到变化的肌力，但是这种刺激技术存在很大的问题，力的变化要么不平滑，要么范围太小，甚至还会引入所谓的反向募集 (即在力的产生过程中，大的运动单位先于小的运动单位发生募集)，完全不符合生理要求。我们最近发展和实现了一种新的电刺激技术，克服了此领域内长期存在的技术障碍。在本文描述的刺激系统的支持下，利用这种新的刺激技术进行了一系列研究。

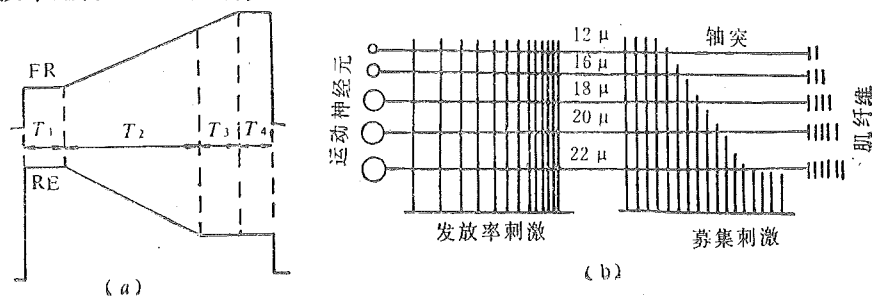


图 2 控制电压波形和顺序募集示意图

施加于坐骨神经的两个刺激信号的控制电压如图 2(a) 所示，发放率刺激 FR 线性增加，募集刺激 RE (高频) 线性减小。当募集刺激的脉冲幅度减小时图 2(b))，具有最高兴奋阈值的的最小轴突 (运动单位) 首先摆脱抑制的影响，开始产生与其低神经支配率相应的轻微

收缩。进一步减小刺激幅度，使较大的运动单位也逐渐摆脱抑制，重新兴奋。在这种情况下，运动单位按其大小以一定的次序得到募集，每一后来募集的运动单位，其初始发放率都比较早募集的运动单位的初始发放率来得高，这正是肌肉随意运动时的情形。

改变时间间隔  $T_2$  和  $T_3$ ，就能改变由募集产生的肌力在整个 MVC 中所占的比例，即募集范围 (RR)。不同的 RR 适用于不同的肌肉收缩控制模式。实验表明，这种具有多种发放率和募集控制方式的肌力调节技术，可以通过灵活地改变两个刺激信号的相应参数，产生比较符合生理原理、控制方便的平滑肌力，这对于恢复由于脊髓损伤引起的肌肉收缩功能的丧失有直接的应用前景<sup>[8]</sup>。

EMG 和力作为肌肉收缩时同时产生的两种输出参数，一个是非电量的力学参数，一个是电信号参数，它们都反映了肌肉收缩时的生理信息。而 EMG 的检测比肌肉输出力的检测要容易得多，所以，在 FNS 的闭环控制研究中，经常用 EMG 作为力的一个表征参数来进行力的反馈控制。这样就需要得到 EMG—力之间的关系，而且这种关系应该尽量接近随意运动时的情形。

利用上述刺激控制信号，研究了猫的后肢慢肌（比目鱼肌，Soleus）和快肌（内侧腓肠肌，medial gastrocnemius）的 EMG—力关系。EMG 用 MAV 表示其幅度的大小。结果表明，在各种募集范围的控制方式中，EMG—力的模型是不同的，比目鱼肌在 30% 和 40% RR 时模型呈线性，大于 40% RR 时则呈非线性。内侧腓肠肌在 50% RR 时呈线性，而大于 50% 时则呈非线性。修改发放率刺激模式，当募集结束后发放率按加速增长的分段线性模式变化，可以进一步改善 EMG—力关系的非线性<sup>[9]</sup>。因为从应用的观点看，如果希望用 EMG 作为力的一个表征参数来反馈，EMG—力的关系呈线性时，应用线性系统理论进行控制，这种控制过程将简单得多，具有反馈环的功能性电刺激系统要容易发现，这在实用时是非常重要的。

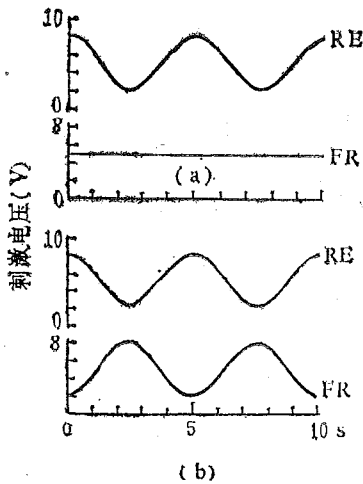


图 3 频率响应模型的刺激控制电压波形

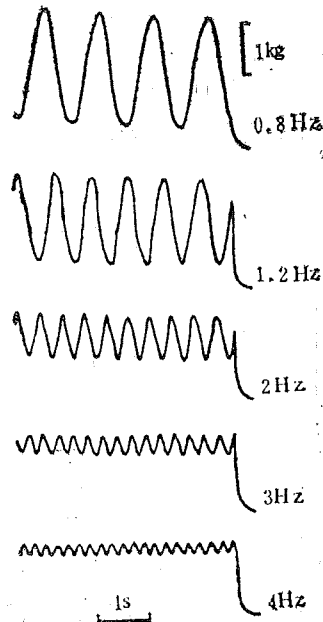


图 4 RE 刺激幅度正弦变化，FR 刺激为固定值时的力响应曲线



利用上述实验系统,可以研究在各种控制模式下,快肌和慢肌的频率响应模型,即神经肌肉系统的传递函数。刺激控制信号如图3所示,APFR可以被固定在某一值(如40pps)(a)或者正弦变化(b)而募集刺激的幅度作正弦变化,频率从0.4Hz到6Hz,因为由募集刺激产生的力的大小与募集刺激信号的幅度有关,所以这时力的变化也是正弦状的(图4)。以频率和力的幅度为座标轴,画出Bode图,我们发现,当募集肌肉运动单位成为产生力的部分或全部过程时,模型存在两个相等的转折频率,约为1.85Hz,所以神经肌肉系统的传递函数为线性二阶系统。它与控制模式(发放率变化)或肌纤维成分(快肌或慢肌)无关,并且与力输出的大小亦无关。但力的输出与刺激信号之间有时间延迟,比目鱼肌为16ms,内侧腓肠肌为11ms<sup>[10]</sup>。

在这个实验系统的支持下,准备继续完成其它一些课题,如运动单位的募集对肌肉疲劳的影响,主动肌和拮抗肌控制关节运动等。

必须提出注意的是:这种实验系统提供的神经肌肉电刺激控制技术,还不能做到象随意运动那样非常精确的控制。因为在随意运动中,兴奋的运动单位是不同步发放的,而在这种实验系统中,它们都是同步发放的,尽管它已经很接近于有关文献[2, 10, 11]中描述的随意状态的情形。我们期望将来的发展能提供非同步兴奋的技术,虽然这种技术显然是非常困难和复杂的,但它对于神经肌肉电刺激作为康复和基础研究的工具,有着不可估量的意义。

#### 参 考 文 献

- [1] Heneman E, Houk H, Medical Physiology (Mountcastle V B ed.), St. Louis, MO: Mosby, 1974, Part V.
- [2] Millner-Brown H, Stein R B, Yemm R, *J. Physiol.* (London), **320** (1973), 339—370.
- [3] DeLuca C J, Lefever R, McCue M *et al*, *J. Physiol.* (London), **329** (1982), 129—142.
- [4] Woods J, Bigland-Ritchie B, *Amer. J. Phys. Med.*, **62** (1983), 287-299.
- [5] Lawrence J, DeLuca C J, *J. Appl. Physiol.*, **54** (1983), 1653-1659.
- [6] Solomonow M, *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, BME-31 (1984), 752-763.
- [7] 周炳和等, 中国科学技术大学学报, **19** (1989) 211-222.
- [8] Zhou Binghe, Baratta R, Solomonow M, *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, BME-34 (1987), 128-139
- [9] Solomonow M, Baratta R, Zhou Binghe *et al*, *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, BME-34 (1987), 692-703.
- [10] Baratta R, Zhou Binghe and Solomonow M, IEEE-EMBS 10th Annual International Conference, New Orleans, USA, 1988:1657.
- [11] Basmajian J, DeLuca C J, *Muscles Alive*, 5th ed Baltimore, MD: Williams and Wilkins, 1985: 162-166.
- [12] Henemane E, Somjen G, Carpenter D, *J. Neurophysiol.*, **28** (1965), 560-580.

# A Microcomputer-Controlled Functional Neuromuscular Stimulation Experiment System

Zhou Binghe      Liu Ping  
Ding Shaowei     Wu Xiaohong

*(Department of Electronic Engineering)*

## Abstract

An IBM-PC Microcomputer-based Functional Neuromuscular Stimulation system was developed to generate two-channel stimulus control voltages, to which the proper parameters were inputted according to the animal experimental categories. The experiment procedure was controlled and muscle contractile force and the accompanied electrical signal (Electromyography, EMG) were recorded automatically. Muscle force manipulation with various firing rate and recruitment control strategies, an EMG-force model of electrically stimulated muscle and frequency response of neuromuscular system were studied, too.

**Key words:** functional neuromuscular stimulation, EMG, recruitment, firing rate.

# 非定常激波在多重矩形障碍 物中传播的数值模拟

王如云\* 刘儒勋

(数学系)

## 摘 要

采用两种不同的方法——拟特征线法和 TVD 法——对非定常激波在多重矩形障碍物中的传播进行了数值模拟。计算结果表明，两种方法计算图象相当吻合，与实际部门的实验结果十分接近。

**关键词：**激波，障碍物，数值模拟。

**中图分类号：**O241.82, O241.1

## 1 引言

核爆冲击波对城区建筑物的破坏力极大。本文进行了简单的二维模型试验。采用二维非定常衰减激波（以离散试验数据给出）扫过两个并列的矩形障碍物的简化模型，利用改进的拟特征线法<sup>[1,2]</sup>和 TVD 法<sup>[3]</sup>对其进行了数值模拟。

当前，我们所能查阅到的文献多半描述了激波扫过前后台阶<sup>[3-6]</sup>和山形障碍物的模拟情况<sup>[9,10]</sup>。作者尚未见到激波，尤其是非定常激波扫过多重矩形障碍物的模拟报导。

数值结果表明，两种方法的模拟效果相当吻合，与实际部门的试验结果极为接近。

## 2 基本物理模型和数学描述

为简单起见，我们视问题为平面二维不可压流场，其示意图如图 1。

假定爆炸波沿地面自左向右作平面运动，在计算区域的左边界处给定压力  $p$ ，密度  $\rho$ ，水平速度  $u$ ，比内能  $E$ ，并认为垂直方向速度  $v=0$ 。

控制方程为无量纲形式

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial G(U)}{\partial x} + \frac{\partial W(U)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

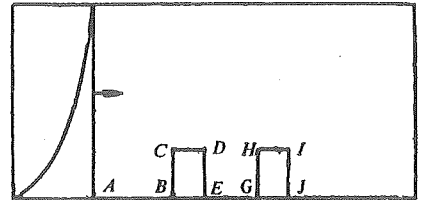


图 1

1988年5月20收到。

\* 现在南京河海大学工作。

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (p+E)u \end{pmatrix} \quad W = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ (p+E)v \end{pmatrix} \quad (2)$$

而

$$E = \frac{p}{\gamma-1} + \frac{\rho}{2}(u^2 + v^2) \quad (3)$$

把水平面和障碍物的前、后、上侧面均作为非渗透边界，其边界条件为法向速度为零，密度和压力的法向导数为零。 $(u, v) \cdot n = 0$ ， $n$ 为单位法向。

对右边界（下游）和上方边界提输运条件，左边来流边界则根据实际部门所提供的试验数据（表1）采用样条插值给出衰减的入射击波条件。

表1 无量纲化后的左端输入参数

$t/t_0$	$p/p_0$	$u/\sqrt{p_0/\rho_0}$	$\rho/\rho_0$	$v/\sqrt{p_0/\rho_0}$
0.0	2.0469	0.63998	1.6426	0.0
0.039271	1.5238	0.42245	1.3250	0.0
0.084388	1.1809	0.22843	1.1117	0.0
0.13592	1.0162	0.10818	0.99445	0.0
0.19455	0.91107	0.0058038	0.93330	0.0
0.26095	0.87450	0.039507	0.89540	0.0
0.33591	0.87026	-0.061395	0.89283	0.0
0.42029	0.89466	-0.052078	0.91056	0.0

初始状态（ $t=0$ 时），左边来流为该衰减激波的前沿，而流场其它地方取作

$$u=v=0, \rho=p=1 \quad (4)$$

### 3 拟特征线方法

对方程(1)求 $G$ 、 $W$ 的Jacobi阵，

$$A(U) = \frac{\partial G}{\partial U}, \quad B(U) = \frac{\partial W}{\partial U} \quad (5)$$

并将未知向量换成 $V = (\rho, u, v, p)^T$ ，则可把方程化为拟线性形式<sup>[1,2]</sup>

$$V_t + A^*V_x + B^*V_y = 0 \quad (6)$$

其中

$$V = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{pmatrix} \quad A^* = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 1/\rho \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho a^2 & 0 & u \end{pmatrix} \quad B^* = \begin{pmatrix} v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 1/\rho \\ 0 & 0 & \rho a^2 & v \end{pmatrix} \quad (7)$$

$A^*$ 、 $B^*$ 的特征值和线性无关的左特征向量分别为

$$\begin{aligned} (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) &= (u-a, u, u, u+a) \\ (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4) &= (v-a, v, v, v+a) \end{aligned} \quad (8)$$

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1/\rho a \\ 0 & 0 & 0 & -1/a^2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/\rho a \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & -1/\rho a \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1/a^2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/\rho a \end{pmatrix}$$

采用分裂的形式, 并化为特征化常微方程<sup>[1,2]</sup>

$$A_i \cdot \frac{dV}{dt} = 0, \quad \text{沿} \quad \frac{dx}{dt} = \lambda_i \quad (10)$$

$$B_i \cdot \frac{dV}{dt} = 0, \quad \text{沿} \quad \frac{dy}{dt} = \mu_i \quad (11)$$

$i = 1, 2, \dots, n$

本文在[1]、[2]的基础上, 对时间步的适时控制和数值耗散效应的调节上都作了进一步探索, 提出了更精细的改进。特别地, 对每一网格上 Riemann 问题的解, 当存在激波结构或稀疏波结构时, 进行了区分不同情况的处理。

此外, 每时间层计算都有预估——校正的两步计算, 提高了方法的精度。使之达到二阶。

#### 4 TVD 方法

Harten 等提出的 TVD 方法是二阶精度格式。由于它的高分辨率等模拟激波的效果, 引起人们的普遍重视。本文采用两步分裂的 TVD 方法。用算子形式表作

$$U_{i,j}^{n+2} = L_x L_y L_x L_y U_{i,j}^n \quad (12)$$

其中  $L_x, L_y$  分别是下面分裂方程组的第一、第二方程的二阶精度 TVD 差分算子:

(i)  $L_x$  所对应的差分格式

$$U_{i,j}^{n+1} = L_x U_{i,j}^n = U_{i,j}^n - \lambda (\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \bar{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n) \quad (14)$$

$$\bar{F}_{i\pm\frac{1}{2},j}^n = \frac{1}{2} (F(U_{i,j}^n) + F(U_{i\pm 1,j}^n)) + \frac{1}{2\lambda} \sum_{K=1}^4 R_{K,i\pm\frac{1}{2},j}^n \cdot \tau_{K,i\pm\frac{1}{2},j}^n \quad (15)$$

(ii)  $L_y$  所对应的差分格式

$$U_{i,j}^{n+1} = L_y U_{i,j}^n = U_{i,j}^n - \lambda (\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \bar{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n) \quad (16)$$

$$\bar{G}_{i,j\pm\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2} (G(U_{i,j}^n) + G(U_{i,j\pm 1}^n)) + \frac{1}{2\lambda} \sum_{K=1}^4 R_{K,i,j\pm\frac{1}{2}}^n \cdot \tau_{K,i,j\pm\frac{1}{2}}^n \quad (17)$$

其中

$$R_x^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{u} - \hat{c} \\ \hat{v} \\ \hat{H} - \hat{u} \cdot \hat{c} \end{pmatrix}, \quad R_y^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{u} \\ \hat{v} - \hat{c} \\ \hat{H} - \hat{v} \cdot \hat{c} \end{pmatrix}, \quad R_x^2 = R_y^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{v} \\ \hat{u} \\ 1/2(\hat{u}^2 + \hat{v}^2) \end{pmatrix}$$

$$R_x^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \hat{v} \end{pmatrix} \quad R_y^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \hat{u} \end{pmatrix} \quad (18)$$

$$R_x^4 = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{u} + \hat{v} \\ \hat{v} \\ \hat{H} + \hat{u} \cdot \hat{v} \end{pmatrix} \quad R_y^4 = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{u} \\ \hat{v} + \hat{v} \\ \hat{H} + \hat{v} \cdot \hat{v} \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$\hat{v} = [(\gamma - 1) (\hat{H} - \frac{1}{2}(\hat{u}^2 + \hat{v}^2))]^{1/2}$$

这里的  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$  和  $\hat{H}$  分别是速度分量  $u$ ,  $v$  和焓的密度平均。即, 如对下标  $(i + \frac{1}{2}, j)$  而言是

$$\hat{u}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{(\rho^{1/2}u)_{i,j} + (\rho^{1/2}u)_{i+1,j}}{[\rho^{1/2}]_{i,j} + (\rho^{1/2})_{i+1,j}}$$

$$\hat{v}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{(\rho^{1/2}v)_{i,j} + (\rho^{1/2}v)_{i+1,j}}{(\rho^{1/2})_{i,j} + (\rho^{1/2})_{i+1,j}} \quad (20)$$

$$\hat{H}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{(\rho^{1/2}H)_{i,j} + (\rho^{1/2}H)_{i+1,j}}{(\rho^{1/2})_{i,j} + (\rho^{1/2})_{i+1,j}}$$

等等。而总焓

$$\hat{H} = \frac{\gamma p}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) \quad (21)$$

此外, (15) 和 (17) 式右的  $\tau$  表达式为 (以  $\tau_{i+\frac{1}{2},j}^K$  为例):

$$\tau_{i+\frac{1}{2},j}^K = \theta_{i+\frac{1}{2},j}^K \cdot (g_{i,j}^K + g_{i+1,j}^K) - Q(\beta_{i+\frac{1}{2},j}^K + \theta_{i+\frac{1}{2},j}^K \cdot \Gamma_{i+\frac{1}{2},j}^K) \cdot \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K \quad (22)$$

其中

$$\theta_{i+\frac{1}{2},j}^K = 1 + 2 \max(\theta_{i,j}^K, \theta_{i+1,j}^K), \quad (K = 1, 2, 3, 4)$$

$$\theta_{i,j}^K = \begin{cases} |\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K - \alpha_{i-\frac{1}{2},j}^K| / (|\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K| + |\alpha_{i-\frac{1}{2},j}^K|), & \text{当 } \alpha_{i\pm\frac{1}{2},j}^K \text{ 不同时为零} \\ 0, & \text{当 } \alpha_{i\pm\frac{1}{2},j}^K = 0 \end{cases}$$

$$g_{i,j}^K = s_{i+\frac{1}{2},j}^K \cdot \max[0, \min(|\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^K|, s_{i+\frac{1}{2},j}^K \cdot \tilde{g}_{i-\frac{1}{2},j}^K)] \quad (23)$$

$$\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^K = \frac{1}{2} [Q(\beta_{i+\frac{1}{2},j}^K) - (\beta_{i-\frac{1}{2},j}^K)^2] \cdot \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K$$

$$\Gamma_{i+\frac{1}{2},j}^K = \begin{cases} (g_{i+1,j}^K - g_{i,j}^K) / \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K, & \text{当 } \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^K \neq 0 \\ 0, & \text{当 } \alpha_{i-\frac{1}{2},j}^K = 0 \end{cases}$$

为保证熵条件, 取

$$Q(x) = \begin{cases} x^2/4\varepsilon + \varepsilon, & \text{当 } |x| < 2\varepsilon \\ |x|, & \text{当 } |x| \geq 2\varepsilon \end{cases} \quad (24)$$

上述 (22) 和 (23) 式组中

$$\begin{aligned} \alpha_{i+\frac{1}{2},i}^1 &= \frac{1}{2}(c_1 - c_2), \quad \alpha_{i+\frac{1}{2},i}^2 = [\rho]^* - c_2 \\ \alpha_{i+\frac{1}{2},i}^3 &= c_3, \quad \alpha_{i+\frac{1}{2},i}^4 = \frac{1}{2}(c_1 + c_2) \\ \beta_{i+\frac{1}{2},i}^K &= \lambda a_{x,i+\frac{1}{2},i}^K \\ s_{i+\frac{1}{2},i}^K &= \text{sgn}(\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},i}^K) \end{aligned} \quad (25)$$

而

$$c_1 = (\gamma - 1) \left\{ [E]^* + \frac{1}{2} [\rho]^* (\hat{u}_{\frac{1}{2}+i,i}^2 + \hat{v}_{i+\frac{1}{2},i}^2) - [\rho u]^* \hat{u}_{i+\frac{1}{2},i} - [\rho v]^* \hat{v}_{i+\frac{1}{2},i} \right\} / (\hat{e}_{i+\frac{1}{2},i})^2$$

$$c_2 = \{ [\rho u]^* - [\rho]^* \hat{u}_{i+\frac{1}{2},i} \} / c_{i+\frac{1}{2},i} \quad (26)$$

$$c_3 = [\rho v]^* - [\rho]^* \hat{v}_{i+\frac{1}{2},i}$$

$$\begin{aligned} [E]^* &= E_{i+1,i}'' - E_{i,i}'', \quad [\rho]^* = \rho_{i+1,i}'' - \rho_{i,i}'' \\ [\rho u]^* &= (\rho u)_{i+1,i}'' - (\rho u)_{i,i}'', \quad [\rho v]^* = (\rho v)_{i+1,i}'' - (\rho v)_{i,i}'' \end{aligned}$$

上述由 (20) 式开始, 若下标中不是  $(i + \frac{1}{2}, j)$  而是  $(i, j + \frac{1}{2})$  则以上各式是  $L_j$  算子的离散值。以上各式也作相应变化。

## 5 数值计算与结果分析

本文采用了 IBM PC/AT 微机进行数值计算。限于计算工具的容量、精度和速度的限制, 流场只取了如图示的计算区域, 即高相当建筑物的五倍高, 宽不超过八倍。按理说应当再扩大一倍才更合理。采用格点数为  $25 \times 50$  及  $50 \times 100$  两种情况, 计算表明无甚差异。

我们给出了大量计算结果图形, 如等压线、流线及定点压力波形图。通过图象对比分析, 及试验结果比较, 可得以下几点结论:

(1) 当不定激波遇到固壁边界  $BC$  (见图 1 中第一个建筑物左侧面) 时, 有反射激波向

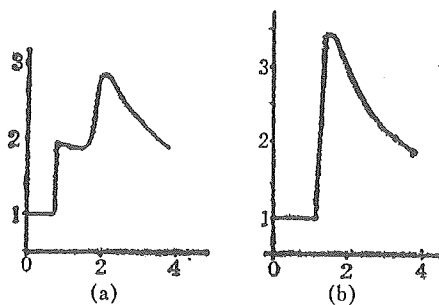


图 2

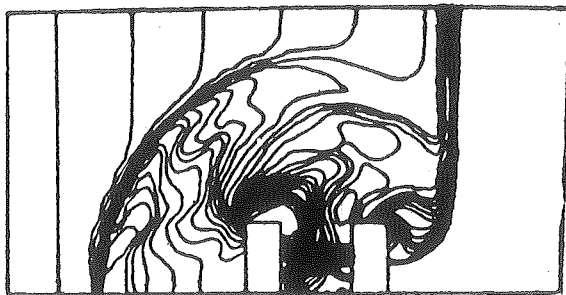


图 3

左侧上游传播。由图 3 和图 4 可见，该反射波为以  $B$  点为心的近  $1/4$  圆周，前沿清晰可见。

根据 Rankine-Hugoniot 条件

$$\begin{cases} u^2 - u_0^2 = (p_1 - p_0) \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) \\ e_1 - e_0 = \frac{p_0 + p_1}{2} \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) \\ e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}, \end{cases}$$

由表 1 中取  $u_0 = 0.63998$ ,  $p_0 = 2.0469$ ,  $\rho_0 = 1.6426$  和  $e_0 = \frac{p_0}{0.4 \times \rho_0}$ , 可算出反射激波后

压强  $p_1 = 3.8965$ 。一般说来，这种理论计算值对非定激波偏高。

我们利用拟特征线方法得到  $B$  点（如图 1 所示第一建筑物前侧面下角点）的最大压力峰值为 3.5，而 TVD 格式得的为 3.7。

(2) 我们这里只例举了两处的定点压力波形图，如图 2(a), (b) 所示。图 2(a) 是第一障碍物前地面上某点  $A$  的定点压力波形，呈双峰状，后峰高于前峰。其前峰为来流波形，后峰为反射激波的波形。图 2(b) 给出前侧面下角点  $B$  的定点压力波形。我们在计算中安排了十二个不同位置上的定点压力波形显示。

(3) 当激波绕过障碍物的右上凸角（如图 1 的  $D$ 、 $H$  点）时，波后有膨胀波存在，其波阵面图象与 Whitham 理论完全相符。

(4) 由图 3、图 4、图 5 可见，两障碍物间与第二障碍物背面都有涡流。特别是在两障碍物间涡流中心起始于第一障碍物背面中心偏上部分，第二障碍物后情况也相仿。两者涡流中心都渐渐上漂，并离开壁面。



图 4

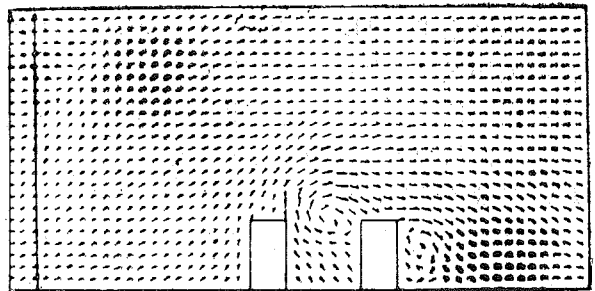


图 5

(5) 在激波越过第二建筑物后，由于斜激波与地面作用，产生了非规则反射，即马赫反射现象。而且，在两障碍物间也在某些时间内产生过非规则反射现象。

以上图形限于制图的技术困难，描成了粗体线。实际上，等压线是很密致而分离的。

本文的结果曾与中国人民解放军 89002 部队的实际结果比较，认为基本相符。在此工作期间自始至终得到该部队领导，特别是张六一、陈志林两研究员的支持和帮助，在此深表谢意。

作者也表示对中国科学院计算中心李荫藩研究员的谢意，感谢他的有益的讨论和帮助。



## 参 考 文 献

- [1] 刘儒勋、李百浩, 计算物理, 4 (1987), 137.
- [2] Liu Ruxun, Wei Yong, 中国科学技术大学学报, 17 (1987), 303.
- [3] Harten A, *J. Comput. Phys.*, 49 (1983), 357.
- [4] Yee H C and Warming, R F, *J. Comput. Phys.*, 57 (1985), 327.
- [5] Emery A F, *J. Comput. Phys.*, 2 (1968), 306.
- [6] Van Leer B, *J. Comput. Phys.*, 32 (1979), 101.
- [7] Woodward F and Colella F, *J. Comput. Phys.*, 54 (1984), 115.
- [8] 陈志林、李文绚, 防护工程, 1980 (1), 80.
- [9] 黄文生、刘可器、胡永生、李之年, 力学学报, 17 (1985), 193.
- [10] 王如云, 二维冲击波在城市中的传播的数值模拟, 中国科技大学数学系硕士论文, 1988.

# The Numerical Simulation for an Unsteady Shock Wave Sweeping Over Multiple Obstacles

Wang Ruyun Liu Ruxun

(Department of Mathematics)

### Abstract

Two different methods—quasi characteristic approach and TVD method are utilized to numerically simulate an unsteady shock wave which sweeps over two obstacles. The numerical results show that two methods produce similar figures, which are close to the experimental pictures.

**Key words:** shock wave, obstacle, numerical simulation.

# 可数生成代数上的 Hilbert 零点定理

王 岚 肖才群

(数学系)

## 摘 要

证明了 Hilbert 零点定理可以推广到一个不可数域可数生成的代数上, 还给出了它推广后的几何形式.

**关键词:** 可数生成代数, Hilbert 零点定理的弱形式, Hilbert 零点定理的强形式.

**中图法分类号:** O125.5

## 1 引言

对于一个在域  $K$  上有限生成的代数  $A$ , Hilbert 零点定理的弱形式及强形式成立. 它们分别是: (i) 若  $A$  是域, 则  $A$  是  $K$  的代数扩域; (ii) 若  $A$  是一个既约代数,  $L$  是含  $K$  的代数封闭域, 则有从  $A$  到  $L$  的  $K$ -代数同态分离  $A$  中元素. 本文将证明 (i) 和 (ii) 都可推广到  $K$  不可数而  $A$  在  $K$  上可数生成的情况, 且推广后的 (i) 与 (ii) 是等价的. 同时, 还有给出推广后的零点定理的几何形式.

文中域上的代数均指含么的交换代数. 若不作特别说明, 域  $K$  总假定为含有不可数多个元素.

## 2 Hilbert 零点定理弱形式的推广

首先证明几个引理:

**引理 1** 设  $K[x_1, x_2, \dots]$  是由可数个元  $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$  生成的  $K$ -代数, 则  $K[x_1, x_2, \dots]$  的每个理想都是可数生成的.

**证明** 任取  $K[x_1, x_2, \dots]$  的理想  $I$ , 则  $I = \bigcup_{n=1}^{\infty} I_n$ , 其中  $I_n = I \cap K[x_1, x_2, \dots, x_n]$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . 因  $K[x_1, x_2, \dots, x_n]$  是 Noether 环, 而  $I_n$  是它的理想, 故  $I_n$  有限生成, 于是  $I$  可数生成.

**引理 2** 设  $R$  为一交换环,  $M_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) 是一簇  $R$ -模. 若对每个  $i$ ,  $M_i$  的子模

可数生成, 则  $\bigoplus_{i=1}^{\infty} M_i$  的子模也是可数生成的。

**证明** 任取  $\bigoplus_{i=1}^{\infty} M_i$  的子模  $N$ , 令  $M^{(k)} = \bigoplus_{i=1}^k M_i$ ,  $N_k = N \cap M^{(k)}$  ( $k=1, 2, \dots$ ), 则

$N = \bigcup_{k=1}^{\infty} N_k$ . 因  $N_k$  是  $M^{(k)}$  的子模, 只需证明  $M^{(k)}$  的每个子模可数生成即可。

用归纳法。  $k=1$  时显然成立。 设  $k < n$  ( $n \geq 2$ ) 时成立。 考虑正合序列  $0 \rightarrow M_n \xrightarrow{i} M^{(n)} \xrightarrow{p} M^{(n-1)} \rightarrow 0$ , 其中  $i$  为嵌入,  $p$  为投射。 任取  $M^{(n)}$  的子模  $Q$ , 于是  $p(Q)$  作为  $M^{(n-1)}$  的子模可数生成, 设生成元为  $p(x_1), p(x_2), \dots$ , 其中  $x_i \in Q$ . 对每个  $m \in Q$ ,  $p(m) = \sum_i a_i p(x_i)$ ,  $a_i \in R$ , 故  $p(m - \sum_i a_i x_i) = 0$ , 于是  $(m - \sum_i a_i x_i) \in Q$ . 同时,  $i^{-1}(Q)$  作为  $M_n$  的子模由  $y_1, y_2, \dots$  生成, 因此  $(m - \sum_i a_i x_i) = i(\sum_j b_j y_j)$ , 其中  $b_j \in R$ . 于是  $m = \sum_i a_i x_i + \sum_j b_j i(y_j)$ , 即  $Q$  由  $x_1, x_2, \dots, i(y_1), i(y_2), \dots$  可数生成。

**引理 3** 设  $A$  是  $K$ -代数, 且  $A$  的每个  $A$ -子模可数生成, 若  $M$  是可数生成的  $A$ -模, 则  $M$  的每个  $A$ -子模可数生成。

**证明**  $M$  与  $A^\infty$  的一个商模同构, 由引理 2,  $A^\infty$  的每个  $A$ -子模可数生成, 故  $M$  的每个  $A$ -子模可数生成。

**引理 4** 设域  $K, F, E$  满足关系式  $K \subseteq F \subseteq E$ , 若  $E$  作为  $K$ -代数及  $F$ -模均可数生成, 则  $F$  作为  $K$ -代数可数生成。

**证明** 设  $E$  作为  $K$ -代数由  $x_1, x_2, \dots$  生成, 作为  $F$ -模由  $y_1, y_2, \dots$  生成, 则 (i)  $x_i = \sum_j b_{ij} y_j$ ,  $b_{ij} \in F$ ; (ii)  $y_i y_j = \sum_k b_{ijk} y_k$ ,  $b_{ijk} \in F$ . 设  $F_0$  为由  $b_{ij}, b_{ijk}$  生成的  $K$ -代数, 由引理 1,  $F_0$  的每个  $F_0$ -子模可数生成, 且  $K \subseteq F_0 \subseteq F$ .

$E$  中每个元是系数在  $K$  中的多项式, 由 (i), (ii),  $E$  中每个元是系数在  $F_0$  中的  $y_i$  的线性组合, 故  $E$  作为  $F_0$ -模可数生成。 由引理 3,  $E$  的子模  $F$  作为  $F_0$ -模可数生成, 而  $F_0$  是可数生成的  $K$ -代数。 故  $F$  作为  $K$ -代数可数生成。

**定理 1** (Hilbert 零点定理弱形式的推广)

设  $A$  是  $K$  上可数生成的代数, 若  $A$  是域, 则  $A$  是  $K$  的代数扩域。

**证明** 设  $A = K[x_1, x_2, \dots]$ , 若  $A$  在  $K$  上不是代数的, 则存在域  $L = K(x_i, \forall i \in I)$  ( $I$  为指标集) 使得  $L$  在  $K$  上是纯超越扩张而  $A$  在  $L$  上代数, 因而  $A$  作为  $L$ -模可数生成。 由引理 4,  $L$  作为  $K$ -代数可数生成, 设  $L = K[y_1, y_2, \dots]$ , 其中  $y_j = f_j/g_j$ ,  $j=1, 2, \dots$ ,  $f_j, g_j$  是  $x_i$  ( $i \in I$ ) 的多项式, 由于  $K[y_1] \subseteq K[y_1, y_2] \subseteq \dots \subseteq L$ , 而  $\{x_i - \alpha\}$  对每个  $\alpha \in K$  不可数, 故有正整数  $n$  使  $(x_i - \alpha)^{-1} \in K[y_1, y_2, \dots, y_n]$  对无穷多个  $\alpha \in K$  成立。 设  $j$

$= 1, 2, \dots, n, f_i, g_i \in K[y_1, y_2, \dots, y_m]$  ( $m$  为某个正整数), 又  $(x_i - a)^{-1}$  可写作  $\sum \lambda_{i_1, i_2, \dots, i_n}$   
 $y_1^{i_1} y_2^{i_2} \dots y_n^{i_n} = \frac{h_a}{g_1^{i_1} \dots g_n^{i_n}}$ , 其中  $\lambda_{i_1, i_2, \dots, i_n} \in K, h_a \in K[x_1, x_2, \dots, x_m], l_i (i=1, 2, \dots, n)$

是正整数, 于是  $(x_i - a)$  是  $g_1 \dots g_n$  的不可约因子, 但  $g_1 \dots g_n$  只有有限多个不可约因子, 矛盾. 由此即得  $A$  在  $K$  上代数.

### 3 Hilbert 零点定理的强形式的推广

Hilbert 零点定理的强形式可以推广到可数生成代数上且与定理 1 等价.

先证明几个引理:

**引理 5** 设  $A$  是域  $K$  上的代数, 则  $A$  的 Jacobson 根  $J(A)$  中的元素或者是幂零的, 或者在  $K$  上超越.

**证明** 对每个  $a \in J(A)$ , 不妨设  $a$  在  $K$  上代数. 于是  $a$  在  $K$  上生成的代数  $\{a\}$  在  $K$  上是有限维代数, 因此降链  $\{a\} \supseteq a\{a\} \supseteq \dots \supseteq a^m\{a\} \supseteq \dots$  是稳定的, 即有正整数  $m$ , 使  $a^m\{a\} = a^{m-1}\{a\}$ . 而  $a^m = a^{m-1}a \in a^{m-1}\{a\}$ , 故有  $b \in \{a\}$ , 使得  $a^m = a^{m-1}b$ , 于是  $a^m(1-b) = 0$ . 因  $b \in J(A)$ ,  $(1-b)$  可逆, 故  $a^m = 0$ , 即  $a$  为幂零元.

**引理 6** 设  $A$  是  $K$  上代数,  $a \in A, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r$  是  $K$  中  $r$  个相异元, 且  $(a - \alpha_i, 1)$  在  $A$  中有逆元  $(a - \alpha_i, 1)^{-1} (1 \leq i \leq r)$ , 则或者  $a$  是  $K$  上次数  $\leq (r-1)$  的代数元, 或者  $(a - \alpha_1, 1)^{-1}, \dots, (a - \alpha_r, 1)^{-1}$  在  $K$  上线性无关. (其中  $1$  为  $A$  的单位元素)

**证明** 若  $(a - \alpha_1, 1)^{-1}, \dots, (a - \alpha_r, 1)^{-1}$  在  $K$  上线性相关, 则有  $\beta_i \in K, \beta_i$  不全为零

$(1 \leq i \leq r)$ , 使得  $\sum_{i=1}^r \beta_i (a - \alpha_i, 1)^{-1} = 0$ . 于是  $\sum_{i=1}^r \beta_i \mu_i(a) = 0$ , 其中  $\mu_i(\lambda) = \prod_{1 \leq j \leq r, j \neq i} (\lambda - \alpha_j)$ .

记  $g(\lambda) = \sum_{i=1}^r \beta_i \mu_i(\lambda)$ , 因  $\mu_i(\alpha_i) \neq 0, \beta_i$  不全为零, 易知  $g(\lambda)$  是  $\lambda$  的非零多项式. 又  $g(a) = 0$ , 故  $a$  在  $K$  上代数, 且次数  $\leq (r-1)$ .

**引理 7** 设  $A$  是无限域  $K$  上的代数, 若  $\dim_K(A) < \infty$ , 或者  $K$  有不可数多个元而  $A$  在  $K$  上有可数基, 则  $J(A)$  的每个元素都是幂零的.

**证明** 设  $a \in J(A)$ , 则对每个  $\alpha \in K, (1 - a\alpha)$  在  $A$  中可逆. 若  $a$  在  $K$  上超越, 则由引理 6, 不可数集  $\{(1 - a\alpha)^{-1} | \alpha \in K\}$  在  $K$  上线性无关, 这与题设  $A$  在  $K$  上有可数基矛盾. 故  $a$  在  $K$  上代数, 再由引理 5,  $a$  是幂零元.

设  $A$  是  $K$  上可数生成的代数, 则  $A$  在  $K$  上有可数基. 由引理 7,  $J(A) \subseteq \text{nil}(A)$  ( $A$  的幂零根), 于是有

**推论** 设  $A$  为  $K$  上可数生成的代数, 则  $J(A) = \text{nil}(A)$ .

**定理 2** 定理 1 与下列 I 或 II 等价:

I 设  $A$  是  $K$  上可数生成的既约代数,  $L$  是一个代数封闭域, 则  $K$  到  $L$  的任意单同态  $\varphi$  可扩展为  $A$  到  $L$  的  $K$ -代数同态, 且这些同态分离  $A$  中元素, 即: 对每个  $a \in A, a \neq 0$ , 有一个  $K$ -代数同态  $\rho: A \rightarrow L, \rho|_K: K \rightarrow L$  为单同态, 使得  $\rho(a) \neq 0$ ; (Hilbert 零点定理强形式

的推广)

II 设  $A$  是含有不可数多个元的整环,  $B$  是包含  $A$  的整环, 且  $B$  作为代数在  $A$  上可数生成,  $L$  是代数封闭域, 则对每个  $u \in B, u \neq 0$ , 对任一从  $A$  到  $L$  的单同态  $\rho, \rho$  可以扩张为  $\rho^*: B \rightarrow L$ ; 使  $\rho^*(u) \neq 0$ .

**证明**

定理 1  $\Rightarrow$  I

因  $A$  既约, 由引理 7 的推论知:  $\bigcap_{\mathcal{M}_e \in \text{Max } A} \mathcal{M}_e = J(A) = \text{nil}(A) = 0$ . 于是对任一  $a \in A, a \neq 0$ . 有  $\mathcal{M}_e \in \text{Max } A$ , 使  $a \notin \mathcal{M}_e$ . 故  $A/\mathcal{M}_e$  是  $K$  上可数生成的代数, 且是一个域,  $\bar{a} \neq 0$ . 由定理 1,  $A/\mathcal{M}_e$  是  $K$  的代数扩域, 因此  $\varphi: K \rightarrow L$  可以扩张为  $f: A/\mathcal{M}_e \rightarrow L$ , 且使  $f(\bar{a}) \neq 0$ . 令  $\pi$  为从  $A$  到  $A/\mathcal{M}_e$  的自然同态,  $\rho = f \circ \pi$ , 则  $\rho(a) = f(\bar{a}) \neq 0, \rho$  是  $A \rightarrow L$  的  $K$ -代数同态, 且  $\rho|_K = f|_K = \varphi$ , 故  $\rho$  是  $\varphi$  的扩张.

I  $\Rightarrow$  II

先考虑  $A$  为一含不可数多个元的域的情形. 此时  $B$  是既约代数, 由 I 立得 II.

当  $A$  是一个整环时, 令  $S = A - \{0\}$ , 则  $S^{-1}A$  是  $A$  的商域,  $S^{-1}B$  是整环, 作为代数在  $S^{-1}A$  上可数生成. 显然  $S^{-1}A$  有不可数个元.

对每个  $u \in B, u \neq 0$ , 在  $S^{-1}B$  中  $\frac{u}{1} \neq 0$ . 对任一单同态  $\rho: A \rightarrow L$ , 因  $L$  为域,  $\rho(A) = U(L) = L^*$ , 故有唯一的同态  $f: S^{-1}A \rightarrow L$ , 使  $\rho = f \circ g$ , 其中  $g: A \rightarrow S^{-1}A, a \mapsto \frac{a}{1}$ . 由前所述,  $f$  可以扩张为  $f^*: S^{-1}B \rightarrow L$ , 使  $f^*\left(\frac{u}{1}\right) \neq 0$ .

令  $\rho^* = f^*|_B$ , 则  $\rho^*$  是  $\rho$  的扩张, 且  $\rho^*(u) \neq 0$ .

II  $\Rightarrow$  I

在 II 中令  $A$  为  $K$ , 令  $B$  为  $A$  即得 I.

I  $\Rightarrow$  定理 1

$A$  是域, 故为  $K$  上的既约代数. 在 I 中取  $L$  为包含  $K$  的代数封闭域,  $\varphi$  为从  $K$  到  $L$  的包含映射, 则对每个  $a \in A, a \neq 0$ ,  $\varphi$  可扩张为从  $A$  到  $L$  的  $K$ -代数同态  $\rho: A \rightarrow L$ , 使  $\rho(a) \neq 0$ .  $\rho$  为单同态 (因  $A$  是域) 而  $L$  是代数闭域, 故  $A$  是  $K$  的代数扩域.

#### 4 零点定理几何形式的推广

首先, 可将仿射代数簇的概念加以推广, 设  $X$  为一集合,  $K$  为含不可数个元的域,  $K^X = \{f | f: X \rightarrow K\}$  为定义在  $X$  上的  $K$ -值函数全体. 若有  $K^X$  的一个子代数  $K[X]$ , 使得 ①  $K[X]$  可数生成; ②  $K[X]$  分离  $X$  中元, 即: 对任意  $x, y \in X, x \neq y$ , 有  $f \in K[X]$ , 使  $f(x) \neq f(y)$ ; ③ 对任一代数同态  $\alpha: K[X] \rightarrow K$ , 存在  $x \in X$ , 使  $\alpha(f) = f(x)$ , 对任意  $f \in K[X]$ , 则称  $X$  为一个仿射代数簇而  $K[X]$  称为  $X$  上的函数环.

**推论** 设  $K$  为一有不可数多个元素的代数闭域,  $X$  为一个仿射代数簇, 其函数环为  $K[X]$ . 则对任意理想  $A \subseteq K[X]$ , 有 ①  $V(A) \neq \emptyset$ ; ②  $I(V(A)) = \sqrt{A}$ . (其中  $V(A), I(V(A))$ )

的意义同一般仿射代数簇)

**证明** ①显然  $K[X]/\sqrt{A}$  是  $K$  上可数生成的既约代数, 由定理 2 的  $I$ , 存在非平凡的  $K$ -代数同态  $\rho: K[X]/\sqrt{A} \rightarrow K$ . 令  $\pi: K[X] \rightarrow K[X]/\sqrt{A}$  为自然同态, 则  $\rho \circ \pi: K[X] \rightarrow K$  是一个非平凡的  $K$ -代数同态. 由上文关于仿射代数簇的定义, 有  $x \in X$ , 使  $\rho \circ \pi(f) = f(x)$ , 对任意  $f \in K[X]$ . 对每个  $f \in A$ ,  $f(x) = \rho \circ \pi(f) = \rho(0) = 0$ , 故  $V(A) \neq \emptyset$ .

②显然有  $\sqrt{A} \subseteq I(V(A))$ . 下证  $\sqrt{A} \supseteq I(V(A))$ .

对任意  $f \notin \sqrt{A}$ , 则在  $K[X]/\sqrt{A}$  中  $\bar{f} \neq 0$ , 于是有  $K$ -代数同态  $\rho: K[X]/\sqrt{A} \rightarrow K$ , 使  $\rho(\bar{f}) \neq 0$ , 即  $\rho \circ \pi(f) \neq 0$ . 故有  $x \in X$ , 使  $f(x) = \rho \circ \pi(f) \neq 0$ .

对任意  $g \in A$ ,  $g(x) = \rho \circ \pi(g) = \rho(0) = 0$ , 故  $x \in V(A)$ .

因此  $f \in I(V(A))$ , 即  $I(V(A)) \subseteq \sqrt{A}$ , 于是  $I(V(A)) = \sqrt{A}$ .

在写作过程中得到查建国老师的鼓励和大力帮助, 在此向他表示衷心的感谢.

## Hilbert Nullstellensatz of Countably Generated Algebras

Wang Lan      Xiao Caiqun

(Department of Mathematics)

### Abstract

This paper proves that Hilbert Nullstellensatz can be generalized to an algebra generated countably over an uncountable field, and presents some geometric forms of the generalized Hilbert Nullstellensatz.

**Key words:** algebra, Hilbert nullstellensatz's weak form, Hilbert nullstellensatz's strong form.

# 压缩相干态的振幅平方压缩

夏云杰\* 郭光灿

(物理系)

## 摘 要

研究了压缩相干态的振幅平方压缩特性,发现压缩相干态也存在这类压缩,但存在的条件与通常压缩不同,特别是压缩真空态,在通常压缩最大的方向上振幅平方压缩却不存在,反之亦然。从这个角度证明了振幅平方压缩并不与通常意义下的压缩等价。

**关键词:** 压缩相干类, 压缩, 振幅平方压缩。

**中图法分类号:** O431

## 1 引言

光场压缩的概念近年来已被作了几种推广。一方面,从压缩算符看,人们把能产生压缩的双光子么正算符<sup>[1,2]</sup>推广到多光子<sup>[3]</sup>和分数光子<sup>[4]</sup>;另一方面,把场某一正交分量的二阶矩推广到高阶矩,引出了高阶压缩的概念<sup>[5]</sup>。这些推广对深入认识压缩的实质是很有意义的。

最近, Hillery<sup>[6]</sup>提出了光场振幅平方压缩的概念。他证明这种压缩也是一种非经典效应,并讨论了若干能产生这类压缩的非线性光学过程,例如,简并参量放大、双光子吸收和四波相互作用等。Gerry等人<sup>[7]</sup>发现相干光与双光子非谐振子的相互作用可产生振幅平方压缩,并研究了振幅平方压缩与SU(1,1)李代数的关系。

众所周知,压缩相干态不仅具有二阶压缩,而且存在任意的高阶压缩<sup>[5]</sup>。本文研究了压缩相干态的振幅平方压缩,发现它存在的条件与通常意义下压缩的条件显著地不同。在通常压缩很小时,振幅平方压缩仍很容易存在,特别是压缩真空态,通常压缩不存在的方向正是振幅平方压缩最大的方向,而通常压缩最大的方向振幅平方压缩却不存在。从这个角度我们证明了振幅平方压缩不仅与通常的压缩是不等价的,它还可能有更多的物理性质有待研究发现。

1989年3月22日收到。

\* 现在工作地址: 山东曲阜师范大学物理系

## 2 振幅平方压缩的定义

场振幅的两正交分量（或实与虚分量）为

$$X_1 = \frac{1}{2}(a + a^+), \quad X_2 = \frac{1}{2i}(a - a^+) \quad (1)$$

其中  $a(a^+)$  是光场消灭（产生）算符，显然有下面的对易关系

$$[X_1, X_2] = \frac{i}{2} \quad (2)$$

则这两分量的测不准关系为

$$(\Delta X_1)^2 (\Delta X_2)^2 \geq \frac{1}{16} \quad (3)$$

通常的场压缩指的是  $(\Delta X_1)^2 < \frac{1}{4}$  或  $(\Delta X_2)^2 < \frac{1}{4}$ ，即场在某一正交分量上的起伏小于相干态相应的起伏。

由 (1) 式，场振幅可写为

$$E = X_1 + iX_2 \quad (4)$$

这个振幅的平方为

$$E^2 = Y_1 + iY_2 \quad (5)$$

其中

$$Y_1 = \frac{1}{2}(a^2 + a^{+2}), \quad Y_2 = \frac{1}{2i}(a^2 - a^{+2}) \quad (6)$$

$Y_1, Y_2$  分别对应振幅平方的实部与虚部。容易证明它们满足

$$[Y_1, Y_2] = i(2N + 1) \quad (7)$$

这里  $N = a^+a$  是光子数算符，上式导致测不准关系

$$(\Delta Y_1)^2 \cdot (\Delta Y_2)^2 \geq \left\langle \left( N + \frac{1}{2} \right)^2 \right\rangle \quad (8)$$

若

$$(\Delta Y_1)^2 < \left\langle \left( N + \frac{1}{2} \right) \right\rangle \text{ 或 } (\Delta Y_2)^2 < \left\langle \left( N + \frac{1}{2} \right) \right\rangle \quad (9)$$

成立，则称场存在振幅平方压缩。可以证明，满足 (9) 式的光场其  $P$  表示是非正定的<sup>[8]</sup>，即场是非经典光场。

## 3 压缩相干态的振幅平方压缩

压缩相干态（又称双光子相干态）通常定义为<sup>[8]</sup>

$$|\xi, \alpha\rangle = D(\alpha) S(\xi) |0\rangle \quad (10)$$

其中  $D(\alpha)$  是构造相干态  $|\alpha\rangle$  的平移算符

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} \quad (11)$$

$S(\xi)$  称为压缩算符，其表示式为



$$S(\xi) = e^{\frac{1}{2}(\xi^* a^2 - \xi a^{+2})} \quad (12)$$

容易证明  $S(\xi)$  是么正的, 并可作如下分解:

$$S(\xi) = e^{-\frac{i}{2}\theta a^+} S(r) e^{\frac{i}{2}\theta a^+}, \quad S(r) = e^{\frac{r}{2}(a^2 - a^{+2})} \quad (13)$$

其中  $\xi = re^{i\theta}$ .

压缩相干态  $|\xi, \alpha\rangle$  的各阶压缩条件都是一样的<sup>[5]</sup>, 即

$$\text{ch}2r - \text{sh}2r\cos\theta < 1 \quad \text{或} \quad \text{shr} - \text{chr}\cos\theta < 0 \quad (14)$$

很显然, 压缩在  $\theta=0$  方向上最大, 在  $\theta=\frac{\pi}{2}$  时没有压缩, 注意这里的压缩条件与平移参数  $\alpha$

完全无关, 即压缩相干态与压缩真空态的压缩条件相同,

现在, 我们讨论压缩相干态的振幅平方压缩条件. 为了求出  $Y_1$  或  $Y_2$  在压缩相干态的均方差  $(\Delta Y_{1,2})$ , 我们先求

$$f(\lambda) = \langle \xi, \alpha | e^{\lambda a} | \xi, \alpha \rangle \quad (15)$$

把 (10) 式代入上式得

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= \langle 0 | S^+(\xi) D^+(a) e^{\lambda a} D(a) S(\xi) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | e^{\lambda(a\text{chr} - a^+ e^{i\theta} \text{shr} + a)} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

其中已用到了算符公式

$$D^+(a) a D(a) = a + a \quad (17)$$

$$S(\xi) a S^+(\xi) = a \cdot \text{chr} + a^+ \cdot e^{i\theta} \text{shr} \quad (18)$$

由 Baker-Hausdorff 公式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad (19)$$

其中要求  $[A, [A, B]] = 0$ ,  $[B, [A, B]] = 0$ , 那么 (16) 式变为

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= e^{\lambda a - \frac{1}{2}\lambda^2 \text{shrchr} e^{i\theta}} \langle 0 | e^{-\lambda \cdot \text{hr} e^{i\theta} a^+} e^{\lambda \text{clra}} | 0 \rangle \\ &= e^{\lambda a - \frac{1}{2}\lambda^2 \text{shrchr} e^{i\theta}} \end{aligned} \quad (20)$$

同理, 我们还可得到

$$g(\beta) = \langle \alpha, \xi | e^{\beta a^+} | \alpha, \xi \rangle = f^*(\alpha) \quad (21)$$

利用 (20)、(21) 两式我们可以求出  $a$ ,  $a^+$  任意次幂的压缩相干态平均值:

$$\langle \xi, \alpha | a^n | \xi, \alpha \rangle = \frac{d^{(n)}}{d\lambda^n} f(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \quad (22)$$

$$\langle \xi, \alpha | a^{+m} | \xi, \alpha \rangle = \frac{d^{(m)}}{d\lambda^m} g(\beta) \Big|_{\beta=0} \quad (23)$$

其中  $m$ ,  $n$  是任意正整数. 我们感兴趣的是求  $a^4$ ,  $a^{+4}$ ,  $a^2$ ,  $a^{+2}$  的压缩相干态平均值, 由 (22)、(23) 不难得到

$$\langle \xi, \alpha | a^2 | \xi, \alpha \rangle = f''(0) = \alpha^2 - \text{shrchr} e^{i\theta} \quad (24)$$

$$\langle \xi, \alpha | a^{+2} | \xi, \alpha \rangle = g''(0) = \alpha^{*2} - \text{shr} \cdot \text{chr} e^{-i\theta} \quad (25)$$

$$\langle \xi, \alpha | a^4 | \xi, \alpha \rangle = f^{(4)}(0) = \alpha^4 - 6\alpha^2 \text{shrchr} e^{i\theta} + 3\text{sh}^2 r \text{ch}^2 r e^{i2\theta} \quad (26)$$

$$\langle \xi, \alpha | a^{+4} | \xi, \alpha \rangle = g^{(4)}(0) = \alpha^{*4} - 6\alpha^{*2} \text{shrchr} e^{-i\theta} + 3\text{sh}^2 r \text{ch}^2 r e^{-i2\theta} \quad (27)$$

为了得到  $\langle \xi, a | \Delta Y_1^2 | \xi, a \rangle$ , 我们还必须求出  $a^{+2}a^2$ ,  $a^+a$  在压缩相干态的平均值, 由  $|\xi, a\rangle$  的定义式 (1) 和式 (17)、(18) 得

$$\begin{aligned} \langle \xi, a | a^{+2}a^2 | \xi, a \rangle &= \langle 0 | (a^+ \text{chr} - a \text{shr} e^{-i\theta} + a^*)^2 (a \text{chr} - a^+ \text{shr} e^{i\theta} + a)^2 | 0 \rangle \\ &= |\alpha|^4 + 2\text{sh}^4 r + 4|\alpha|^2 \text{sh}^2 r + \text{sh}^2 r \text{ch}^2 r - \text{shrchr} (a^{*2} e^{i\theta} + a^2 e^{-i\theta}) \end{aligned} \quad (28)$$

同样的方法得

$$\langle \xi, a | a^+ a | \xi, a \rangle = |\alpha|^2 + \text{sh}^2 r \quad (29)$$

由 (6) 式我们有

$$Y_1^2 = \frac{1}{4} (a^4 + a^{+4} + 2a^{+2}a^2) + \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) = : Y_1^2 : + (a^+ a + 1/2) \quad (30)$$

其中用到了关系式

$$a^2 a^{+2} = a^{+2} a^2 + 4a^+ a + 2 \quad (31)$$

显然振幅平方压缩的条件 (9) 式可改写成

$$\langle : \Delta Y_1^2 : \rangle = \left( \frac{1}{4} \langle a^4 + a^{+4} + 2a^{+2}a^2 \rangle - \frac{1}{4} \langle a^2 + a^{+2} \rangle^2 \right) < 0. \quad (32)$$

把 (24) — (28) 式代入上式得

$$\begin{aligned} & [R^4 \cos 4\varphi + R^4 - 6R^2 \text{shrchr} \cos(2\varphi + \theta) - 2R^2 \text{shrchr} \cos(2\varphi - \theta) \\ & + 3\text{sh}^2 r \text{ch}^2 r \cos 2\theta + \text{sh}^2 r \text{ch}^2 r + 4|\alpha|^2 \text{sh}^2 r + 2\text{sh}^4 r \\ & - 2(R^2 \cos 2\varphi - \text{shrchr} \cos \theta)^2] < 0 \end{aligned} \quad (33)$$

其中  $X = R e^{i\varphi}$ , 上式经整理后得

$$-2R^2 \text{shrchr} \cos(2\varphi + \theta) + 2R^2 \text{sh}^2 r + \text{sh}^2 r \text{ch}^2 r \cos 2\theta + \text{sh}^4 r < 0 \quad (34)$$

这就是压缩相干态振幅平方压缩的条件, 显然它与通常压缩的条件 (14) 式有很大的差别, 特别是它与  $\alpha = R e^{i\varphi}$  直接相关, 这表明振幅平方压缩与通常的压缩是不等价的. 下面我们讨论几种特特情形下的振幅平方压缩条件.

$$(i) \quad \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = \frac{\pi}{4}.$$

此时 (34) 式变为

$$\text{cthr} < \frac{1}{2R^2} - 1 \quad (35)$$

当  $R$  很小,  $\gamma$  很大时上式极易满足.

$$(ii) \quad R \gg \gamma.$$

由于  $\gamma$  很小时有  $\text{sh}\gamma \rightarrow 0$  和  $\text{ch}\gamma \rightarrow 1$ , 我们略去 (34) 式中的  $\text{sh}^2\gamma$  和  $\text{sh}^4\gamma$  项, 则

$$\text{sh}\gamma \text{ch}\gamma \cos(2\varphi + \theta) > 0 \quad (36)$$

上式要求  $2\varphi + \theta < \frac{\pi}{2}$ , 这也是可以满足的, 它表明在通常压缩很小 ( $\gamma$  小) 的情况下, 仍存在振幅平方压缩.

$$(iii) \quad R = 0, \text{ 即压缩真空态.}$$

显然这时的振幅平方压缩条件为

$$\text{th}^2 \gamma > \cos 2\theta \quad (37)$$

当  $\theta > \frac{\pi}{4}$  时, 上式总可以成立, 当  $\theta = \frac{\pi}{2}$ , 振幅平方压缩最大, 而当  $\theta = 0$  时不存在振幅平方压缩, 显然这与通常压缩正相反, 通常各阶压缩在  $\theta = 0$  方向压缩最强, 而在  $\theta = \frac{\pi}{2}$  方向不存在压缩, 即最大振幅平方压缩与最大通常压缩的方向相互垂直。这不仅表明振幅平方压缩是独立于通常压缩的又一非经典效应, 它还显示出振幅平方压缩的意义不仅仅是通常压缩的简单推广, 对它的认识还有待我们去进一步深化。

### 参 考 文 献

- [1] Yuen H P, *Phys. Rev.*, **A13** (1976), 2226.
- [2] Stoler D, *Phys. Rev.*, **D1** (1970), 3217.
- [3] Ariano G D and Rasetti M, *Phys. Rev.*, **D35** (1987), 1239.
- [4] Katriel J, *et al.*, *Phys. Rev.*, **D35** (1987), 1248.
- [5] Hong C K and Mandel L, *Phys. Rev.*, **A32** (1985), 974.
- [6] Hillery M, *Opt. Commun.*, **62**(1987), 135; *Phys. Rev.*, **A36** (1987), 3796.
- [7] Gerry C C and Vrscaj E R, *Phys. Rev.*, **A37** (1988), 1779.
- [8] 范洪义、郭光灿, *光学学报*, **5** (1985), 804.

## Amplitude-Squared Squeezing of Squeezed Coherent State

Xia Yunjie    Guo Guangcan  
(*Physics Department*)

### Abstract

The characteristic of amplitude-squared squeezing of squeezed coherent state is studied. It is found that this kind of squeezing also exists in squeezed coherent state, but the existing condition is different from that of usual squeezing. And, in particular, the amplitude-squared squeezing doesn't exist, in the direction of maximum usual squeezing for squeezed vacuum state and vice-versa. From this point of the view, it is proved then that the amplitude-squared squeezing and usual squeezing are nonequivalent.

**Key words:** squeezed coherent state, squeezing, amplitude-squared squeezing.

## 复变量 Spence 函数的数值计算

叶竞波 戴青海 马文淦 张子平

(近代物理系)

### 摘 要

介绍了一个可计算复变量 Spence 函数的 Fortran 程序。该程序克服了西欧核子中心 (CERN) 程序库中相应程序只能计算实变量情形且仅给出其函数值实部的缺点。结果表明这个程序比 CERN 库中的程序有很大改进。

**关键词:** 数值计算, Spence 函数, 辐射修正。

**中图法分类号:** O411.9

对弱电标准模型的细致检验要求理论上计算各种物理过程的辐射修正, 而辐射修正的计算需要作圈图积分。单圈图的结果可最后表示为 Spence 函数<sup>[1,2]</sup>。在进行辐射修正的数值计算时涉及到复变量的 Spence 函数。尽管很早已有人利用 Spence 函数计算辐射修正, 但我们找不到相应的计算程序, 即使西欧核子中心的 CERN 程序库<sup>[3]</sup>, 也只能计算实变量 Spence 函数。而且, 当实变量  $x > 1$  时, Spence 函数的值应为复数, 而 CERN 库的程序仅取了其实部。这是不能满足实际计算需要的<sup>[4]</sup>。除了高能物理领域外, Spence 函数在其它学科中也有着广泛的应用。基于以上几个方面的原因, 有必要介绍我们的工作。

首先叙述 Spence 函数定义、性质及一些有用的公式。

Spence 函数的定义如下

$$\text{Sp}(z) = - \int_0^z t^{-1} \ln(1-t) dt \quad (1)$$

这里  $Z$  是任意复数。

由于对数函数为多值函数, 为了唯一地给出 Spence 函数的值, 我们按下式取定辐角

$$-\pi < \arg(1-z) \leq \pi \quad (2)$$

当  $z$  为实数且小于 1 时, 可以看到: Spence 函数的值为实数; 当  $z$  为实数且大于 1 或为复数时, 其值为复数。在 CERN 库中, 当变量大于 1 时其值仍取为实数。这种作法实际上是取了上下两支的平均值。由此丢掉了本应保留的虚部, 这是问题的所在。

当复变量  $z$  的模小于 1 且实部小于 1/2 时, 取  $t = 1 - e^{-u}$ , 作级数展开并积分得

$$Sp(z) = \int_0^{-1/z(1-z)} \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{u^n}{n!} du = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{(z')^{n+1}}{(n+1)!} \quad (3)$$

这里  $z' = -\ln(1-z)$ , 系数  $B_n$  为 Bernoulli 系数:

$$\begin{aligned} B_0 &= 1, B_1 = -1/2, B_2 = 1/6, B_4 = 1/30, \\ B_6 &= 1/42, B_8 = -1/30, B_{10} = 5/66, B_{12} = -691/2730, \\ B_{14} &= 7/6, B_{16} = -3617/510, B_{18} = 43867/798, \dots \end{aligned}$$

下面的两个公式是对任意复数  $z$  都成立的, 利用它们可以完成整个复平面上的 Spence 函数计算。

$$Sp(z) + Sp(1-z) = \frac{1}{6}\pi^2 - \ln(z)\ln(1-z) \quad (4)$$

$$Sp(z) + Sp(1/z) = -\frac{1}{6}\pi^2 - \frac{1}{2}\ln^2(-z) \quad (5)$$

当  $|z| \leq 1$  且  $\text{Re}(z) > 1/2$  时, 可以利用式 (3)、(4) 完成计算, 当  $|z| > 1$  时, 可以利用式 (3)、(4)、(5) 来完成计算。

利用上述 Spence 函数的性质, 我们发展了其数值计算程序。由于条件  $|z| \leq 1$  且  $\text{Re}(z) \leq 0.5$  的选取, 在利用 (3) 式作迭代时其收敛速度是相当好的。例如, 当取  $z = 1.15e^{i\frac{2.25}{180}\pi}$

时, 第十次迭代的相对误差已小于  $10^{-13}$  (相对误差 =  $\left| \frac{\sum_{m=0}^n B_m \frac{(z')^{m+1}}{(m+1)!} - \sum_{m=0}^{n+1} B_m \frac{(z')^{m+1}}{(m+1)!}}{\sum_{m=0}^{n+1} B_m \frac{(z')^{m+1}}{(m+1)!}} \right|$ );

第十一次迭代时已小于  $10^{-300}$  (本程序是在 VAX 机上实现的, 在 VAX(VMS)FORTRAN 中, 对双精度数, 如编译时带限定词/G-FLOATING, 则数据允许范围为  $0.56 \times 10^{-300} \sim 0.9 \times 10^{+300}$ , 其近似精度为十五位十进制数)。见表 1。

表 1  $z = 1.15e^{i\frac{2.25}{180}\pi}$  时的收敛情形

迭代次数	迭代结果	相对误差
1	(-0.799325930854648, -0.473577274598056)	100.0000000000
2	(-0.757626594105304, -0.573069749809728)	2.19662761472865
3	(-0.759114235068563, -0.580801744539638)	0.613653681246773
4	(-0.759080982711144, -0.580794768140825)	-3.206606002380371E-003
5	(-0.759081124255391, -0.580794562872244)	-1.288998258203202E-006
6	(-0.759081125384754, -0.580794564633300)	2.058057215427228E-007
7	(-0.759081125366382, -0.580794564636517)	-1.322088748385052E-009
8	(-0.759081125366420, -0.580794564636349)	-7.492200203029596E-012
9	(-0.759081125366421, -0.580794564636350)	1.626213997556809E-013
10	(-0.759081125366421, -0.580794564636350)	<1.000E-308
11	(-0.759081125366421, -0.580794564636350)	<1.000E-308

下面比较我们的程序与 CERN 库程序的计算结果。从表 2 可以看到：当  $z$  取实数且小于 1 时，我们的结果与 CERN 库中相应程序 DILOG( $z$ ) 运行的结果符合得非常好，当  $z$  取大于 1 的实数时，我们的实部与 CERN 库的结果也符合得非常好，但本文程序比其多出了虚部，这是我们编制此程序的目的之一。另外，CERN 库中的 DILOG( $z$ ) 是不能计算复变量情形的。我们在进行辐射修正时，利用本文所介绍的程序 CDILOG( $z$ ) 给出了令人满意的结果<sup>[5]</sup>。

表 2 不同程序结果比较

X	CERN DILOG 结果	OUR CDILOG 结果
-5.0000	(-2.749279126060808	(-2.749279126490376, 0.0000000000000000E+00)
-4.0000	(-2.369939796998366	(-2.369939797427933, 0.0000000000000000E+00)
-3.0000	(-1.939375420766709	(-1.939375421196277, 0.0000000000000000E+00)
-2.0000	-1.436746366883681	(-1.436746367313249, 0.0000000000000000E+00)
-1.0000	-0.8224670334241149	(-0.8224670338536811, 0.0000000000000000E+00)
-0.5000	-0.4484142069236469	(-0.4484142069236467, 0.0000000000000000E+00)
-0.2000	-0.1908001377775361	(-0.1908001377775362, 0.0000000000000000E+00)
0.2000	0.2110037754397034	(0.2110037754397041, 0.0000000000000000E+00)
0.5000	0.5822405264650110	(0.5822405264650117, 0.0000000000000000E+00)
0.9999	1.644934066848205	(1.64493406727777, 0.0000000000000000E+00)
2.0000	2.467401100272337	(2.467401099413205, -2.177586090303601)
3.0000	2.320180423313098	(2.320180422883531, -3.451392295223202)
4.0000	2.061309466777318	(2.061309466347750, -4.355172180607203)
5.0000	1.811470534392161	(1.811470533962592, -4.992729645220518)

编辑和审稿者帮助指出了初稿中的笔误并指出了有益的建议，作者深表感谢！

### 参 考 文 献

- [1] Ken-ichi Aoki *et al.*, *Supplement of Prog. Theor. Phys.* **73** (1982), 1.
- [2] G.'t Hooft *et al.*, *Nucl. Phys.*, **B153** (1979), 365.
- [3] CERN Program Library, CERN computer centre, 1988.
- [4] Lewin L., *Dilogarithms and Associated Function*, London, Macdonald, 1958.
- [5] 叶竞波等, *高能物理与核物理*, **9** (1989), 772.

# Calculation of the Spence Function for a Complex Variable

Ye Jingbo Dai Qinghai Ma Wengan Zhang Ziping  
(*Department of Modern Physics*)

## Abstract

A Fortran program is introduced which is used to compute the Spence function for a complex variable. The program improves on an analogous one in the CERN program library, which can only compute the real variable function and produce only the real part of its value. The results show that the program is more advanced.

**Key words:** numeral calculation, Spence function, radiative correction.

## KT-5C 装置工程和实验参数

闻一之 万树德 刘万东 俞昌旋 李毅 项志遴

(近代物理系)

### 摘 要

概述了新托卡马克装置KT-5C在薄壁真空室、磁体与磁场、电源及放电等离子体方面的参数与主要特点;还论及了本课题的射频波传播、非圆截面、各项诊断等实验方案。

**关键词:**托卡马克,真空室,磁场,等离子体实验方案,诊断。

**中图法分类号:** O532.11, O532.22

### 1 引言

KT-5C托卡马克装置是在原KT-5和KT-5B装置<sup>[1]</sup>(真空室和磁体由意大利Frascati研究所赠送)工作基础上提出的。原装置的真空室窗口少而小<sup>[2]</sup>,纵场磁体间隔窄,可用空间小;连接及绝缘性能差,故障多;角向场磁体支承弱,形变严重,使平衡调节非常困难。为了开展波与等离子体相互作用研究及发展新的诊断手段等实验,在1989年开始了KT-5C装置的改造和研制工作。以对原有的电源、控制、真空抽气、充气等系统加以改造利用为前提,从实验需要及工程可行等方面进行了论证、计算,提出了KT-5C新装置的参数指标。KT-5C装置的真空室及磁体与支承部分已由等离子体研究所承担完成工程设计并投入加工制造,电源、控制、诊断、数据采集等各部分的改造、研制由我们承担。

### 2 KT-5C装置的真空室与磁体参数

为便于拆装维护及实验变换,KT-5C装置真空室采用双半环连接、双绝缘隔缝(KT-5B为单隔缝),真空室用1.5mm无磁不锈钢板制成薄壁环管,磁场能迅速穿过室壁,适应小型装置放电时间短的情况。新装置的真空室的大小半径、窗口口径及数量较之KT-5B的有增加<sup>[1,2]</sup>。其大半径 $R=32.5\text{cm}$ ,小半径 $a=12.5\text{cm}$ ,窗口总数36个,大口径的有16个(包括2对跑道形窗口)。这样,真空室内部空间大,可及性较好,能安装各种天线、探测器阵

1989年5月23日收到。



列等。真空抽气系统由 450l/s 分子泵为主泵,按总漏气与放气的气载不超过  $5 \times 10^{-5}$  Pa l/s 的设计值预计可实现本底真空度优于 KT-5B,达到  $1 \times 10^{-6}$  Pa。

为了提供较大的真空室窗口与外部空间,我们将 KT-5C 的纵场磁体减为 16 组<sup>[1]</sup>,经验算,此时小截面边缘处的纵场波纹度仍小于 5%,满足实验要求。磁体采用卷带绕制,每组为双 4 匝圈式结构,大半径为 34cm,总匝数为 128 匝,在电流为 7.5kA 时,中心场强为 0.6T,纵场场强允许达到 1.0T,此时能量为  $8.7 \times 10^4$  J。

加热场仍为空气芯,含中心螺管及两对补偿线圈,中心螺管仍为 85 匝平线式。计算参数如下:总电感 1.24mH,电阻 90.4m $\Omega$ ,与垂直场互感 8.7 $\mu$ H,与等离子体互感 10.4 $\mu$ H,在电流为 2kA 时,可提供伏秒值为 20.9mWb,在等离子体区最大杂散场小于  $1.8 \times 10^{-4}$  T,满足要求。

垂直场用单组对称线圈提供,电感量 116 $\mu$ H,电阻 14.4m $\Omega$ ,与等离子体互感 1.7 $\mu$ H,衰减系数 0.5,电流 3.38kA 时可提供 5.8mWb 伏秒值,能维持 20kA 等离子体电流平衡。

### 3 磁场电源与波加热高频功率源参数

共有二百台 5kV 脉冲电容器作为磁场储能电源之用,其中大部分用于纵场,已对改造

KT-5B 磁场电源适应 KT-5C 要求作了实验预试,用于主迴路开关引燃管的主触发电路如图 1。引燃管采用英国 EEV 公司的 BK 496 新型管(KT-5B 原用苏制及国产旧式管,容量小,性能差),容量高达 400C,除了二个触发极外,还有一个辅助阳极,用以实现自动续流导通。其触发特性的测试结果如表 1。在额定供电电压下,引燃管处于强触发状态,导通很可靠。

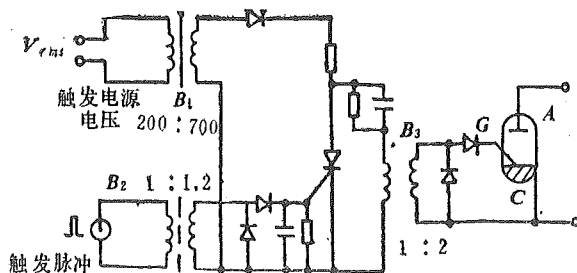


图 1 引燃管触发电路

表 1 引燃管触发特性

编号	引燃极 冷阻 ( $\Omega$ )	最低触发电源 电压 $V_{rms}$
516	167, 172	45
517	150, 170	45
537	149, 168	50
538	125, 145	50

注:触发电源的常态工作电压为  $V_{rms} = 220$  V,阳极直流电压为 50~3000V。

为了获得较好的纵场电流平顶,采用多节 LC 成形电路,在总储能电容量不变的情况下,经数值计算优选了平顶时间长、幅值大、上升快而 LC 节数少的数据如表 2。与表中数据相应的各电容器组是等压充电,只须一个充电电源和一个主开关管,结构简单、费用低。图 2 为相应于表 2 的纵场主放电路原理图。图 3 是与表 2 第一行数据相应的纵场波形(曲线 a),实测与计算(虚线)符合良好。

表 2 纵场放电回路参数

$C_0$ (mF)	$C_1$ (mF)	$C_2$ (mF)	$L_1$ (mH)	$L_2$ (mH)	$t^*$ 平顶 (ms)	$t_{\text{上升}}$ (ms)	相对幅值 %
5.8	9.2	/	1.0	/	8.4	3.2	100
5.8	5.8	3.6	0.8	0.5	7.9	3.3	102.4

\* 大于等于 90% 幅值的持续时间

目前已完成了离子伯恩斯坦波加热 (IBWH) 实验用 10kW 级高频功率源的研制, 其输出功率为 0.2—10kW, 频率范围 6—10MHz, 匹配阻抗 300—2000Ω。今后将研制 100kW 级的高频功率源用于波加热实验。

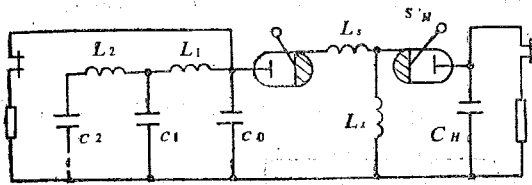


图 2 纵场充电和放电成形线路

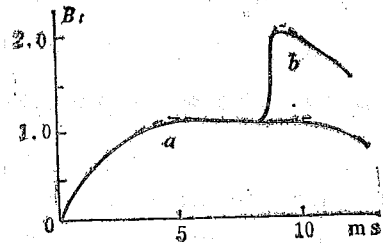


图 3 纵场放电波形

#### 4 KT—5C 装置的等离子体参数

KT—5C 的最大等离子体小半径可达 10cm, 在采用小半径为 9cm 的限制器时, 典型情况下圆截面放电等离子体的参数为: 等离子体电流  $I_p = 20\text{kA}$ , 磁轴大半径 33cm, 截面小半径  $a_p = 8.9\text{cm}$ , 截面拉长度为 1.03, 三角形变约 0.06, 等离子体环流电感  $0.66\mu\text{H}$ , 等离子体温度 100 eV, 电子密度  $0.5\text{--}2 \times 10^{19}/\text{m}^3$ 。

为适应不同实验要求, 在真空室内设置活动限制器, 可以同时改变等离子体环流的大小半径, 并对等离子体与器壁相互作用和杂质情况进行研究。

#### 5 非圆截面、快压缩和射频波实验以及新诊断技术等

利用 KT—5C 薄壁真空室条件, 我们考虑了进行绝热快压缩加热、非圆截面放电以及离子伯恩斯坦波和阿尔芬波加热等实验, 图 4 给出一种垂直拉长截面的计算结果, 这是在真空室外围上下及里外侧安置两对成形场线圈, 当成形场电流与等离子体电流之比为 1:5 时, 用自由边界法计算得到的椭圆截面等离子体, 其拉长度可达 1.5。我们可同时研究对非圆截面等离子体进行平衡稳定控制的问题。

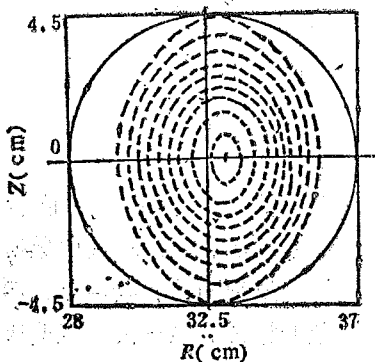


图 4 KT—5C 拉长截面等离子体

KT—5C 上纵场绝热快压缩加热的主放电路如图 2 右边是压缩用电容  $C_H$  与开关  $S_H$  (引燃管), 在  $C_H$  充电电压为  $C_0$  的 22 倍时, 纵场场强将在  $300\mu\text{s}$  内加

倍(图3曲线b),使等离子体小半径缩小到约0.7倍,与限制器壁脱离接触,能量密度增加,温度提高到1.6倍。不过此时 $C_n$ 要求充电到50kV级,这对于纵场绝缘等是一个严峻考验,须谨慎从事,

此外,在KT-5B装置上,我们已进行了外激发离子伯恩斯坦波特特性研究<sup>[4]</sup>,最近又利用10kW级高频功率源对纵环天线(Nagoya III型)的阻抗与耦合特性等进行了实验测试,这些工作在国内是首次进行,在KT-5C上,我们可根据已有经验,进一步开展高功率的IBWH实验。

KT-5C装置具有较好的综合性能,可灵活地开展其他多方面物理实验与诊断工作,如远红外激光散射、多道干涉、多点探针、阵列探头X线测量、多种光谱观察等诊断技术以及其他研究如湍流和能量与粒子的输运,MHD不稳定性,阿尔芬波等。

我们对支持与协助本项目的等离子体所领导和参加者表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] 闻一之等,核聚变与等离子体物理,7(1987),27.
- [2] 闻一之等,核聚变与等离子体物理,10(1990),53.
- [3] 郑少白,核聚变与等离子体物理,4(1984),47.
- [4] Chinese Physics Letters, Liu Wandong (刘万东), *et al.*, 6(1989), 201.

## Engineering Parameters for KT-5C Tokamak Experiments

Wen Yizhi Wan Shude Liu Wandong  
Yu Changxuan Li Yi Xiang Zhilin  
(Department of Modern Physics)

### Abstract

The engineering parameters and main features of the new Tokamak KT-5C, including thin wall vessel, magnets, field strength, power supply and discharge plasma, are described, and some experiments related to the undertaking project, such as RF wave, shaping, compression and various diagnostics, are also discussed.

**Key words:** Tokamak, vacuum vessel, magnetic fields, plasma Experiments, diagnostics.

# 非接触精密角位移测量的研究

孙葆根 沈兰荪

陈岭丽

(无线电电子学系)

(精密机械与精密仪器系)

## 摘 要

用最小二乘拟合莫尔条纹信号细分法实现对象位移的测量具有硬件简单、精确度高等优点。采用14400线/周的计量圆光栅构成的角位移测量系统，测试精确度可达 $0.1''$ 。

**关键词：**非接触测量，莫尔条纹，角位移。

**中图法分类号：**TM930.126, TM938.81

## 1 前言

在智能机器人、计算机视觉等高科技领域，需要发展一种非接触的自动进行二维（矢径与角位移）信号的精密测量方法。传统的一些方法<sup>[1]</sup>难以满足对系统精确度的要求。

作者采用线阵 CCD 与计量圆光栅建立了一个智能化非接触二维光电测量系统<sup>[2,3]</sup>，取得了较为理想的测量结果。本文介绍这一测量系统采用的一种新的测量方法——最小二乘拟合莫尔条纹信号细分法，这个方法利用14400线/周的计量圆光栅对象位移进行精密测量。理论分析与实验测试，精确度均可达 $0.1''$ 。

## 2 智能化非接触二维光电测量系统

图1示出一个采用个人仪器（personal instrument）结构、智能化非接触二维光电测量系统。系统采用线阵 CCD 与计量圆光栅分别完成矢径与角位移的测量，计算机进行数据处理和控制，并用步进电机实现角度的机械扫描<sup>[2,3]</sup>。

## 3 角位移的测量方法

计量光栅测角位移是利用了光栅的莫尔条纹现象，但其测量精确度受光栅的栅距角的限制<sup>[4]</sup>。采用14400线/周的计量圆光栅，角位移的分辨率仅为 $1.5'$ 。提高测量精确度的传统方法是采用内插法对莫尔条纹进行细分，即在莫尔条纹信号变化的一个周期内给出若干个计

数脉冲减小脉冲当量来实现细分。这类采用硬件实现细分的方法，细分倍数越高，电路越复

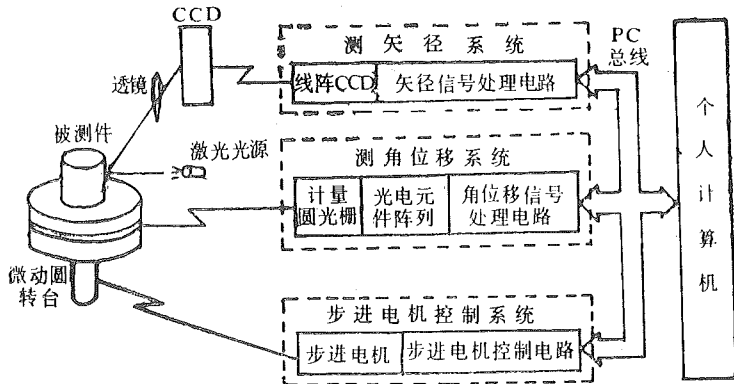


图1 智能化非接触二维光电测量系统

杂，对莫尔条纹信号也就要求越严格。

我们根据莫尔条纹信号的特点，提出一种用软件实现的最小二乘拟合莫尔条纹信号细分法。

由于莫尔条纹信号与角位移  $\theta$  成正弦函数关系，其周期为栅距角  $\theta_R$ 。所以在测量区间  $[0, \theta]$  内，莫尔条纹信号可以分解为整数周期和分数周期两部分，如图2所示。

这样，角位移  $\theta$  表示为

$$\theta = N\theta_R + \frac{-\varphi_0 + \varphi'_0}{2\pi} \theta_R \quad (1)$$

其中： $N\theta_R$ 为整数周期部分； $N$ 为区间内莫尔条纹信号的周期数； $\frac{-\varphi_0 + \varphi'_0}{2\pi} \theta_R$ 为

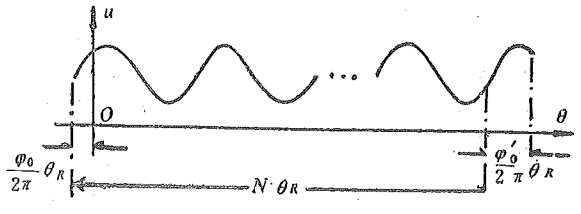


图2 莫尔条纹信号的分解

分数周期部分； $\varphi_0$ 、 $\varphi'_0$ 分别为莫尔条纹信号在本次和下次测量的初相角。

显然，精密测量的关键是计算出莫尔条纹信号的初始相角  $\varphi_0$ 。为此，采用一个光电元件阵列，可以测得一组莫尔条纹信号，这组莫尔条纹信号的初始测量值可表示为

$$y_i = a_0 + a \sin(x_i + \varphi_0) \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2)$$

式中： $\varphi_0$ —莫尔条纹信号初相角； $x_i$ —由光电元件阵列的位置决定的莫尔条纹信号的相角。

根据已知数据  $x_i (i = 1, \dots, n)$  和测量数据  $y_i (i = 1, \dots, n)$  按最小二乘法对(2)式进行曲线拟合计算出初相角  $\varphi_0$ ，进而由(1)式计算出角位移  $\theta$ 。

在(2)式中，由于  $y_i \sim \varphi_0$  是非线性的，所以直接按(2)进行最小二乘拟合是相当复杂的，为此将(2)式改写成

$$y_i = a_0 + a_1 \cos x_i + a_2 \sin x_i \quad (i = 1, \dots, n) \quad (3)$$

其中

$$\begin{cases} a_1 = a \sin \varphi_0 \\ a_2 = a \cos \varphi_0 \end{cases} \quad (4)$$

由(3)式按最小二乘法得拟合参数矩阵  $A$ ，

$$A = [B'(x)B(x)]^{-1}B(x)Y$$

这里

$$A = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$B(x) = \begin{pmatrix} 1 & \cos x_1 & \sin x_1 \\ 1 & \cos x_2 & \sin x_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cos x_n & \sin x_n \end{pmatrix}$$

并记  $c(x) = [B'(x)B(x)]^{-1}B(x)$ , 则

$$A = c(x)Y \quad (5)$$

由于数据  $x_i (i=1, \dots, n)$  在系统安装调整完毕后唯一确定, 所以可事先计算出矩阵  $c(x)$  再根据测量值  $y_i (i=1, \dots, n)$  按 (5) 式编程计算出矩阵  $A$ 。

初相角的计算分式数据由表 1 给出。考虑到要防止计算机溢出,  $\varphi_0$  在  $0 \sim 2\pi$  内分成 8 个区间。

表 1 初相角的计算数据

$\varphi_0$ 表示式	条 件	$\varphi_0$ 值范围
$\text{tg}^{-1}(a_1/a_2)$	$a_1 - a_2 \leq 0$	$0 \sim 45^\circ$
$90^\circ + \text{tg}^{-1}(-a_2/a_1)$	$a_1 - a_2 > 0$	$45^\circ \sim 90^\circ$
$90^\circ + \text{tg}^{-1}(-a_2/a_1)$	$a_1 + a_2 \leq 0$	$90^\circ \sim 135^\circ$
$180^\circ + \text{tg}^{-1}(a_1/a_2)$	$a_1 + a_2 > 0$	$135^\circ \sim 180^\circ$
$180^\circ + \text{tg}^{-1}(a_1/a_2)$	$a_1 - a_2 \geq 0$	$180^\circ \sim 225^\circ$
$270^\circ + \text{tg}^{-1}(-a_2/a_1)$	$a_1 - a_2 < 0$	$225^\circ \sim 270^\circ$
$270^\circ + \text{tg}^{-1}(-a_2/a_1)$	$a_1 + a_2 \leq 0$	$270^\circ \sim 315^\circ$
$360^\circ + \text{tg}^{-1}(a_1/a_2)$	$a_1 + a_2 > 0$	$315^\circ \sim 360^\circ$

#### 4 角位移测量系统

测量角位移系统的硬件电路如图 3 所示。采用 14400 线/周的计量圆光栅, 光电元件阵列选用线性硅光电池阵列 SL936—1×5C, 并用 ADC0808 采集 8 组莫尔条纹信号测量值。

计量圆光栅的莫尔条纹经光电元件阵列转换成一组莫尔条纹信号。这组莫尔条纹信号, 一路经辨向计数电路测出莫尔条纹信号的周期数; 另一路经数据采集单元得到莫尔条纹信号的初始测量值, 再送 PC 机进行最小二乘拟合计算出初相角, 最后计算出角位移。

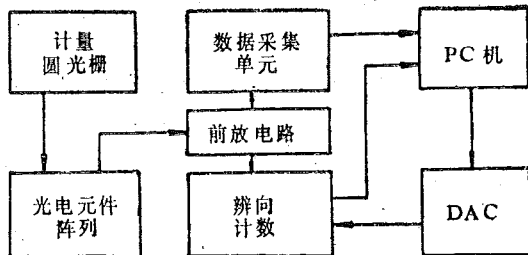


图 3 测角位移的实验系统

## 5 误差分析及实验结果

在测角位移系统中, 由于存在随机误差和系统误差, 从而影响角位移的测量精确度。我们采用了最小二乘拟合莫尔条纹信号细分法, 可使影响角位移测量精确度的随机误差和系统误差减少到最低程度。

系统误差主要来源于计量圆光栅刻线的不均匀性、主轴安装偏心、硅光电池阵列各单元的非均匀性以及各路放大器增益的不一致性等。由于系统误差具有一定的规律性, 我们元件的选择与系统的装配中已采用了相应的措施来尽量消除它的影响。

随机误差主要来源于照明光源的光照强度的变化、硅光电池阵列的噪音、前放的温漂、ADC 量化误差以及计算机有限字长效应等。由于电路设计使其它误差均低于 ADC 量化误差, 在此仅对 ADC 量化误差的影响进行分析。

对于 8 bits 的 ADC 0808, 在满量程应用情况下, 量化误差引起莫尔条纹信号测量值的标准误差为

$$\sigma_y = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{a_0 + a}{2^8}$$

这里,  $a_0$  是莫尔条纹信号的直流分量,  $a$  是其振幅, 取  $a_0 = a$ , 则  $\sigma_y = \frac{\sqrt{3}}{3} \cdot \frac{a}{2^8}$ 。

由 (5) 式推导出, 拟合参数的标准误差

$$\begin{cases} \sigma_{a_0} = \left( \sum_{i=1}^n c_{1i}^2 \right)^{1/2} \sigma_y \\ \sigma_{a_1} = \left( \sum_{i=1}^n c_{2i}^2 \right)^{1/2} \sigma_y \\ \sigma_{a_2} = \left( \sum_{i=1}^n c_{3i}^2 \right)^{1/2} \sigma_y \end{cases}$$

一般地,  $\sigma_{a_1} = \sigma_{a_2}$ , 根据表 1 可推导出初相角  $\varphi_0$  的标准误差

$$\sigma_{\varphi_0} = \frac{|\cos \varphi_0|}{a} \sigma_{a_1}$$

由 (1) 式导出角位移  $\theta$  的标准误差

$$\sigma_\theta = \frac{\sqrt{2}}{2\pi} \theta_R \sigma_{\varphi_0}$$

这样, 在  $n=8$ ,  $x_1=0$ ,  $x_2=44^\circ$ ,  $x_3=91^\circ$ ,  $x_4=136^\circ$ ,  $x_5=189^\circ$ ,  $x_6=224^\circ$ ,  $x_7=271^\circ$ ,  $x_8=315^\circ$  时, 根据上列各式计算出角位移的最大标准误差

$$\sigma_\theta = 0.023''。$$

取角位移的测量精确度为  $2\sigma_\theta$ , 则此时角位移的测量精确度可达  $0.046''$ 。

我们用研制的系统进行了角位移的实测, 并用精确度为  $0.45''$  的仪器对角位移进行标定。实验数据如表 2 所示, 角位移的误差曲线如图 4。

表 2 角位移的实测数据

莫尔条纹信号测量值								拟合参数			初相角 $\varphi_0$ (°)	初始角位移 $\Delta\theta$ (s)	标定角位移 $\theta$ (s)
$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$	$y_7$	$y_8$	$a_0$	$a_1$	$a_2$			
0.741	0.925	0.765	0.502	0.247	0.216	0.408	0.710	0.540	0.178	0.300	31.88	7.970	4.50
0.749	0.925	0.765	0.494	0.243	0.216	0.416	0.718	0.541	0.194	0.299	33.02	8.255	4.95
0.757	0.925	0.765	0.486	0.239	0.220	0.424	0.725	0.542	0.201	0.295	34.18	8.545	5.40
0.776	0.922	0.737	0.467	0.231	0.235	0.443	0.737	0.541	0.216	0.277	37.94	9.485	6.30
0.788	0.922	0.729	0.447	0.224	0.239	0.463	0.745	0.540	0.229	0.268	40.54	10.14	6.75
0.804	0.918	0.718	0.431	0.210	0.247	0.482	0.761	0.540	0.244	0.257	43.55	10.89	7.65
0.816	0.918	0.698	0.412	0.212	0.259	0.498	0.776	0.541	0.256	0.242	46.64	11.66	8.55
0.827	0.914	0.686	0.396	0.208	0.271	0.576	0.792	0.549	0.275	0.215	51.97	12.99	9.90
0.839	0.914	0.671	0.380	0.204	0.282	0.537	0.816	0.545	0.283	0.216	52.66	13.17	10.35
0.851	0.910	0.655	0.361	0.200	0.294	0.553	0.804	0.542	0.290	0.202	55.19	13.80	10.80
0.861	0.906	0.620	0.333	0.200	0.322	0.592	0.800	0.541	0.302	0.171	60.51	15.13	12.15
0.875	0.902	0.600	0.318	0.200	0.337	0.612	0.808	0.542	0.313	0.154	63.77	15.94	13.05
0.890	0.898	0.569	0.290	0.200	0.369	0.647	0.812	0.543	0.326	0.124	69.16	17.29	14.40
0.894	0.878	0.553	0.278	0.204	0.384	0.667	0.816	0.543	0.330	0.105	72.40	18.10	15.30
0.898	0.863	0.533	0.267	0.208	0.404	0.682	0.816	0.542	0.333	0.085	75.66	18.92	16.20
0.902	0.855	0.510	0.250	0.212	0.420	0.702	0.816	0.541	0.338	0.065	79.08	19.77	17.10
0.906	0.820	0.476	0.235	0.226	0.455	0.733	0.820	0.541	0.340	0.028	85.33	21.33	18.45
0.906	0.808	0.459	0.227	0.235	0.475	0.751	0.820	0.542	0.340	0.009	88.55	22.14	19.35
0.902	0.780	0.424	0.212	0.251	0.510	0.780	0.816	0.542	0.339	-0.03	94.64	23.66	20.70
0.902	0.765	0.406	0.208	0.263	0.529	0.784	0.812	0.541	0.335	-0.04	97.49	24.37	21.60

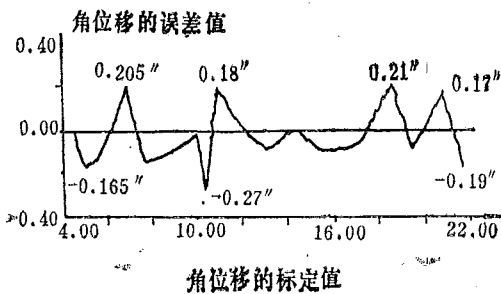


图 4 实测角位移的误差曲线

这样, 角位移的实测标准误差为

$$\sigma_{\theta} = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta\theta_i - \Delta\bar{\theta}_i)^2 \right]^{1/2} = 0.139''$$

则角位移的实测精确度为  $0.278''$ , 若用更高精确度的仪器对角位移进行标定, 其精确度可达  $0.1''$ . 因此, 实验结果与理论分析是吻合的.

### 参 考 文 献

- [1] 严钟豪、谭祖根, 非电量电测技术, 机械工业出版社, 北京, 1983: 284~292.
- [2] 沈兰荪、陈岭丽、孙葆根, 电子测量与仪器学报, 4 (1990), 1-8.



- [ 3 ] 孙葆根, 智能化非接触精密二维光电测量系统的研究, 中国科技大学硕士论文, 1989年。
- [ 4 ] 张善锤等, 计量光栅技术, 机械工业出版社, 北京, 1982; 1982—262。

## Research of a Noncontact Precision of Angle Shifting

Sun Baogen    Shen Lansun

*(Department of Radio and Electronics)*

Chen Lingli

*(Department of Precision Machinery and Instrumentation)*

### Abstract

In the field of robot and computer vision, it is necessary to find a non-contacted measuring method of angle shifting. This paper proposes a new fine division method for Moller streaks. This method has the advantages of requiring simple hardware and producing high accuracy. Theoretical analyses and experimental results demonstrate that the method enables a measuring angle shift system consisting of 14400 lines/circumference circular grating to reach a measuring accuracy of  $0.1''$ .

**Key words:** noncontact measurement, Moller streaks, angle shift.

# Apple II 微机控制的核探测系统

霍剑青 梁伟圣

(基础物理中心)

## 摘 要

阐述用 Apple II 微机控制的核探测系统实现核物理实验定时、定数、改变电压或阈值测量的原理、方法和特点。系统的定时、定数测量功能完全取代了定标器，用于核物理实验，提高了实验精确度。

**关键词：**核探测，定时，计数率，阈值。

**中图法分类号：**O571.1

## 1 引言

定时、定数、改变电压或阈值进行测量是核物理实验中常用的实验手段。为减小测量统计误差提高精确度，往往需要增加测试时间、次数或在短时间内的扫描次数。常规核物理实验中，定时、定数测量是用定标器实现的，电压或阈值的改变(用单道测量时)则以手动完成，因测量时间长、周围环境变化，实验结果往往有很大误差。用于教学物理实验时，由于耗时长，无法完整验证物理思想，影响了教学效果。

Apple II 微机控制的核探测系统在省去定标器的情况下，实现了核物理实验的自动定时、定数、改变电压或阈值测量，提高了测量精确度。

## 2 系统的组成和工作原理

系统由软件和接口电路两部分构成。

软件包括 BASIC 语言主程序和 6502 汇编语言子程序。BASIC 语言主程序主要用于测量前键盘输入预置参数、输出测量结果及进行数据处理。预置参数为测量次数、每次测量时间、定数值、电压或阈值的步进值等。6502 汇编语言子程序按照预置参数控制各硬件的状态，实现自动测量和采集数据。由于 6502 CPU 中没有 16 位寄存器，自动测量前软件先将输入参数转换成 16 进制数后，再按高八位、低八位数分别存入寄存器。自动测量开始，软件便向接口电路发出信号，置各硬件初始状态，软件每控制完成一次自动测量，便向接口箱

1989年4月27日收到。

发出一次采集数据信号，并将数据存入各预置的的存贮单元，同时置各硬件到相应的状态，再进行下一次自动测量，如此反复，直至满足物理要求。

为适应物理实验要求，软件设有供实验者反复调整实验条件的子程序，并能重复分段显示实验、理论及不同实验条件下的曲线，以便分析测量结果。软件流程如图 1 所示（以改变电压或阈值定时测量为例）。

接口电路用于微机与核探测器通讯，即根据微机输出信号给核探测器提供自动扫描的控制信号，又将探测器获得的信息按微机的输入信号传输给微机（图 2）。

接口电路在软件控制下的工作过程如图 3 所示（仍以改变电压或阈值定时测量为例）。

整个过程分为增加电压步进值和固定电压下定时测量两个阶段，由控制图 2 中虚线框内各元件的状态实现。

运行过程如下：执行 LDA \$C0FB 指令，译码器 Y<sub>1</sub> 脚呈低电平，使触发器置“0”、振荡器关闭，电压八位计数器置初值，此初值经 D/A 变换后，置电源电压初值。因此，调

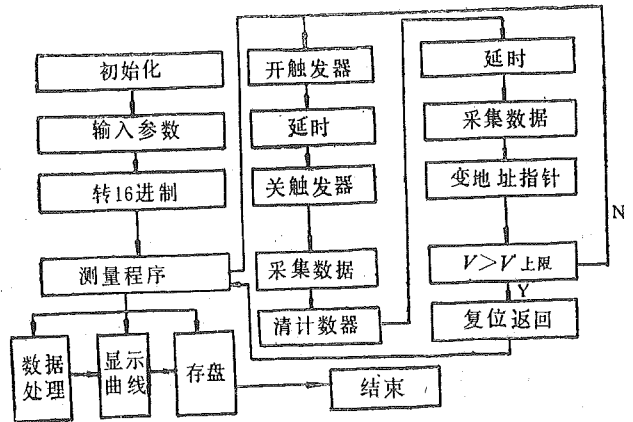


图 1 软件流程图

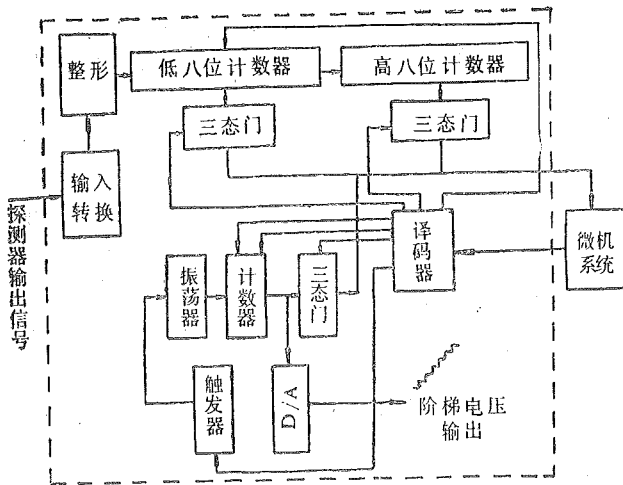


图 2 接口电路原理图

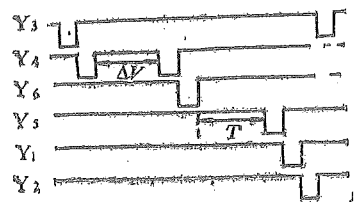


图 3 系统运行时序图

整八位计数器初始状态，可调节电压初值。增加电压步进值是由程序中执行两个 LDA \$C0FC 指令实现的，每执行一次 LDA \$C0FC 指令，译码器 Y<sub>1</sub> 脚呈低电平，触发器交替呈“1”或“0”状态。当触发器呈“1”状态时，振荡器起振，向八位计数器输入脉冲；触发器呈“0”状态时，振荡器停振。每两个 LDA \$C0FC 指令的时间间隔，对应着振荡器每次起振后向八位计数器输入的脉冲个数，经 D/A 变换后控制电源输出电压。因此，电压步进值随两个 LDA \$C0FC 指令的时间间隔变化。电压每增加一个步进值后，分别执行 LDA \$C0FE, LDA \$C0F9, LDA \$C0FD, LDA \$C0FA 指令使译码器 Y<sub>6</sub>, Y<sub>5</sub>,

$\bar{Y}_1$ ,  $\bar{Y}_2$  管脚分别呈低电平, 进行计数器清零、计数及采集数据的过程, 实现固定电压下的定时测量, 其中 LDA \$C0FE 与 LDA \$C0F9 指令的时间间隔即为测量的定时值。每重复一次上述过程, 电压便上升一个步进值, 直至电压达到上限值, 再执行一次 LDA \$C0FB 指令使电源电压复位。

### 3 系统性能与实验结果

系统作定时测量时, 每次定时值为  $0.3s \sim 0.3s \times 255$  (约 1.2min), 每次最大定数值为 65535, 测量时间为  $0.3s \sim 0.3s \times 65535$  (约 5.4h), 扫描电压分辨率为  $V/255(V)$  (V视不同高压电源及量程而异), 对单道分析器阈值分辨率为  $\frac{10}{255} \approx 0.04(V)$ , 接口最大扫描输出电压为  $\pm 5V$ , 并随控制调节比例变化。

我们用 Apple II 微机控制的核探测系统对 G-M 计数管坪特性、核衰变统计分布规律、 $Cs^{137}\gamma$  能谱、Al 对  $\beta$  射线的吸收进行了测量, 测量结果如图 4 ~ 图 8 所示。图 4 的电压初

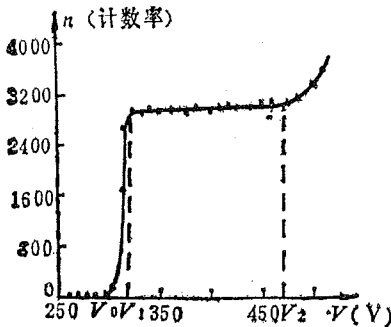


图 4 J408r型G-M计数管坪特性曲线

进值取  $\frac{550}{255} \times 4 \approx 9.2V$ , 坪区各点测试时间为 1.2s,

计数  $N > 2500$ , 计数的相对标准误差  $\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{N}} < 2\%$ 。

实验测得该 G-M 计数管坪特性主要参数: 起始电压

$$V_0 = 300V, \text{坪长 } \Delta V = 150V, \text{坪斜 } T = \frac{N_2 - N_1}{N_1(V_2 - V_1)}$$

$$= \frac{3160 - 2840}{2840 \times 150} \approx 0.075\%(V^{-1}), \text{计数管的工作点通}$$

常取在坪长靠  $V_1$  端的  $\frac{1}{3} \sim \frac{1}{2}$  处, 工作电压为 350V - 400V, 图 5、图 6 为核衰变统计规律曲线。测量时计数管工作电压取 380V, 测量次数分别为 1000 次、400 次, 每次测量时间 0.3s。为分析实验结果, 将平均计数  $\bar{N}$  ( $\bar{N} = \frac{\sum NP(N)}{\sum P(N)}$ , 其中  $P(N)$  为计数  $N$  出现的概

率。) 分别代入泊松分布理论公式  $P(N) = \frac{(\bar{N})^N}{N!} e^{-\bar{N}}$  和高斯分布理论公式  $P(N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(N-\bar{N})^2}{2\sigma^2}}$  (其中,  $\sigma^2 = \bar{N}$ ), 计算结果表明, 当  $\bar{N} = 4.05$  和  $\bar{N} = 11.04$  时, 实验曲线分别

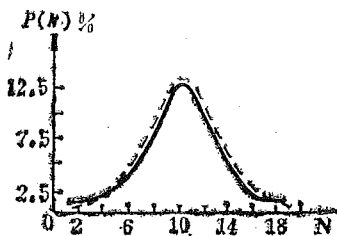


图 5 高斯分布曲线 ( $\bar{N} = 11.04$ )  
—理论曲线; ---实验曲线

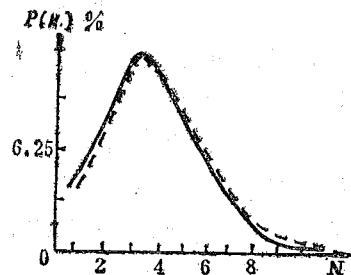


图 6 泊松分布曲线 ( $\bar{N} = 4.05$ )  
—理论曲线; ---实验曲线

和泊松分布、高斯分布理论曲线吻合，即核衰变统计分布规律分别为泊松分布和高斯分布。图7为Cs<sup>137</sup> γ能谱实验曲线，有150个实验点。曲线上出现的光电峰、背散射峰，康普顿坪区其相对位置与理论值吻合。通常用Cs<sup>137</sup>作为标准源，用来检验γ谱仪的能量分辨率，作为粒子能量测量的相对标准。实验测得γ谱仪能量分辨率 =  $\frac{\text{光电峰半高宽}\Delta V}{\text{光电峰处脉冲幅度}} \times 100\%$

$$= \frac{3.4}{4.3} \times 100\% \approx 7.9\%.$$

图8各点定数值  $N = 2500$ ，计数相对误差  $\epsilon < 2\%$ 。β吸收方程为  $I = I_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} x}$ 。其中  $I_0$  为β射线的初始强度， $I$  为β射线通过厚度  $d$  的吸收体后的强度， $\rho$ ， $\mu$  分别为物质密度及其对β射线的吸收系数， $x = d\rho$  为质量厚度。因此  $\ln \frac{I}{I_0} = \left(-\frac{\mu}{\rho}\right) x$ 。实验中，改变吸收层的质量

厚度  $x$ ，测量与之对应的强度  $I$ ，用半对数坐标作  $\ln \frac{I}{I_0}$  与  $x$  的关系曲线。由于Sr<sup>90</sup>—Y<sup>90</sup>在β衰变时放出两种能量相差较大的β射线。其中Sr<sup>90</sup>，Y<sup>90</sup>衰变时放出的β射线的最大能量  $E_{max}$  分别为0.531MeV，2.27MeV。因此实验曲线为这两种能量β射线的总吸收曲

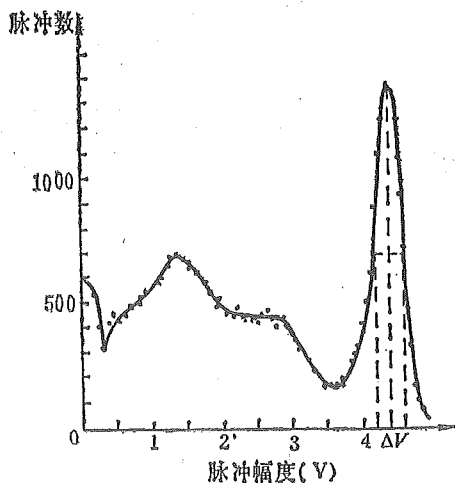


图7 Cs<sup>137</sup> γ能谱实验曲线

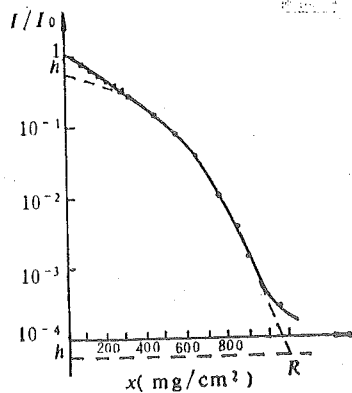


图8 铝对Sr<sup>90</sup>—Y<sup>90</sup> β射线的吸收曲线

线，曲线上有一明显转折点。曲线前部外推到  $x = 0$  处，可得Y<sup>90</sup>未经吸收的强度  $I_0'$ ，由图可知  $\ln \left(\frac{I_0'}{I_0}\right) = h$ ，可见将纵轴零点下移  $h$ ，纵轴的刻度值作相应的调整，在新坐标系下的吸收曲线即为Y<sup>90</sup>的吸收曲线，用外推法得Y<sup>90</sup>β射线在Al中的射程  $R = 1100 \text{ mg/cm}^2$ （定义强度降低到  $\frac{I}{I_0} = 10^{-4}$  时所对应的吸收层厚度  $x$  为β射线的射程  $R$ ）。对于Al吸收

体，当  $R > 0.3 \text{ g/cm}^2$  时，β射线的射程与β射线的最大能量  $E_{max}$  关系的经验公式为  $E_{max} = 1.85R + 0.245 \text{ (MeV)}$ （其中  $R$  的单位为  $\text{g/cm}^2$ ），计算得Y<sup>90</sup>β射线的  $E_{max} = 2.28 \text{ MeV}$ ，实验结果与理论规律相符。

#### 4 讨论

(1) Apple II 微机控制的核探测系统实现了核物理实验定时、定数、改变电压或阈值的自动测量。

(2) 核衰变测量的统计误差决定于测量总计数 $N$ 的多少。测量时间越长，测量次数越多，测量精度则越高。一般测量仪器，由于人工读数、记数，耗时长且无法实现重复扫描测量、累计各测量点的计数，因此限制了测量精度的提高。系统能在不改变实验仪器的情况下提高实验精度。如在核衰变统计分布规律的实验中，1000次重复测量时间为300s，而在此时间内，用定标器只能测量50次左右。又如在 $\gamma$ 能谱实验中，系统 $K$ 次重复测量的误差为一般仪器的 $\frac{1}{\sqrt{K}}$ 。

此外，对于同样的量程，系统分辨率高，因此测量精确度也高。例如，G-M计数管坪特性的测量中，对于量程为500V的0.5级电压表，各测量点的最大示值误差 $\Delta V_{\max} = 500 \times 0.5\% = 7.5V$ ，仪器的最小分度值为15V，系统的电压分度值为2.3V，因此测量精确度高于前者。

(3) 系统以Apple II微机及接口箱取代了定标器，定时值有255档，定数值为1至65535，且由计算机键盘输入选择，使用方便、灵活。定标器的定时、定数值仅分为几十档，且易损坏，难于修复。

系统同时适用于Apple II微机和TRS-80、BC3-80微机，可直接用于与放射性强度有关的生产、科研、环保、医院等部门作为放射性强度的自动测定及G-M计数管、 $\beta$ 计数管等射线计数管的自动检测，也可用作核物理教学实验设备及普通物理教学设备。将单路的核探测系统扩充为多路的研究正在进行中。

#### 参 考 文 献

- [1] 唐孝威主编，粒子物理实验方法，高等教育出版社，北京，1982：107—134，231—264，401—443。
- [2] 周明德编著，微型计算机硬件软件及其应用，清华大学出版社，北京，1984：278—301。

# The Nuclear Detector System With the Microcomputr Apple II

Huo Jianqing      Liang Weisheng

*(Centre for Fundamental Physics)*

## Abstract

The principle, method and character are described, of the nuclear detector system with microcomputer Apple II with which not only the voltage and threshold value are regulated, but also timed and counted measurement are performed in nuclear physics experiments. This system replaces scaler, which is often used in the experiments and raises their accuracy

**Key words:** nuclear detection, timed, counting rate, threshold value.







# 中国科学技术大学学报编委会

主 编: 龚 昇

编 委: (按姓氏笔划排序)

冯克勤 伍小平 刘耀阳

汪克林 张懋森 钱景仁

杨延龄

责任编辑: 袁克林 杨延龄

英文编辑: 王 琳

## 中 国 科 学 技 术 大 学 学 报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(季刊)

(Quarterly)

第 20 卷 第 3 期 (总第 69 期)

Vol.20 No.3 1990

编辑出版: 《中国科学技术大学学报》编辑部  
(安徽省合肥市金寨路96号)

印 刷: 中国科学技术大学印刷厂

国内总发行: 合 肥 市 邮 局

订 购 处: 全 国 各 地 邮 局

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司

(中国国际书店,北京399信箱)

Edited and Published by:

The Editorial Board of

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY

OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

96 Jinzhai Road of

Hefei, Anhui, China

Distributed by:

China International Bookstore

P.O. Box 399

Beijing, China

国内统一刊号: CN34—1054

邮政代号: 26—31

1990年9月出版

邮 政 编 码: 230026

国外代号: Q527

ISSN 0253-2778

# 中国科学技术大学学报

第20卷 第4期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No.4

4

1990



THE

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY  
UNION INTERNATIONALE DE CHIMIE PURE ET APPLIQUEE

1913



1913

# 中国科学技术大学学报

第 20 卷 第 4 期 (总第 70 期)

## 目 录

一类随机线性方程组的一个极限性质	.....	缪柏其	(387)
具 Hirota 形式的 $u_{,t} - u_{,xx} + V(u) = 0$ 型方程	.....	曾云波	(398)
群环的代数结构	.....	杨同海	(405)
与 Schrödinger 系统相关联的 lax 代数	.....	张作顺 程 艺	(412)
最大值原理在地块价格评价中的应用	.....	杨孝先	(417)
载流等离子体中的静磁 Vortex	.....	陈银华	(423)
因子分析—光度法测定芳香类化合物	.....	夏四清等	(428)
一种多输入多输出时间域模态分析方法的参数研究	.....	张培强 高进民	(437)
内孔挤压强化板的弹塑性分析	.....	王朝蜀	(448)
VQGIS——一种用于 KGIS 的图示查询语言	.....	吴健康 陈学俭	(454)
找 K 个最小生成树的并行算法	.....	唐策善 梁维发	(464)
铯钠镱和其他金属与固体氮功函数的测量和研究	.....	徐彭寿 S. L. Qiu, M. Strongin	(472)
草鱼和团头鲂的核型及其 C 带带型的研究	.....	杨慧一	(478)
<b>研 究 简 报</b>			
Marchenko 方程的递推算法	.....	薛兴恒 张韵华	(486)
非晶合金在电流退火下的感生各向异性	.....	何正明 姜永君	(491)
[Ni(OH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (en)][SO <sub>4</sub> ] <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O 晶体的电子吸收谱的测定和理论诠释	.....	李健民 潘国强 王力军	(496)
应用原子极化半径法对 CH <sub>4</sub> , SiH <sub>4</sub> , GeH <sub>4</sub> 的 $\chi_a$ 方法研究	.....	刘 卫 李俊清 辛厚文	(500)
裂纹问题的一种边界元解	.....	吕 品	(506)
谐振传输网络的迭代分析法	.....	葛 云 仝茂达	(514)
生物分子和药物分子中基团电负性的研究	.....	吴汉卿	(517)
<sup>60</sup> Co- $\gamma$ 辐射制备载体型多孔聚合物气相色谱固定相	.....	查刘生 陈文明 吴守生	(525)

# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No.4 (Sum No.70)

## CONTENTS

- A Limiting Property on a Kind of Large System of Random  
Linear Equations.....Miao Baiqi (387)
- The Equations  $u_{,t} - u_{,xx} + V(u) = 0$  With Hirota Form.....Zeng Yunbo (398)
- On the Algebraic Structure of Group Rings ..... Yang Tonghai (405)
- Lax Algebra Related to the KDV System  
..... Zhang Zuoshun, Cheng Yi (412)
- Maximum Principle Application in Evaluation of Land Value  
.....Yang Xiaoxian (417)
- The Magnetostatic Vortex in Current-Carrying Plasmas.....Chen Yinhua (423)
- Simultaneous Determination of Mixture System of Aromatic  
Compounds by Target Factor Analysis-Spectrophotometry  
.....Xia Siqing *et al.* (428)
- A Parametric Study on Modal Analysis Algorithm With Multiple-  
Single Input and Multi-Output Space-Time Regression  
Method.....Zhang Peiqiang, Gao Jinmin (437)
- An Elasto-Plastic Analysis of Cold Expansion at Fastener  
Holes .....Wang Chaozhu (448)
- VQGIS-a Visual Query Language For KGIS  
.....Wu Jiankang, Chen Xuequan (454)
- A Parallel Algorithm for Finding  $K$  Minimum Spanning  
Trees..... Tang Ceshan, Liang Weifa (464)
- Work Function Measurement and Studies of Cs, Na, Yb and  
Other Metals With Solid Ammonia  
.....Xu Pengshou, S. L. Qiu, M. Strongin (472)
- Studies on the Karyotypes and C-banding Patterns of Grass Carp  
(*Ctenopharyngodon idella*) and Blunt Snout Bream

(*Megalobrama Amblycephala*)..... Yang Huiyi (478)

### Research Notes

- The Inversion Algorithm of Marchenko Equation  
.....Xue Xingheng, Zhang Yunhua (486)
- A New Annealing Method of Amorphous Alloys  
.....He Zhengming, Jiang Yongjun (491)
- Experimental Study and Theoretical Interpretation of Electronic  
Absorption Spectrum of  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  Crystal  
.....Li Jianmin, Pan Guoqiang, Wang Lijun (496)
- $X_\alpha$  Method Study on  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$  and  $\text{GeH}_4$  With the Polarized  
Radii.....Liu Wei, Li Junqing, Xin Houwen (500)
- A Boundary Element Solution for the Crack Problems  
.....Lu Pin (506)
- Iterative Analysis of Resonant Transmission Networks  
.....Ge Yun, Tong Maoda (514)
- The Study of Group Electronegativities in Biologic  
and Drug Molecules..... Wu Hanqing (517)
- The Preparation of Support-Porous Polymer as Gas Chromatography  
Stationary Phase by  $^{60}\text{Co}$ - $\gamma$  Radiation  
..... Zha Liusheng, Chen Wenming, Wu Ningsheng (525)

(000) ... ..

(001) ... ..

(002) ... ..

(003) ... ..

(004) ... ..

(005) ... ..

(006) ... ..

(007) ... ..

(008) ... ..

(009) ... ..

(010) ... ..

(011) ... ..

(012) ... ..

(013) ... ..



# 一类随机线性方程组的一个极限性质\*

缪柏其

(数学系)

## 摘 要

考虑了一类形如  $X_n = V_n + n^{-1}W_n X_n$  的随机线性方程组解的极限性质问题, 其中  $W_n$  是  $n$  阶随机矩阵, 它的元为独立同分布随机变量,  $X_n$  和  $V_n$  为  $n$  维列向量. 证明了若系数随机矩阵元的  $1+p$  阶矩存在, 则当  $n$  趋于无穷时, 随机线性方程组的解是强相合的.

**关键词:** 随机矩阵, 图, 大数法则, 鞅.

**中国法分类号:** O211.4

**AMS:** 60F15

## 1 引言

考虑随机线性方程组

$$X_n = V_n + \frac{1}{n}W_n X_n \quad (1)$$

这儿  $X_n = (x_{n1}, \dots, x_{nn})^T$ ,  $W_n = (w_{ij})_{n \times n}$ ,  $\{w_{ij}\}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots$  为一列 iid. 随机变量序列且  $Ew_{ij} = 0$ ;  $V_n = (a_1, \dots, a_n)^T$ ,  $\{a_n\}$ ,  $n = 1, 2, \dots$  为一列常数序列. 这类方程组在一些物理大系统中起着十分重要的作用<sup>[2,3]</sup>. Geman 和 Hwang 首先在  $Ew_{ij}^2$  存在的条件下证明了解的存在性及其极限性质<sup>[2]</sup>, 白志东随后在二阶矩存在的条件下证得了比[2]中更强的结论<sup>[1]</sup>. 最近, 作者进一步研究了这一问题, 得到如下结果

**定理 1** 若  $I_n - \frac{W_n}{n}$  非奇异, 则  $X_n$  由 (1) 所确定, 否则令  $X_n = 0$ . 设  $Ew_{11} = 0$ ,

$E|w_{11}|^{1+r} < \infty$ ,  $0 < r \leq 1$  及  $\sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 < \infty$ , 则

1989年9月22日收到.

\*国家自然科学基金资助课题.

$$\sum_{i=1}^n (x_{n,i} - \alpha_i) \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty).$$

**定理 2** 设  $r \in (1/2, 1]$ ,  $Ew_{11} = 0$ ,  $Ew_{11}^2 \triangleq \sigma^2 < \infty$  及  $\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^2 < \infty$ . 当  $I_n = n^{-r} W_n$  非奇异时,  $X_n$  由如下随机线性方程组确定

$$X_n = V_n + n^{-r} W_n X_n \quad (2)$$

否则令  $X_n = 0$ , 则我们有

$$\sum_{i=1}^n (x_{n,i} - \alpha_i)^2 \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty).$$

## 2 几个引理

设图由顶点  $l_1, \dots, l_m, l_1$  依次相连所组成, 以  $A$  表示图中边的全体.  $l_1$  称为起点,  $l_i, l_{i+1}$  称为有向边, 故  $l_i, l_{i+1} \asymp l_{i+1}, l_i$ . 如果有  $i$ , 使  $l_{i+1} = l_i$ , 则称  $l_i, l_{i+1}$  是  $A$  中的退化边. 记  $l_{m+1} = l_1$ , 我们称  $l_c, l_{c+1}$  是  $A$  中的 1-重边, 如果对一切  $l_{c-1}, l_c$  ( $1 < c \leq m+1, c-1 \asymp a$ ),  $l_c, l_{c+1} \asymp l_{c-1}, l_c$ . 如果边  $l_c, l_{c+1}$  在  $A$  中重复出现  $k$  次, 则称为  $A$  中的  $k$ -重边.

如果以  $l$  为端点的边都是 1-重的, 则  $l$  称为单顶点. 以  $F_1$  记图中所有 1-重顶点,  $\#F_1 \triangleq \alpha_1$ , 这儿  $\#$  表示集合  $F_1$  中元素个数. 顶点  $l$  称为是  $k$ -重的, 如果以  $l$  为端点的边至少是  $k$ -重的. 以  $G$  记图中所有 2-重以上顶点的全体.  $\#G \triangleq \beta$ . 如果以  $l$  为端点的边中至少有一条是 1-重的及至少有一条是 2-重以上的, 则  $l$  称为混合顶点, 以  $F_2$  记混合顶点的全体,  $\#F_2 \triangleq \alpha_2$ . 记  $F = F_1 \cup F_2$ . 显然  $\#F = \alpha_1 + \alpha_2 \triangleq \alpha$ . 以下我们在  $Ew_{11}^2 < \infty$  条件下证明几条引理.

**引理 1** 设  $l_1, \dots, l_p$  是图中不同的顶点, 记

$$W_B = w_{l_1, l_1} w_{l_1, l_2} w_{l_2, l_2} \dots w_{l_{2j-1}, l_{2j}}$$

其中  $\{l_1, \dots, l_{2j}\} = \{l_1, \dots, l_p\}$ , 且  $l_{i, 2j-1}, l_{i, 2j} \asymp l_{i, 2k-1}, l_{i, 2k}$ , 若  $j \asymp k$ . 即  $W_B$  右边  $w$  的下标是不同的边, 这些边的顶点全体为  $\{l_1, \dots, l_p\}$  则对任意正数  $\delta > 1/2$ , 我们有

$$\max_{1 \leq l_1, \dots, l_p \leq n} n^{-\delta p} |W_B| \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty).$$

**证** 因为  $j \asymp k$  时  $l_{i, 2j-1}, l_{i, 2j} \asymp l_{i, 2k-1}, l_{i, 2k}$ , 故  $W_B$  是一串 iid. 随机变量的乘积, 由  $Ew_{11}^2 < \infty$ , 有  $EW_B^2 < \infty$ , 故对  $\forall \varepsilon > 0$ ,

$$\begin{aligned} & P(\limsup_{n \rightarrow \infty} \max_{1 \leq l_1, \dots, l_p \leq n} |W_B| \geq \varepsilon n^{\delta p}) \\ & \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=t}^{\infty} P\left(\bigcup_{2^{k-1} \leq n < 2^k} \bigcup_{l_1=1}^n \dots \bigcup_{l_p=1}^n |W_B| \geq \varepsilon 2^{(k-1)\delta p}\right) \\ & \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=t}^{\infty} 2^{k p} P(|W_B| \geq \varepsilon 2^{(k-1)\delta p}) \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=t}^{\infty} (2^{k p} / \varepsilon^2 2^{2(k-1)\delta p}) EW_B^2 = 0. \end{aligned}$$

故引理 1 成立.

记 
$$W_A(l_1) = w_{l_1 l_2} w_{l_2 l_3} \cdots w_{l_m l_1} \quad (3)$$

$$W_A(l_1, l_{m+1}) = w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}}$$

设  $W_A(1)$  有  $\alpha + \beta$  个不同的顶点, 其中  $\alpha_1 = \#F_1$ ,  $\alpha_2 = \#F_2$  及  $\beta = \#G$ . 不失一般性, 可设  $F_1 = \{l_1, \dots, l_{\alpha_1}\}$ ,  $l_1 = 1$ ,  $F_2 = \{l_{\alpha_1+1}, \dots, l_{\alpha}\}$ ,  $G = \{l_{\alpha+1}, \dots, l_{\alpha+\beta}\}$ . 进一步把  $W_A(1)$  右边相同边归并后可写为

$$W_A(1) = w_{1 v_1} w_{v_1 v_2}^{m_1} \cdots w_{v_{2s-1} v_{2s}}^{m_s} w_{v_{2s} 1} \quad (4)$$

其中  $\{v_1, \dots, v_{2s}\} = \{l_1, \dots, l_{\alpha+\beta}\}$ . 令  $W_{A_1}(1)$  表示  $W_A(1)$  中以 1-重边为下标的  $w$  的乘积, 即

$$W_{A_1}(1) = w_{1 v_1} w_{v_1 v_2}^{\gamma_1} \cdots w_{v_{2s-1} v_{2s}}^{\gamma_s} w_{v_{2s} 1} \quad (5)$$

其中

$$\gamma_k = \begin{cases} 1 & \text{若 } m_k = 1 \\ 0 & \text{若 } m_k > 1. \end{cases}$$

以  $A_1$  表示  $A$  中 1-重边全体,  $A_2$  表示  $A$  中 2-重及 2 重以上边的全体, 则  $A_2$  中边的顶点在  $F_2 \cup G$  中. 令

$$W_{A_2} = w_{v_1 v_2}^{\eta_1} w_{v_3 v_4}^{\eta_2} \cdots w_{v_{2s-1} v_{2s}}^{\eta_s} = \prod_{v_{2i-1} v_{2i} \in A_2} w_{v_{2i-1} v_{2i}}^2 \quad (6)$$

这儿

$$\eta_k = \begin{cases} 2 & m_k \geq 2 \\ 0 & m_k < 2. \end{cases}$$

设  $G_1 \subset G$ ,

$$A_2 G_1 = \{v_{2i-1} v_{2i} : v_{2i-1} v_{2i} \in A_2 \text{ 且 } v_{2i-1} \text{ 及 } v_{2i} \in F_2 \cup G_1\}$$

$$W_{A_2 G_1} = \prod_{v_{2i-1} v_{2i} \in A_2 G_1} w_{v_{2i-1} v_{2i}}^2 \quad (7)$$

$W_{A_2 G_2}$  由下式定义:

$$W_{A_2} = W_{A_2 G_1} W_{A_2 G_2} \quad (8)$$

以  $A_3$  表示图中 3-重及 3 重以上边的全体,  $W_{A_3}$  由下式定义:

$$W_A(1) = W_{A_1}(1) W_{A_2} W_{A_3} \quad (9)$$

例如  $W_A(1) = w_{12} w_{24}^2 w_{45}^3 w_{53}^2 w_{36}^4 w_{63}^2 w_{62} w_{54} w_{61}$ , 则

$$W_{A_1}(1) = w_{12} w_{62} w_{54} w_{61}, \quad W_{A_2} = w_{24}^2 w_{45}^2 w_{53}^2 w_{36}^2 w_{63}^2, \quad W_{A_3} = w_{45} w_{36}^2.$$

引理 2 任给  $\delta > 1/2$  及  $\varepsilon > 0$ , 我们有

$$\max_{F_2 \cup G_1} |W_{A_2 G_1}| \leq \varepsilon n^{2\delta(\alpha_2 + \beta')}, \text{ a. s. } (n \rightarrow \infty), \quad (10)$$

$$\max_{F_2 \cup G} |W_{A_3}| \leq \varepsilon n^{\delta(m - \alpha_1 - 2(\alpha_2 + \beta))}, \text{ a. s. } (n \rightarrow \infty), \quad (11)$$

其中  $\beta' = \#G_1$ ,  $\max_{F_2 \cup G_1}$  和  $\max_{F_2 \cup G}$  表示  $(F_2 \cup G_1)$  及  $(F_2 \cup G)$  中顶点分别在 2 到  $n$  变化时的最

大值。以下形如  $\sum_F$ ,  $\sum_{F_2 \cup G}$  等, 如果没有具体求和范围, 均表示  $F$  或  $F_2 \cup F$  中顶点在 2 与  $n$  中变化。

证 以  $a_{ij}$  表示以  $l_i$  为起点的  $j$ -重边的条数,  $b_{ij}$  表示以  $l_i$  为终点的  $j$ -重边条数, 则  $l_1, \dots, l_{\alpha+\beta}$  可表为如下形式

$$l_i = (a_{i1}, b_{i1}, a_{i2}, b_{i2}, \dots, a_{im}, b_{im}), i = 1, \dots, \alpha + \beta$$

由  $a_{ij}, b_{ij}$  定义可得

$$\sum_{i=1}^{\alpha+\beta} a_{ij} = \sum_{i=1}^{\alpha+\beta} b_{ij}, \text{ 对一切 } j, 1 \leq j \leq m \quad (12)$$

$$\sum_{j=1}^m j a_{ij} = \sum_{j=1}^m j b_{ij}, \text{ 对一切 } i, 1 \leq i \leq \alpha + \beta \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^{\alpha+\beta} \sum_{j=1}^m j a_{ij} = \sum_{i=1}^{\alpha+\beta} \sum_{j=1}^m j b_{ij} = m \quad (14)$$

由于  $W_{A_2}$  中边的顶点属于  $F_2 \cup G$ , 故由  $W_{A_2, G_1}$  的定义及引理 1 立得 (10) 式。下面证 (11) 式。

$$A_3 \text{ 中总边数为 } \sum_{i=\alpha_1+1}^{\alpha+\beta} \sum_{j=3}^m (j-2)a_{ij} = \sum_{i=\alpha_1+1}^{\alpha+\beta} \sum_{j=3}^m (j-2)b_{ij}. \text{ 在 } A_3 \text{ 中由不相重叠的边所}$$

构成的  $A_3$  的子集称为一个 Cluster, 则  $A_3$  一定可分解为若干个 Cluster 的并:  $A_3 =$

$\sum_{k=1}^q A_{3k}$ . 这儿  $A_{3k}$  为 Cluster,  $q$  为个数。其中必有一种分法, 使  $A_3$  由最少个数的 Cluster

构成。例如  $W_{A_3} = w_{23} w_{34} w_{45}^2 w_{78} w_{89} w_{910}^4$ , 则  $W_{A_3}$  可分为 4 个 Cluster:

$$\begin{aligned} W_{A_{31}} &= w_{23} w_{34} w_{45} w_{78} w_{89} w_{910} & W_{A_{32}} &= w_{34} w_{45} w_{910} \\ W_{A_{33}} &= w_{34} w_{910} & W_{A_{34}} &= w_{910} \end{aligned}$$

以上每个 Cluster 中边不重复。设顶点  $l_i$  是  $A_3$  中的一个顶点, 按上述方法,  $l_i$  最多在  $\max\{j: a_{ij} + b_{ij} > 0\} - 2$  个 Cluster 中出现, 由引理 1, 对  $\forall \varepsilon > 0$ ,

$$\max_{F_2 \cup G} |W_{A_{3k}}| \leq \varepsilon n^{\delta(\#A_{3k})} \quad \text{a.s. } (n \rightarrow \infty)$$

故

$$\max_{F_2 \cup G} |W_{A_3}| \leq \prod_{k=1}^q \max_{F_2 \cup G} |W_{A_{3k}}| \leq \varepsilon n^{\delta \cdot \sum_{k=1}^q \#(A_{3k})} \triangleq \varepsilon n^{\delta s}, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)$$

这儿  $s = \sum_{i=\alpha_1+1}^{\alpha+\beta} [\max\{j: a_{ij} + b_{ij} > 0\} - 2]$ . 但

$$\max\{j: a_{ij} + b_{ij} > 0\} - 2 \leq \max\left\{\sum_{j=3}^m (j-2)a_{ij}, \sum_{j=3}^m (j-2)b_{ij}\right\} \quad (15)$$

$$m - \alpha_1 - 2(\alpha_2 + \beta) = \sum_{i=1}^{\alpha+\beta} \sum_{j=1}^m j a_{i,j} - \alpha_1 - 2(\alpha_2 + \beta) \geq \sum_{i=\alpha_1+1}^{\alpha+\beta} \left( \sum_{j=1}^m j a_{i,j} - 2 \right) \quad (16)$$

由  $l_i \in F_2 \cup G$  及(12)可推出(16)右边不小于(15)右边。故引理得证,

若令  $\tilde{w}_{i,j} = w_{i,j} I(|w_{i,j}| \leq n^{2\delta}) - E w_{i,j} I(|w_{i,j}| \leq n^{2\delta})$ , 其中  $\delta \in (\frac{1}{2}, r)$ , 容易验证  $\tilde{w}_{i,j}$  与  $w_{i,j}$  a.s. 尾列等价。故以下不妨假定对一切  $w_{i,j}$  均满足  $|w_{i,j}| \leq 2n^{2\delta}$ 。

**引理 3** 存在仅与  $m$  有关的常数  $M$ , 使

$$E \left( \sum_{2 \leq l_1, \dots, l_m \leq n} W_A(1) \right)^2 \leq M \cdot n^{\alpha-1} E \left( \sum_G W_A(1) \right)^2 \quad (17)$$

**证** 设  $F = \{1, l_{i_2}, \dots, l_{i_\alpha}\}$  为  $A$  中 1-重边中顶点全体。把  $l_{i_k} \in F$  换成  $l'_{i_k}$  后构成的图的边集全体记为  $A'$ ,  $F' \triangleq \{1, l'_{i_2}, \dots, l'_{i_\alpha}\}$ ,  $W_A(1)$  等符号与前面引理相同。

如果  $F \cap F' \neq F$ , 则存在  $l_{i_k} \in F \cap F'$  及  $l'_{i_j} \in F' \cap F$ , 这儿“ $c$ ”表示余集运算。这时  $A_1$  与  $A'_1$  不能重合, 故  $W_A(1)$  与  $W_{A'}(1)$  正交。

当  $F \cap F' = F$  时,  $A_1$  与  $A'_1$  能相互重合的不同数目最多有  $(\alpha-1)!$  个, 故

$$\begin{aligned} E \left( \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} W_A(1) \right)^2 &= E \sum_{F \cup F'} \sum_{G \cup G'} W_A(1) W_{A'}(1) \\ &\leq (\alpha-1)! n^{\alpha-1} E \sum_{G \cup G'} W_{A_1}^2(1) (W_{A_2} W_{A_3}) (W_{A'_2} W_{A'_3}) \\ &= (\alpha-1)! n^{\alpha-1} E \left( \sum_G W_{A_1}(1) W_{A_2} W_{A_3} \right)^2 = (\alpha-1)! n^{\alpha-1} E \left( \sum_G W_A(1) \right)^2 \end{aligned}$$

设  $G_1 \subset G$ ,  $\#G_1 = \beta'$ , 及

$$\bar{W}_{A_2}(n) = W_{A_2} I(\max_{F_2 \cup G_1} |W_{A_2, G_1}| \leq \varepsilon n^{2\delta(\alpha_2 + \beta')}, \forall G_1 \subset G) \quad (18)$$

注意这儿示性函数中是  $2^{\beta}$  个集合之交。

$$\bar{W}_{A_3}(n) = W_{A_3} I(\max_{F_2 \cup G} |W_{A_3}| \leq \varepsilon n^{\delta(m - \alpha_1 - 2(\alpha_2 + \beta))}) \quad (19)$$

$$\bar{W}_{A_n}(1) = W_{A_1}(1) \bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A_3}(n) \quad (20)$$

设  $l_2, \dots, l_{m+1} \neq l_1$ , 令

$$U_A(l_1, l_{m+1}) = W_A(l_1, l_{m+1}) \circ \alpha_{l_{m+1}} = w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}} \alpha_{l_{m+1}} \quad (21)$$

以下不失一般性可设  $W_A(1)$  和  $U_A(1, l_{m+1})$  有  $\alpha + \beta$  个不同顶点,

$$F = \{1, l_2, \dots, l_2\}, G = \{l_{\alpha+1}, \dots, l_{\alpha+\beta}\}$$

令  $\bar{U}_{A_n}(1, l_q) = W_{A_1}(1, l_q) \bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A_3}(n) \alpha_{l_q}$ , 其中  $A_1, A_2, A_3$ , 分别是图中 1-重边, 2-重边及 3-重边或 3-重以上边的全体。

$$S_i(n) = \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq i} \bar{W}_{A_n}(1) \quad (22)$$

$$Y_i(n) = S_i(n) - S_{i-1}(n) \quad (23)$$

$$H_i(n) = \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq i} \bar{U}_{A_n}(1, l_q) \quad (24)$$

$$Z_i(n) = H_i(n) - H_{i-1}(n) \quad (25)$$

引理 4 设  $2 \leq i < j \leq n$ , 则存在仅与  $m$  有关的常数  $C$ , 使

$$|EY_i Y_j| \leq C \cdot i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta-1)} \quad (26)$$

$$EY_i^2 \leq C \cdot i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta)} \quad (27)$$

$$E|Z_i Z_j| \leq \begin{cases} C(i^{\alpha+\beta-3} + i^{\alpha+\beta-2} \alpha_i^2) n^{2\delta(m-\alpha-\beta)} & \text{若 } l_q \in F \\ C i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta-1)} & \text{若 } l_q \in G \end{cases} \quad (28)$$

$$EZ_i^2 \leq C(i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta)} + i^{\alpha+\beta-2} \alpha_i^2 n^{2\delta(m+1-\alpha-\beta)}) \quad (29)$$

这儿  $Y_i \triangleq Y_i(n)$ ,  $Z_i \triangleq Z_i(n)$ .

证: 设  $2 \leq i < j \leq n$ .

$$\begin{aligned} EY_i Y_j &= E\Sigma^{(1)} \Sigma^{(3)} + E\Sigma^{(1)} \Sigma^{(4)} + E\Sigma^{(2)} \Sigma^{(3)} + E\Sigma^{(2)} \Sigma^{(4)} \\ &\triangleq I_1 + I_2 + I_3 + I_4 \end{aligned} \quad (30)$$

其中

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)} &= \sum_{\substack{F \cup G \\ F \text{ 中至少一个顶点为 } i, \text{ 其余 } \leq i}} \bar{W}_{A_n}(1) & \Sigma^{(2)} &= \sum_{\substack{F \cup G \\ G \text{ 中至少一个顶点为 } i, \text{ 其余 } \leq i}} W_{A_n}(1) \\ \Sigma^{(3)} &= \sum_{\substack{F' \cup G' \\ F' \text{ 中至少一个顶点为 } j, \text{ 其余 } \leq j}} \bar{W}_{A_n}(1) & \Sigma^{(4)} &= \sum_{\substack{F' \cup G' \\ G' \text{ 中至少一个顶点为 } j, \text{ 其余 } \leq j}} \bar{W}_{A'_n}(1) \end{aligned}$$

由于  $j > i$ , 在  $I_1$  和  $I_3$  中,  $F'$  中有一个顶点为  $j$ , 故  $A'_1$  与  $A_1$  不相重叠, 因而  $\bar{W}_{A_n}(1)$  与  $\bar{W}_{A'_n}(1)$  正交, 即

$$I_1 = I_3 = 0 \quad (31)$$

现在考虑  $I_2$ . 由引理 2 及 3, 注意到  $F$  中有一个顶点为  $i$ , 我们有

$$|I_2| \leq C i^{\alpha-2} n^{2\delta(m-\alpha-2(\alpha_2+\beta))} \sum_{G: G \text{ 中顶点 } \leq i} \sum_{\substack{G', G' \text{ 中至少有一个顶点为 } j, \text{ 其余 } \leq j}} E|\bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A'_n}(n)|$$

设  $G' = \{l'_{\alpha+1}, \dots, l'_{\alpha+\beta}\}$ , 不失一般性设  $l'_{\alpha+1} = j$ , 及  $G'$  中有  $k$  个大于  $i$  的顶点, 则  $G_1 \triangleq G \cap G'$  中最多有  $\beta - k$  顶点. 设  $\#G_1 = \beta - k$ , 由  $G \cup G' = G \cup (G' - G_1)$  及引理 2

$$\begin{aligned} E|\bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A'_n}(n)| &= E|\bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A'_2 c_1}(n) \bar{W}_{A'_2 c_2}(n)| \\ &\leq C n^{2\delta(\alpha_2+\beta-k)} E|\bar{W}_{A_2}(n) \bar{W}_{A'_2 c_2}(n)| \leq C n^{2\delta(\alpha_2+\beta-k)} \end{aligned}$$

由于  $\sum_{G \cup G'}$  中关于  $G$  中顶点求和范围是从 2 到  $i$ ,  $G' - G_1$  中顶点求和范围从  $i+1$  到  $j$ , 再注

意到  $l'_{\alpha+1} = j$ , 故在  $\sum_{G' - G_1}$  中实际求和号只有  $(k-1)$  重. 又当  $\#G_1 < \beta - k$  时, 其和不改变

在  $G_i = \beta - k$  时所得和的阶, 故

$$\begin{aligned} |I_2| &\leq C i^{\alpha-2} n^{2\delta(m-a_1-2(\alpha_2+\beta))+2\delta(\alpha_2+\beta-k)} \cdot i^\beta (j-i)^{k-1} \\ &= C i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-a_1-(\alpha_2+\beta))-2\delta k} (j-i)^{k-1} \leq C i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta-1)} \end{aligned} \quad (32)$$

同理可证

$$|I_4| \leq C i^{\alpha+\beta-2} n^{2\delta(m-\alpha-\beta-1)} \quad (33)$$

由 (31) — (33) 即得 (26), 同理可得 (27)。

(28) 和 (29) 两式的证明类似于 (26) 和 (27) 式的证明, 只要注意到  $l_q \in F$  及  $l_q = i$  时关于  $F$  中顶点求和不超过  $i^{\alpha-2} \alpha_i^2$ , 如果  $l_q \neq i$  或  $l_q \in G$ , 由  $\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j^2 < \infty$  可知, 在  $EZ_i Z_j$  展

开式估计中相当于 (26) 式中关于  $EY_i Y_j$  展开式估计中的求和号少一重。

**引理 5** 存在仅与  $m$  有关常数  $C$ , 使

$$E \left( \max_{n \leq 2^k} \left( \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq n} W_{A(k)}(1) \right)^2 \right) \leq C(k+1)^2 2^{2\delta(m-1)k} \quad (34)$$

$$E \left( \max_{n \leq 2^k} \left( \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq n} \bar{U}_{A(k)}(1, l_q) \right)^2 \right) \leq C(k+1)^2 2^{2\delta(m-1)k} \quad (35)$$

这儿  $A(k) = A_2 k$ 。此定理的证明类似于 Stout[4] 中定理 2.3.1 的证明, 故这儿从略。

**引理 6**  $\forall \delta > 1/2$ ,

$$n^{-m\delta} \max_{1 \leq l_1 \leq n} \left| \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_1} \right| \rightarrow 0, \text{ a. s. } (n \rightarrow \infty), \quad (36)$$

$$n^{-(m+1)\delta} \max_{1 \leq l_1, l_{m+1} \leq n} \left| \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}} \right| \rightarrow 0, \text{ a. s. } (n \rightarrow \infty) \quad (37)$$

**证** 这两式证明类似, 故仅证 (36)。

在  $w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_1}$  中, 若有  $p, 2 \leq p \leq m$ , 使  $l_p = l_1$ , 则

$$\begin{aligned} &n^{-m\delta} \max_{1 \leq l_1 \leq n} \left| \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_1} \right| \\ &\leq n^{-(p-1)\delta} \max_{1 \leq l_1 \leq n} \left| \sum_{2 \leq l_1, \dots, l_{p-1} \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_{p-1} l_1} \right| \\ &\quad \cdot n^{-(m-p+1)\delta} \max_{1 \leq l_1 \leq n} \left| \sum_{2 \leq l_{p+1}, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_{p+1}} \cdots w_{l_m l_1} \right| \end{aligned}$$

由归纳法可证得 (36) 成立。故以下不妨设  $l_2, \dots, l_m$  均不等于  $l_1$ 。设

$$\sum_{2 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_1} = \sum w_{l_1 \nu_1} w_{\nu_1 \nu_2}^{m_1} \cdots w_{\nu_{2s-1} \nu_{2s}}^{m_s} w_{\nu_{2s} l_1} \triangleq \sum W_A(l_1) \quad (38)$$

设  $F_1, F_2, F$  及  $G$  如第二节所定义。由引理 1 和 2 知  $P(W_A(l_1) \neq \bar{W}_A(n)(l_1), \text{i.o.}) = 0$ , 故由引理 5 及 Чебышев 不等式, 我们有

$$\begin{aligned}
& P\left(\limsup_{n \rightarrow \infty} \max_{1 \leq l_1 < n} \left| \sum_{F-(l_1)} W_A(l_1) \right| \geq \varepsilon n^{m\delta}\right) \\
& \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=t}^{\infty} 2^k P\left(\max_{n \leq 2^k} \left| \sum_{F-(l_1)} \bar{W}_A(k)(1) \right| \geq \varepsilon \cdot 2^{(k-1)m\delta}\right) \\
& \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=t}^{\infty} C \cdot 2^k \cdot (k+1)^2 2^{2\delta(m-1)k} / \varepsilon^2 \cdot 2^{2(k-1)m\delta} = 0
\end{aligned}$$

由于  $\sum_{l_2, \dots, l_m} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_1}$  是有限个 (与  $m$  有关) 形如 (38) 的线性组合, 故引理成立.

**引理 7** 设  $\lambda_M(n, r)$  是  $n^{-r}W_n$  的最大模特征根, 则当  $m \geq [8/(2r-1)] + 1$  时,

$$|\lambda_M(n, r)| \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)$$

$$\|(n^{-r}W_n)^m\| \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)$$

这儿  $[ \cdot ]$  表示整数部分及  $\| \cdot \|$  表示矩阵的欧氏模.

**证.** 由于  $(n^{-r}W_n)^m$  的  $(i, j)$  元是  $n^{-mr} \sum_{l_2, \dots, l_m} w_{i l_2} \cdots w_{l_m l_1}$ , 由引理 5, 令

$$\delta = (r + 1/2)/2, \quad m = [8/(2r-1)] + 1, \text{ 则 } m(r-\delta) > 2$$

$$\begin{aligned}
|\lambda_M(n, r)|^m & \leq n^{1-mr} \max_{1 \leq l_1, l_{m+1} \leq n} \left| \sum_{1 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}} \right| \\
& = n^{(1+\delta)-m(r-\delta)-(m+1)\delta} \max_{1 \leq l_1, l_{m+1} \leq n} \left| \sum_{1 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}} \right| \\
& \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)
\end{aligned}$$

故  $|\lambda_M(n, r)| \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)$ ,

$$\begin{aligned}
\|(n^{-r}W_n)^m\|^2 & \leq n^2 \left( n^{-mr} \max_{1 \leq l_1, l_{m+1} \leq n} \left| \sum_{1 \leq l_2, \dots, l_m \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_m l_{m+1}} \right| \right)^2 \\
& \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)
\end{aligned}$$

### 3 定理的证明

#### 1° 定理 2 的证明

由引理 7, 对充分大的  $n, (I_n' - n^{-r}W_n)^{-1}$  a.s. 存在且可表为  $\sum_{k=0}^{\infty} (n^{-r}W_n)^k$ , 故由

(1) 得

$$\|X_n - V_n\| = \left\| \sum_{k=1}^{\infty} (n^{-r}W_n)^k V_n \right\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|(n^{-r}W_n)^k\| \sum_{j=1}^{m-1} \|(n^{-r}W_n)^j V_n\| \quad (39)$$

由引理 7, 只要证明  $\|(n^{-r}W_n)^j V_n\| \rightarrow 0$  a.s.  $(n \rightarrow \infty)$  即可,  $j = 1, \dots, m-1$



$j=1$ 时,

$$\|(n^{-r}W_n)V_n\|^2 = n^{-2r} \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_2=1}^n w_{l_1 l_2}^2 \alpha_{l_2}^2 + n^{-2r} \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_2 \neq l_3} w_{l_1 l_2} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_2} \alpha_{l_3} \triangleq I_1 + I_2.$$

$$I_1 = n^{-2r} \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_2=1}^n (w_{l_1 l_2}^2 - \sigma^2) \alpha_{l_2}^2 + n^{-2r} \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_2=1}^n \sigma^2 \alpha_{l_2}^2 \triangleq I_{11} + I_{12}$$

由于  $\sum_{l_2=1}^n \alpha_{l_2}^2 < \infty$ , 故  $I_{12} = n^{1-2r} \sigma^2 \sum_{l_2=1}^n \alpha_{l_2}^2 \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty)$ . 在  $I_{11}$  中, 因为  $n^{2r} I_{11}$  构成鞅,

故由鞅的 Kolmogorov 不等式有  $I_{11} \rightarrow 0, a.s. (n \rightarrow \infty)$ . 从而  $I_1 \rightarrow 0, a.s. (n \rightarrow \infty)$ . 而

$$I_2 = n^{-2r} \left( 2 \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_2 \neq l_3} w_{l_1 l_2} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_2} \alpha_{l_3} + \sum_{l_1=1}^n \sum_{l_1, l_2, l_3 \text{ 不等}} w_{l_1 l_2} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_2} \alpha_{l_3} \right) \\ \triangleq n^{-2r} (I_{21} + I_{22})$$

但  $I_{21}$  和  $I_{22}$  关于  $n$  都构成鞅, 故由鞅的 Kolmogorov 不等式及  $\sum_{l=1}^n \alpha_l^2 < \infty$ , 立得  $I_2 \rightarrow 0,$

$a.s. (n \rightarrow \infty)$ , 从而  $j=1$  时成立.

$j=2$  时,

$$I = \|(n^{-r}W_n)^2 V_n\|^2 = n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_2, l_3} w_{l_1 l_2} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_2} \alpha_{l_3} \right)^2$$

分 4 种情况讨论:

(i)  $l_2 = l_1, l_3 \neq l_1$ ; (ii)  $l_3 = l_1$ ;

(iii)  $l_2 = l_3 \neq l_1$ ; (iv)  $l_1, l_2, l_3$  两两不等.

由于讨论方法与  $j=1$  时类似, 或与 (i) 时类似, 故下面仅以 (i) 为例. 当  $l_2 = l_1, l_3 \neq l_1$  时,

$$I_1 \triangleq n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^2 \\ \leq \left\{ n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n w_{l_1 l_1}^4 n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^4 \right\}^{1/2}$$

由 Marcinkiewicz 强大数法则

$$n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n w_{l_1 l_1}^4 \rightarrow 0, a.s. (n \rightarrow \infty)$$

$$n^{-4r} \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^4 \leq n^{-4r} \max_{1 \leq l_1 \leq n} \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^2 \cdot \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^2$$

$$\leq n^{-4r} \left\{ \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{l_3 \neq l_1} w_{l_1 l_3} \alpha_{l_3} \right)^2 \right\}^2 \rightarrow 0, a.s. (n \rightarrow \infty)$$

最后一式 a.s. 趋于 0 由  $j=1$  时得到, 故  $j=2$  时成立.

下面用归纳法证明. 设  $j \leq s-1$  时  $\|(n^{-r}W_n)'V_n\| \rightarrow 0$ , a.s. ( $n \rightarrow \infty$ )  
当  $j=s$  时,

$$\|(n^{-r}W_n)'V_n\|^2 = n^{-2+r} \sum_{l_1=1}^n \left( \sum_{1 \leq l_2, \dots, l_{s+1} \leq n} w_{l_1 l_2} \cdots w_{l_s l_{s+1}} \alpha_{l_{s+1}} \right)^2$$

若有  $l_k = l_1$ , 由引理 6 及归纳假设可知结论成立, 故可设  $l_2, \dots, l_{s+1} \neq l_1$ . 但  $\sum_{l_2, \dots, l_{s+1}} w_{l_1 l_2}$

$\cdots w_{l_s l_{s+1}} \alpha_{l_{s+1}}$  是有限个 (不超过与  $m$  有关的一个常数) 形如  $\sum w_{l_1 \nu_1} w_{\nu_1 \nu_2}^{m_1} \cdots w_{\nu_{2s-1} \nu_{2s}}^{m_s} \alpha_{\nu_{2s}}$

的线性组合. 由 (4), (21) 式及引理 2, 引理 5 的 (35) 式知

$$n^{-2+r} \sum w_{l_1 \nu_1} w_{\nu_1 \nu_2}^{m_1} \cdots w_{\nu_{2s-1} \nu_{2s}}^{m_s} \alpha_{\nu_{2s}} \rightarrow 0, \text{ a.s. } (n \rightarrow \infty)$$

故  $j=s$  时  $\|(n^{-r}W_n)'V_n\|^2 \rightarrow 0$ , a.s. ( $n \rightarrow \infty$ ). 由归纳法对一切  $j, 1 \leq j \leq m-1$  均成立. 定理 2 证毕.

### 2° 定理 1 的证明

取  $\delta$ , 使  $(1+r)^{-1} < \delta < 1$ , 由于  $E|w_{11}|^{1+r} < \infty$  故用类似推导方法可知此时引理 1, 2 及 3 对  $\delta$  仍成立. 在引理 4 中, 注意到由现在情形的引理 1, 2 及 3,  $E|w_{11}|^{1+r} < \infty$ , 可得

$$\begin{aligned} & E|\bar{W}_{A_2}(n)W_{A_2}'(n)| \\ &= E|\bar{W}_{A_2}(n)\bar{W}_{A_2}'c_2(n)|^{(1+r)/2} |\bar{W}_{A_2}'c_1(n)|^{(1+r)/2} |W_{A_2}(n)W_{A_2}'(n)|^{(1-r)/2} \\ &\leq Cn^{(1+r)\delta(\alpha+\beta-k)+2\delta(1-r)(\alpha_2+\beta)} \end{aligned} \quad (40)$$

其中  $G_1 = G \cap G'$ ,  $\#G_1 = \beta - k$ , 故

$$|EY_i Y_i| \leq C i^{\alpha+\beta-2} n^{-\delta(1+r)(\alpha+\beta)} \cdot n^{2\delta(m-1)}$$

$$EY_i^2 \leq C i^{\alpha+\beta-2} n^{-\delta(1+r)(\alpha+\beta-1)} n^{2\delta(m-1)}$$

因此在  $E|w_{11}|^{1+r} < \infty$  条件下仍有

$$E\left(\max_{n \leq 2^k} \left( \sum_{2 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq n} \bar{W}_{A(k)}(1) \right)^2\right) \leq C(k+1)^{2 \cdot 2^{2k\delta(m-1)}} \quad (41)$$

同理

$$E\left(\max_{n \leq 2^k} \left( \sum_{1 \leq l_2, \dots, l_{\alpha+\beta} \leq n} \bar{U}_{A(k)}(1, l_q) \right)^2\right) \leq C(k+1)^{2 \cdot 2^{2k\delta(m-1)}} \quad (42)$$

由 (41) 知引理 7 结论仍成立, 由 (42) 知定理 1 仍成立 (用类似于定理 2 的证明).

## 参 考 文 献

- [1] Bai Z D, *Probab. Th. Rel. Fields*, **73** (1986), 539-553.
- [2] Geman S and Hwang C R, *Z. Wahrschein-Lihkeitstheor. Vew. Geb.* **60** (1982), 291-314.
- [3] Geman S, *SIAM J. Appl. Math.*, **42** (1982), 695-703.
- [4] Stout W F, *Almost Sure Convergence*, New York, Academic Press, 1974:18-20.

# A Limiting Property On A Kind Of Large System Of Random Linear Equations

Miao Baiqi

(Department of Mathematics)

### Abstract

There is presented some limit property for the solution of a kind of random linear equations, which have the form  $X_n = V_n + n^{-1} W_n X_n$ , where  $W_n$  are  $n \times n$  random matrices with i. i. d. entries and  $X_n$  and  $V_n$  are  $n$ -dimensional column vectors. It is proved that the solutions of these random linear equations are strongly consistent as  $n$  tends to infinite if the  $1+p$  order moment of each entry is finite.

**Key Words:** random matrix, graph, consistent.

# 具Hirota形式的 $u_{tt} - u_{xx} + V(u) = 0$ 型方程\*

曾云波

(数学系)

## 摘 要

本文证明了可以写成Hirota形式的 $u_{tt} - u_{xx} + V(u) = 0$ 型方程只有两大类型。由此可以得到这两种类型的已知方程的Hirota双线性方程组,并可验证其中有些方程没有二个孤立波解。

关键词: Hirota方法, 双线性方程组, 孤立子, 孤立波, Klein—Gordon方程。

中图法分类号: O175.29

AMS: 35Q

## 1 引言

如下形式的二阶偏微分方程

$$u_{tt} - u_{xx} + V(u) = 0 \quad (1)$$

在物理和力学等诸多领域中有着广泛的应用。作为(1)特例的有著名的sine—Gordon方程 $u_{tt} - u_{xx} + \sin u = 0$ ,其 $N$ 孤立子解可以用Hirota方法得到<sup>[1]</sup>。许多作者,包括Ablowitz和Kruskal等人<sup>[2]</sup>,曾用数值方法研究过当 $V(u) = u^3 - u$ 和 $V(u) = \sin u + \lambda \sin 2u$ 时(1)解的情况,指出了这些方程不能用反散射变换求解。当 $V(u)$ 是 $u$ 的指数函数的线性组合时,(1)被称为Klein—Gordon方程。Mikhailov<sup>[3]</sup>指出了当 $V(u) = e^{-2u} - e^u$ 时(1)可以用反散射变换求解(此方程在文献中又称Mikhailov方程)。当 $V(u) = e^u$ 时,(1)亦称为Liouville方程,其孤立波解已被Andreev<sup>[4]</sup>和Bos<sup>[5]</sup>等人研究过。利用Painleve'方法,Clarkson<sup>[6]</sup>等人证明了在Klein—Gordon方程中,只有sine—Gordon, Mikhailov和Liouville方程具Painleve'性质,从而判定这三个方程是可积的。总之,研究(1)方程是否可积,是否有孤立波或孤立子解,是一项有意义的工作。由于方程的可积性常和是否有孤立子解相联系,而Hirota方法是求取方程孤立子或孤立波解的有效工具。因此讨论 $V(u)$ 为何种类型函数时,(1)可以写成Hirota双线性形式的方程组<sup>[1]</sup>是有意

1989年10月5日收到。

\*中国科学院科学基金资助项目。

义的。本文证明了,使(1)可以写成 Hirota 方程组的  $V(u)$  只有两大类型。作为这两大类型的特例可以得到上面提到的几个方程。利用 Hirota 方法,进而可以对这两大类型方程求解。我们发现,其中许多方程没有孤立波解。上面所提到的有些方程,比如  $V(u) = u^3 - u$  和  $V(u) = \sin u + \lambda \sin 2u$ , 虽有单个孤立波解,但没有两个孤立波解。实际上,正是由于 Newell 等人利用数值方法不能求得这两个方程的双孤立波解,以及出于物理上的考虑他们希望找到具两个孤立波解的  $V(u)$  的一般形式,促使了本文作者用 Hirota 方法去研究(1)类型的方程。

## 2 具 Hirota 形式的两种 $V(u)$ 类型

按 Hirota 定义<sup>[1]</sup>, 首先引入以下 Hirota 算子  $D$ ,

$$D_x^m D_t^n f g = (\partial_x - \partial_{x'})^m (\partial_t - \partial_{t'})^n f(x, t) g(x', t') \Big|_{x'=x, t'=t}$$

为了将一个方程写成 Hirota 双线性形式的方程组, Hirota 考虑如下类型的函数变换

$$u = F(g/f) \quad (2)$$

在此变换下, 我们有

$$\begin{aligned} u_{,1,1} - u_{,2,2} = & \frac{1}{f^4} \{ F'(g/f) f^2 g (f_{,2,2} - f_{,1,1}) - F'(g/f) f^3 (g_{,2,2} - g_{,1,1}) \\ & + F''(g/f) f^2 (g_t^2 - g_x^2) - [F''(g/f) g^2 + 2F'(g/f) fg] (f_x^2 - f_t^2) \\ & + 2[F''(g/f) fg + F'(g/f) f^2] (f_x g_x - f_t g_t) \} \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $F'(y)$  和  $F''(y)$  分别表示  $F$  对  $y$  的一阶和二阶导数。注意到

$$D_x^2 f g = f_{,2,2} g - 2f_{,1,2} g_x + f g_{,2,2} \quad (4a)$$

$$D_t^2 f g = f_{,1,1} g - 2f_{,1,2} g_t + f g_{,1,1} \quad (4b)$$

容易验证, 利用 Hirota 算子  $D$ , (3) 可以写成

$$u_{,1,1} - u_{,2,2} = G_1 (D_x^2 - D_t^2) f \cdot g + G_2 (D_x^2 - D_t^2) f \cdot f + G_3 (D_x^2 - D_t^2) g \cdot g \quad (5)$$

其中

$$G_1 = \frac{1}{f^3} [F''(g/f) g + F'(g/f) f] \quad (6a)$$

$$G_2 = -\frac{1}{2f^4} [F''(g/f) g^2 + 2F'(g/f) fg] \quad (6b)$$

$$G_3 = -\frac{1}{2f^2} F''(g/f) \quad (6c)$$

实际上, 将(5)按(4)展开后, 和(3)比较对应项系数, 便得到上述三个方程及另外两个方程。但易于验证后两个方程和(6a)–(6c)是相容的。

根据 Hirota 方法, 为了能够从(1)导出两个 Hirota 双线性形式的方程, (5)必须归并成两项, 这就要求

$$G_3 = \varepsilon_{3,1} G_1 + \varepsilon_{3,2} G_2, \text{ 或 } G_1 = \varepsilon_{1,2} G_2 + \varepsilon_{1,3} G_3, \text{ 或 } G_2 = \varepsilon_{2,1} G_1 + \varepsilon_{2,3} G_3 \quad (7)$$

其中,  $\varepsilon_{i,j} = 0, 1, -1$ , 但  $\varepsilon_{i,j}^2 + \varepsilon_{i,k}^2 \neq 0$ 。

(i) 考虑  $G_3 = -G_2$ , 则由(6b)和(6c)立即得到

$$(f^2 + g^2) F''(g/f) + 2fg F'(g/f) = 0$$

由此解得

$$u = F(g/f) = c \operatorname{tg}^{-1} g/f \quad (8)$$

其中  $c$  是任一常数。这时，利用 (5)，(6)，归并为如下两项

$$u_{,11} - u_{,22} = \frac{c(f^2 - g^2)}{(f^2 + g^2)^2} (D_1^2 - D_2^2) f \cdot g - \frac{c f g}{(f^2 + g^2)^2} (D_1^2 - D_2^2) (f \cdot f - g \cdot g) \quad (9)$$

(8) 意味着  $V(u)$  是  $f$  和  $g$  的齐次函数。于是由 (9)，根据 Hirota 方法，为了 (1) 能分离出两个 Hirota 方程， $V(u)$  一般形式只能是

$$\begin{aligned} V(u) &= \frac{c(f^2 - g^2)}{(f^2 + g^2)^2} (\alpha_1 f^2 + \beta_1 f g + \gamma_1 g^2) - \frac{c f g}{(f^2 + g^2)^2} (\alpha_2 f^2 + \beta_2 f g + \gamma_2 g^2) \\ &= \frac{c(f^2 - g^2)}{(f^2 + g^2)^2} [\alpha_1 f^2 + (\beta_1 - \alpha_2) f g + \gamma_1 g^2] - \frac{c f g}{(f^2 + g^2)^2} [\beta_2 f g + (\gamma_2 + \alpha_2) g^2], \end{aligned}$$

故实际上只需考虑

$$V(u) = \frac{c(f^2 - g^2)}{(f^2 + g^2)^2} (\alpha_1 f^2 + \beta_1 f g + \gamma_1 g^2) - \frac{c f g}{(f^2 + g^2)^2} (\beta_2 f g + \gamma_2 g^2) \quad (10)$$

利用  $g/f = \operatorname{tg} \frac{u}{c}$ ，不难得到

$$\begin{aligned} V(u) &= \frac{c}{8} \left[ (2\alpha_1 - 2\gamma_1 - \beta_2) - 2\gamma_2 \sin \frac{2u}{c} + 4(\alpha_1 + \gamma_1) \cos \frac{2u}{c} \right. \\ &\quad \left. + (2\beta_1 + \gamma_2) \sin \frac{4u}{c} + (2\alpha_1 - 2\gamma_1 + \beta_2) \cos \frac{4u}{c} \right] \quad (11) \end{aligned}$$

由于  $f$  和  $g$  是两个任意函数，(9) 和 (10) 意味着 (1) 可分离成以下两个 Hirota 双线性形式方程

$$\begin{cases} (D_1^2 - D_2^2) f \cdot g + \alpha_1 f^2 + \beta_1 f g + \gamma_1 g^2 = 0 \\ (D_1^2 - D_2^2) (f \cdot f - g \cdot g) + \beta_2 f g + \gamma_2 g^2 = 0 \end{cases} \quad (12)$$

如果取  $G_3 = G_2$ ，完全类似地可以得到

$$u = \operatorname{cth}^{-1} g/f \quad (13)$$

$$\begin{aligned} V(u) &= \frac{c}{8} \left[ (2\alpha_1 + 2\gamma_1 + \beta_2) + 2\gamma_2 \operatorname{sh} \frac{2u}{c} + 4(\alpha_1 - \gamma_1) \operatorname{ch} \frac{2u}{c} \right. \\ &\quad \left. + (2\beta_1 - \gamma_2) \operatorname{sh} \frac{4u}{c} + (2\alpha_1 + 2\gamma_1 - \beta_2) \operatorname{ch} \frac{4u}{c} \right] \quad (14) \end{aligned}$$

相应的 Hirota 方程组为

$$\begin{cases} (D_1^2 - D_2^2) f \cdot g + \alpha_1 f^2 + \beta_1 f g + \gamma_1 g^2 = 0 \\ (D_1^2 - D_2^2) (f \cdot f + g \cdot g) + \beta_2 f g + \gamma_2 g^2 = 0 \end{cases} \quad (15)$$

实际上 (13) — (15) 可由 (8)，(11) 和 (12) 经  $g \rightarrow ig$  等变换而得到。

(ii) 取  $G_3 = -G_1 - G_2$ ，由 (6a) — (6c)，有  $(f-g)^2 F''(g/f) + 2(fg-f^2)F'(g/f) = 0$ ，由此解得

$$u = F(g/f) = \frac{g}{f-g} \quad (16)$$

利用 (6) 和 (16), (5) 变为

$$u_{,t} - u_{,xz} = \frac{cf}{(f-g)^3} (D_t^2 - D_x^2) (f \cdot g - g \cdot g) + \frac{cg}{(f-g)^3} (D_t^2 - D_x^2) (f \cdot g - f \cdot f) \quad (17)$$

同样地,  $V(u)$  只能取

$$\begin{aligned} V(u) &= \frac{cf}{(f-g)^3} (\bar{\alpha}_1 f^2 + \bar{\beta}_1 fg + \bar{\gamma}_1 g^2) + \frac{cg}{(f-g)^3} (\bar{\alpha}_1 f^2 + \bar{\beta}_2 fg + \bar{\gamma}_2 g^2) \\ &= \frac{cf}{(f-g)^3} [\bar{\alpha}_1 f^2 + (\bar{\beta}_1 + \bar{\alpha}_2) fg + (\bar{\gamma}_1 + \bar{\beta}_2) g^2] + \frac{cg}{(f-g)^3} \bar{\gamma}_2 g^2 \\ &= \frac{cf}{(f-g)^3} (\alpha_1 f^2 + \beta_1 fg + \gamma_1 g^2) + \frac{cg}{(f-g)^3} \gamma_2 g^2 \end{aligned} \quad (18)$$

利用 (16), (18) 化为

$$V(u) = \frac{1}{c^2} [(\alpha_1 + \beta_1 + \gamma_1 + \gamma_2) u^3 - c(\beta_1 + 2\gamma_1 + 3\gamma_2) u^2 + c^2(\gamma_1 + 3\gamma_2) u - c^3 \gamma_2] \quad (19)$$

其相应的 Hirota 方程组为

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2) (f \cdot g - g \cdot g) + \alpha_1 f^2 + \beta_1 fg + \gamma_1 g^2 = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2) (f \cdot g - f \cdot f) + \gamma_2 g^2 = 0 \end{cases} \quad (20)$$

计算表明, 对 (7) 的其它取法, 所得到的  $V(u)$  均属以上所得到的类型。也就是说, 使得 (1) 可以写成 Hirota 方程组的  $V(u)$  只有两大类型, 一类是由 (11) 和 (14) 给出的 Klein-Gordon 型方程, 另一类是由 (19) 给出的含  $u$  的三阶多项式的方程。

### 3 五个已知方程的 Hirota 形式及其解

我们知道, 单个 Hirota 方程恒有一个和二孤立波解<sup>[7]</sup>。与此成鲜明对比的是, 利用 Hirota 求解方法, 我们发现, 在上节所得到的两大类型的 Hirota 方程组中, 许多方程组甚至没有单个孤立波解。

(i) 考虑由 (19) 给出的  $V(u)$ , 为了求解相应的 (1) 方程的单个孤立波解, 按 Hirota 方法,  $f$  和  $g$  按参数  $\varepsilon$  的形式展开式取为

$$f = 1 + \varepsilon F_1, \quad g = \varepsilon G_1 \quad (21)$$

将 (21) 代入 (20) 中, 比较  $\varepsilon$  的同次幂系数可得

$$\varepsilon^0: \alpha_1 = 0$$

$$\varepsilon^1: (\partial_t^2 - \partial_x^2) G_1 + \beta_1 G_1 = 0$$

$$(\partial_t^2 - \partial_x^2) G_1 - 2(\partial_t^2 - \partial_x^2) F_1 = 0$$

$$\varepsilon^2: (D_t^2 - D_x^2) F_1 \cdot G_1 - (D_t^2 - D_x^2) G_1 \cdot G_1 + \beta_1 F_1 G_1 + \gamma_1 G_1^2 = 0$$

$$(D_t^2 - D_x^2) F_1 \cdot G_1 - (D_t^2 - D_x^2) F_1 \cdot F_1 + \gamma_2 G_1^2 = 0$$

由第二、三两方程易得

$$G_1 = -2e^{-2\kappa x + 2\omega t}, F_1 = -e^{-2\kappa x + 2\omega t}, 4\omega^2 - 4\kappa^2 + \beta_1 = 0$$

第四、五两式给出  $2\beta_1 + 4\gamma_1 = 0, \gamma_2 = 0$ 。对  $f$  和  $g$  其它形式的展开式逐一计算后，我们发现所得到的方程组是不相容的。这表明在 (19) 类型的方程中，只有

$$u_{,t} - u_{,xx} + \frac{1}{c^2}(-\gamma_1 u^3 + c^2 \gamma_1 u) = 0 \quad (22)$$

才有单个孤立波解，其解为（取  $\varepsilon = 1$ ）

$$u = \frac{cf}{f-g} = \text{cth}\left(kx - \sqrt{k^2 + \frac{1}{2}\gamma_1 t}\right) \quad (23)$$

特别取  $c = 1, \gamma_1 = -1$ ，就得到文[2]所研究的方程

$$u_{,t} - u_{,xx} + u^3 - u = 0 \quad (24)$$

其 Hirota 方程组为

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot g - g \cdot g) + 2fg - g^2 = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot g - f \cdot f) = 0 \end{cases} \quad (25)$$

其单个孤立波解，令  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2(1-v^2)}}$ ，可化为

$$u = \text{th} \frac{x-vt}{\sqrt{2(1-v^2)}} \quad (26)$$

但计算表明，(22) 和 (24) 没有两个孤立波解。因为将可能对应于两孤立波解的  $f$  和  $g$  的各种展开式，比如取

$$f = 1 + \varepsilon F_1 + \varepsilon^2 F_2, g = \varepsilon G_1 + \varepsilon^2 G_2,$$

代入 (20) 时，所得到的关于  $F_1, F_2, G_1$  和  $G_2$  的方程组是不相容的。这和 Newell 等人利用数值计算方法不能得到 (24) 方程的两孤立波解的结果是一致的。

(ii) 对文献[2]中考虑的另一个方程

$$u_{,t} - u_{,xx} + \sin u + \lambda \sin 2u = 0 \quad (27)$$

比较其和 (11) 的系数关系，易得  $c = 2, \beta_1 = 2\lambda + 1, \alpha_1 = \gamma_1 = \beta_2 = 0, \gamma_2 = -2$ 。于是在变换

$$u = 2 \text{tg}^{-1} g/f \quad (28)$$

之下，(27) 的 Hirota 方程组为

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2)f \cdot g + (2\lambda + 1)fg = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot f - g \cdot g) - 2g^2 = 0 \end{cases} \quad (29)$$

令  $f = 1 + \varepsilon^2 F_1, g = \varepsilon G_1$ ，由 (29) 可求得 (27) 的单孤立波解为

$$u = 2 \text{tg}^{-1} [i \sqrt{2\lambda + 1} \text{sech}(\kappa x - \sqrt{\kappa^2 - 1 - 2\lambda} t)]$$

但计算表明，当  $\lambda \neq 0$  时 (29) 没有两孤立波解。这同样地和 Newell 等人用数值方法不能得到孤立波解的结果是吻合的。

对 sine-Gordon 方程

$$u_{,t} - u_{,xx} + \sin u = 0 \quad (30)$$

由 (11) 取  $c = 4, \beta_1 = 1, \alpha_1 = \gamma_1 = \beta_2 = \gamma_2 = 0$ ，可得到更为简洁的 Hirota 方程组



$$\ddot{u} = 4\text{tg}^{-1}g/f,$$

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2)f \cdot g + f \cdot g = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot f - g \cdot g) = 0 \end{cases} \quad (31)$$

这与文[1]给出的方程是相同的。利用(31)更便于求取 sine-Gordon 方程的  $N$  孤立子解和呼吸解<sup>[1]</sup>。

(iii) 对 Mikhailov 方程

$$u_{,t} - u_{,xx} + e^{-2u} - e^u = 0 \quad (32)$$

由(14)取  $c=2$ ,  $\alpha_1=0$ ,  $\beta_1=-3$ ,  $\gamma_1=1$ ,  $\beta_2=\gamma_2=-2$  可以得到。其相应的(13)和(15)化为  $u=2\text{th}^{-1}g/f$

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2)fg - 3f \cdot g + g^2 = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot f + g \cdot g) - 2fg - 2g^2 = 0 \end{cases} \quad (33)$$

由(14)取  $c=2$ ,  $\alpha_1=\frac{1}{2}$ ,  $\beta_1=1$ ,  $\gamma_1=-\frac{1}{2}$ ,  $\beta_2=0$ ,  $\gamma_2=2$ , 可以得到 Liouville 方程

$$u_{,t} - u_{,xx} + e^u = 0 \quad (34)$$

在变换  $u=2\text{th}^{-1}g/f$  下, 其 Hirota 方程组为

$$\begin{cases} (D_t^2 - D_x^2)f \cdot g + \frac{1}{2}f^2 + fg - \frac{1}{2}g^2 = 0 \\ (D_t^2 - D_x^2)(f \cdot f - g \cdot g) + 2g^2 = 0 \end{cases}$$

(32) 和 (34) 的解已分别由[3]和[4, 5]给出, 这里不再讨论。

### 参 考 文 献

- [1] Hirota R, Direct Method in Soliton Theory, in Solitons (ed. Bullough R K and Caudrey P J), Springer, 1980.
- [2] Ablowitz M J, Kruskal M D and Ladik J F, *SIAM J. Appl. Math.*, **36** (1979), 428—437.
- [3] Mikhailov A V, Proc. Joint US-USSR Symposium on Soliton Theory, (ed. Zakharov V E and Manakov S V), Keiv, North-Holland, Amsterdam, 1979, 73—117.
- [4] Andreev V A, *Theor. Math. Fiz.*, **29** (1976), 213.
- [5] Bos L and Torrence R J, *Phys. Lett.*, 111A, **3** (1985), 95.
- [6] Clarkson P A, Olver P J, McLeod J B and Ramani A, *SIAM J. Math. Anal.*, **4** (1986), 798—802.
- [7] Newell A C, Soliton in Mathematics and Physics, CBMS 48, SIAM, Philadelphia, 1985.

# The Equations $u_{tt} - u_{xx} + V(u) = 0$ With Hirota Form

Zeng Yunbo

*(Department of Mathematics)*

## Aabstract

It is shown that among the equations  $u_{tt} - u_{xx} + V(u) = 0$  for various function  $V(u)$ , there are only two kinds of the equations which can be written in Hirota form. Subsequently, bilinear equations for these kinds of well-known equations can be obtained, and some of these equations are examined not to have two solitary wave solution.

**Key words:** Hirota's method, bilinear equations, soliton, solitary wave, Klein-Gordon equation.

# On the Algebraic Structure of Group Rings

Yang Tonghai

(Department of Mathematics)

## Abstract

Let  $R$  be a ring and  $G$  a group. Then  $R$  is a left self- $fp$ -injective (left  $IF$ ) ring if and only if  $R$  is a left self- $fp$ -injective (left  $IF$ ) ring and  $G$  is a locally finite group. When  $G$  is abelian, the coherence and semiheredity of  $RG$  are also characterized in this sequel.

**Key words:** group ring, self- $fp$ -injective ring,  $IF$  ring, coherent ring, locally finite group.

## 1 Introduction

Since I.G. Connell studied the semisimplicity, the regularity the  $QF$  property, Artinity, Noetherity and self-injectivity of group rings in 1963, the algebraic structure of group rings have been extensively studied by many authors (for details, see [8] and [9]). This paper pursues this progress and discusses the coherence, semi-heredity, self- $fp$ -injectivity and  $IF$  property of group rings. In this sequel,  $R$  denote a ring with the identity and  $G$  denotes a group.

## 2 Coherence of Group Rings

It can be recalled that a ring is left coherent if and only if every f.g. (= finitely generated) left ideal is f.p. (= finitely presented) and that a ring  $R$  is called left  $\alpha$ -stably coherent if  $R[X]$  is left coherent, where  $X$  is an indeterminate set of cardinal  $\alpha$ . It is easy to see that if a ring  $R$  is left  $\alpha$ -stably coherent, then  $R$  is left  $\beta$ -stably coherent for any cardinal  $\beta < \alpha$ . On the other hand, if  $R$  is left  $n$ -stably coherent for every natural number  $n$ , then  $R$  is left  $\alpha$ -stably coherent for any cardinal  $\alpha$ . In this case,  $R$  can be called

left  $\infty$ -stably coherent. Left noetherian rings are left  $\infty$ -stably coherent. Commutative semi-hereditary rings and commutative coherent rings of global homological dimension  $\leq 2$  are also  $\infty$ -stably coherent by [6]. In this section, a characteristic of coherent group rings is given by means of  $\alpha$ -stably coherence of the coefficient rings.

**Lemma 1** Let  $H$  be a subgroup of a group  $G$ . Then  $RG$  is left coherent implies that  $RH$  is also left coherent.

**Proof** Let  $I$  be a f.g. left ideal of  $RH$  with an exact  $RH$ -module sequence

$$0 \rightarrow K \rightarrow (RH)^n \rightarrow I \rightarrow 0$$

Going up to  $RG$ , one get an exact  $RG$ -module sequence

$$0 \rightarrow RG \otimes_{RH} K \rightarrow (RG)^n \rightarrow (RG)I \rightarrow 0$$

So  $RG \otimes_{RH} K$  is a f.g. left  $RG$ -module and can then be expressed as  $RG \otimes_{RH} K'$  with  $K'$  a f.g.  $RH$ -submodule of  $K$ . Therefore one have  $RG \otimes_{RH} K/K' = 0$  and then  $K = K'$  since  $RG$  is  $RH$ -free. This implies that  $RH$  is left coherent.

**Proposition 1** Let  $G$  be a locally finite group. Then  $RG$  is left coherent if and only if  $R$  is left coherent.

**Proof** It suffices to prove the "if" part. A group  $G$  is called locally finite if and only if every f.g. subgroup of  $G$  is finite. Let  $R$  be a left coherent ring. If  $I$  is a f.g. left ideal of  $RG$ , generated by  $x_1, \dots, x_n$ . Then there is a f.g. subgroup  $H$  of  $G$  with  $x_i \in RH$  for  $i = 1, \dots, n$ . Let  $I'$  be the left ideal of  $RH$  generated by  $x_i, i = 1, \dots, n$ . Then there is an exact  $RH$ -module sequence

$$0 \rightarrow K \rightarrow (RH)^n \rightarrow I' \rightarrow 0$$

Since  $G$  is locally finite,  $H$  is finite and then  $RH$  is f.g.  $R$ -free. So  $K$  is a f.g.  $R$ -module since  $R$  is coherent and is of course f.g. as an  $RH$ -module. Now by the exact sequence

$$0 \rightarrow RG \otimes_{RH} K \rightarrow (RG)^n \rightarrow I = RG \otimes_{RH} I' \rightarrow 0$$

one has that  $I$  is f.p. and  $RG$  is left coherent.

**Lemma 2** Let  $G$  be an abelian free group of rank  $m$ . Then  $RG$  is left coherent if and only if  $R$  is left  $m$ -stably coherent.

**Proof** See ([8] Prop. 2.6).

**Theorem 1** Let  $G$  be an abelian group of torsionfree rank  $\alpha$ . Then  $RG$  is left coherent if and only if  $R$  is left  $\alpha$ -stably coherent.

**Proof** "only if" part: By Lemma 1 and the remark before Lemma 1, we only have to consider the case  $\alpha = n$  is a natural number. In this case,  $G$  has a free subgroup of rank  $n$  denoted by  $H$ ,  $RH$  is left coherent by Lemma 1 and  $R$  is  $n$ -stably left coherent by Lemma 2.

"If" part: If  $I$  is a f.g. left ideal of  $RG$ , generated by  $x_1, \dots, x_n$ . Then there is a f. g. subgroup  $H$  of  $G$  such that  $x_1, \dots, x_n \in RH$ .  $H$  is the direct product of a finite group  $H_0$  and a free group of finite rank  $m \leq \alpha$ . So  $RH = (RH_0)H_0$  is left coherent by Lemma 2 and Proposition 1 and then the ideal (left)  $I'$  of  $RH$  generated by  $x_1, \dots, x_n$  is f.p.. So  $I = RG \otimes_{RH} I'$  is a f.p. left  $RG$ -module by similar discussion to the proof of Proposition 1. Therefore  $RG$  is left coherent.

**Corollary 1** If  $R$  is a left  $\infty$ -stably coherent ring, then  $RG$  is also left  $\infty$ -stably coherent for every abelian group  $G$ .

**Corollary 2** Let  $G$  be an abelian group. Then  $RG$  is left semi-hereditary if and only if for every  $p \in \text{supp } G$ ,  $p$  is a unit of  $R$  and one of the following conditions holds.

(1)  $R$  is left semi-hereditary and  $G$  is torsion.

(2)  $R$  is von Neumann regular and left 1-stably coherent, and  $G$  has torsionfree rank  $\leq 1$ .

When  $R$  is commutative, the 1-stably coherence of  $R$  is superfluous.

**Proof** Theorem 1, [3] main theorem and the well known fact that a ring is left semi-hereditary if and only if it is left coherent and has weak global homological dimension  $\leq 1$ .

### 3 Self- $fp$ -injectivity and $IF$ Property of Group Rings

Connell<sup>[1]</sup> showed in 1963 that if  $G$  is a finite group and  $R$  is left self-injective, then  $RG$  is left self-injective. Renault<sup>[4]</sup> showed in 1971 that the converse is true. By [1], it is easy to see that a group ring  $RG$  is  $QF$  if and only if  $R$  is  $QF$  and  $G$  is finite. In this section, it will be shown that a group ring  $RG$  is left self- $fp$ -injective ( $IF$ ) if and only if  $R$  has the same property and  $G$  is locally finite. It is recalled that a left  $R$ -module  $M$  is called  $fp$ -injective if  $\text{Ext}_R^1(N, M) = 0$  for every f.p. left  $R$ -module  $N$ , or equivalently, for every left  $R$ -module diagram

$$\begin{array}{ccc} 0 & \longrightarrow & I & \xrightarrow{g} & R^n \\ & & \downarrow & \swarrow & \downarrow \\ & & M & & \end{array}$$

with  $I$  f. g., there is an  $R$ -map  $g: R^n \rightarrow M$  making the above diagram commute. A ring  $R$  is called left self- $fp$ -injective if  $R$  is  $fp$ -injective as a left  $R$ -module.

**Lemma 3** If  $R$  is a left self- $fp$ -injective ring and  $G$  is a finite group,

then  $RG$  is left self- $fp$ -injective.

**Proof** It is easy to verify that  $1:RG \rightarrow \text{Hom}_R(RG, R), x \rightarrow 1(x), 1(x)(y) = \text{tr}(yx)$  being the trace of  $yx$ , for every  $x, y \in RG$ , is a left  $RG$ -module isomorphism. Now for any f.p. left  $RG$ -module  $N$ ,  $N$  is also a f.p. left  $R$ -module as  $RG$  is f.g.  $R$ -free. By ([5], p248 Ex. 9.21],  $\text{Ext}_{RG}^1(N, \text{Hom}_R(RG, R)) \simeq \text{Ext}_R^1(RG \otimes_{RG} N, R) \simeq \text{Ext}_R^1(N, R) = 0$ .  $RG \simeq \text{Hom}_R(RG, R)$  is a left  $fp$ -injective  $RG$ -module.

**Theorem 2** A group ring  $RG$  is left self- $fp$ -injective if and only if  $R$  is left self- $fp$ -injective and  $G$  is locally finite.

**Proof** "If" part: Let  $N$  be a f.p. left  $RG$ -module, with the exact  $RG$ -module sequence

$$0 \rightarrow K \rightarrow (RG)^n \rightarrow N \rightarrow 0$$

and  $K$  a f.g. submodule of  $(RG)^n$ . Then there exist a f.g. subgroup  $H$  of  $G$  and a f.g.  $RH$ -module  $K'$  of  $(RH)^n$  such that  $K \simeq RG \otimes_{RH} K' \simeq RH$  is self- $fp$ -injective by Lemma 3 and then  $RG$  is left  $RH$ - $fp$ -injective. Let  $N' = (RH)^n / K'$ , then  $N \simeq RG \otimes_{RH} N'$ . By ([5] p258, Ex. 9.21],  $\text{Ext}_{RG}^1(N, RG) \simeq \text{Ext}_{RH}^1(N', RG) \simeq \text{Ext}_{RH}^1(N', \text{Hom}_{RG}(RG, RG)) \simeq \text{Ext}_{RH}^1(N', RG) = 0$ .  $RG$  is left self- $fp$ -injective.

"Only if" part: Let  $H$  be a f.g. subgroup of  $G$ . Let  $I(H)$  be the right ideal of  $RG$  generated by  $\{h-1: h \in H\}$ . By  $h'h''-1 = (h'-1)(h''-1) - (h'-1) - (h''-1)$ , it is easy to see that  $I(H)$  is a f.g. right ideal of  $RG$ . Now  $RG$  is left self- $fp$ -injective, one have  $r_{RG} l_{RG}(I(H)) = I(H) \neq RG$  and then  $l_{RG}(I(H)) \neq 0$ , where  $l_R(I)$  and  $r_R(I)$  denote the left and right annihilators of  $I$  in  $R$ . So  $H$  is finite and  $G$  is then locally finite. Next to be shown is that  $R$  is left self- $fp$ -injective. Given any left  $R$ -module diagram

$$\begin{array}{ccccc} 0 & \longrightarrow & I & \longrightarrow & R^n \\ & & \downarrow f & \swarrow f' & \\ & & R & & \end{array} \quad (I)$$

with  $I$  a f.g. left  $R$ -submodule of  $R^n$ . We have an  $RG$ -module diagram

$$\begin{array}{ccccc} 0 & \longrightarrow & (RG)I = IG & \longrightarrow & (RG)^n \\ & & \downarrow h & \swarrow h' & \\ & & RG & & \end{array} \quad (II)$$

where  $h(\sum x_g g) = \sum h(x_g)g, x_g \in I$ . So there an  $h': (RG)^n \rightarrow RG$  making the diagram (II) commute. Let  $f': R^n \rightarrow R, f'(x) = \text{tr}h'(x)$ , then  $f'$  makes (I) commute. Therefore  $R$  is left self- $fp$  injective.

**Theorem 3** A group ring  $RG$  is left  $IF$  if and only if  $R$  is left  $IF$  and

$G$  is locally finite.

**Proof** "Only if" part: since left  $IF$  rings are right self- $fp$ -injective<sup>[21]</sup>,  $G$  is locally finite by Theorem 2. Now let  $M$  be a left  $fp$ -injective  $R$ -module. For any left  $RG$ -module diagram

$$\begin{array}{ccc}
 0 & \longrightarrow & I & \xrightarrow{\lambda} & (RG)^n \\
 & & \downarrow f & \nearrow q \otimes 1 & \\
 & & RG \otimes_R M & & 
 \end{array} \quad (III)$$

where  $I$  is a f.g.  $RG$ -submodule of  $(RG)^n$ . Then there exist a finite subgroup  $H$  of  $G$  and a f.g.  $RH$ -submodule  $I'$  of  $(RH)^n$  such that  $I = (RG)I'$  and there is an  $RH$ -module diagram

$$\begin{array}{ccc}
 0 & \longrightarrow & I' & \xrightarrow{\lambda'} & RH^n \\
 & & \downarrow f' & \nearrow q' & \\
 & & RH \otimes_R M & & \\
 & & \downarrow tr & \nearrow p & \\
 & & M & & 
 \end{array} \quad (IV)$$

where  $f' = f|I'$ ,  $\lambda' = \lambda|I'$  and  $\text{tr}(\sum_{h \in H} h \otimes m_h) = m_1$ . Since  $RH$  is f.g.  $R$ -free and  $M$  is  $R$ - $fp$ -injective, there is an  $R$ -map  $p$  making the largest triangle in (IV) commute. Set  $q(x) = \sum_{h \in H} h \otimes p(h^{-1}x)$  for every  $x \in (RH)^n$ . It is easy to verify that  $q$  is an  $RH$ -map with  $q\lambda' = f'$ . So  $q \otimes 1$  makes (III) commute and then  $RG \otimes_R M$  is left  $RG$ - $fp$ -injective. Therefore  $RG \otimes_R M$  is left  $RG$ -flat. Now for any right  $R$ -module  $N$ ,  $N$  can be regarded as an  $RG$ -module in natural manner.  $\text{Tor}_1^R(N, M) \simeq \text{Tor}_1^R(N \otimes_{RG} RG, M) \simeq \text{Tor}_1^{RG}(N, RG \otimes_R M) = 0$ ,  $M$  is left  $R$ -flat,  $R$  is thus a left  $IF$  ring.

"If" part: First suppose that  $G$  is finite. Let  $M$  be a  $fp$ -injective left  $RG$ -module. It is easy to see that  $M$  is left  $R$ - $fp$ -injective and then  $M$  is left  $R$ -flat. So  $RG \otimes_R M$  is  $RG$ -flat. It is easy to verify that  $f: M \rightarrow RG \otimes_R M$ ,  $m \rightarrow \sum_{g \in G} g \otimes g^{-1}m$  is a monic  $RG$ -map and is then pure since  $M$  is  $RG$ - $fp$ -injective. So  $M$  is left  $RG$ -flat since pure submodules of flat modules are flat. In a general case, given an  $fp$ -injective left  $RG$ -module  $M$ , let  $I$  be a f.g. right ideal of  $RG$  generated by  $x_1, \dots, x_n$ , then there are a finite subgroup  $H$  of  $G$  and a f.g. right ideal  $I'$  of  $RH$  such that  $x_1, \dots, x_n \in RH$  and generate  $I'$ .

So  $I \simeq I' \otimes_{RH} RG$  and  $RG/I \simeq RH/I' \otimes_{RH} RG$ .  $M$ , being  $RG$ - $fp$ -injective, must be  $RH$ - $fp$ -injective. So  $M$  is left  $RH$ -flat since  $RH$  is left  $IF$ . By[5], one has  $\text{Tor}_1^{RG}(RG/I, M) \simeq \text{Tor}_1^{RH}(RH/I', RG \otimes_{RG} M) \simeq \text{Tor}_1^{RH}(RH/I', M) = 0$ .  $M$  is left  $RG$ -flat.  $RG$  is therefore left  $IF$ .

The author is indebted to Professor Feng Keqin and Tang Huaiding for their advice and encouragement.

### References

- [1] Connell F G, *Canada J. Math.*, **15** (1963), 650—685.
- [2] Jain S, *Proc. Amer. Math. Soc.*, **41** (1973), 437—442.
- [3] Douglas A J, *J. London Math. Soc.*, **36** (1961), 371—381.
- [4] Renault G, *Colloq. Math. Soc. Janos, Bolyai*, North-holland Amsterdam, **6** (1973), 391—396.
- [5] Rotman J J, *An Introduction to Homological Algebra*, Academic Press, New York, 1979 Chapter 9.
- [6] Greenberg B V and Vasconcelos W V, *Proc. Amer. Math. Soc.*, **54** (1976), 59—64.
- [7] Stenstrom B, *J. London Math. Soc.* (2), **2** (1970), 323—329.
- [8] Karpilovsky G, *Commutative Group Rings*, Marcel Dekker, New York, 1983, Chapter 1—3.
- [9] Passman D S, *The Algebraic Structure of Group Rings*, Wiley-Interscience, Publ., 1977, Chapter 5.



# 群环的代数结构

杨同海

(数学系)

## 摘 要

设  $R$  是有单位元的环,  $G$  是一个群. 本文主要证明了: (1) 群环  $RG$  是左  $fp$ -自内射环当且仅当  $R$  是左  $fp$ -自内射环且  $G$  是局部有限群; (2)  $RG$  是左  $IF$  环当且仅当  $R$  是左  $IF$  环且  $G$  是局部有限群; (3) 刻化了凝聚群环和半遗传群环的特征.

**关键词:** 群环,  $fp$ -自内射环,  $IF$  环凝聚环, 局部有限群.

**中图法分类号:** O153.3

**AMS:** 16A26

# 与KdV系统相关联的Lax代数\*

张作顺 程艺

(数学系)

## 摘 要

证明了与Schrödinger谱问题相关联的全体Lax算子构成无穷维Lie代数,并给出了其明确表示。由此可以得出有关KdV系统的代数性质。

**关键词:** 孤立子, KdV方程, Lax对和Lax代数。

**中国法分类号:** O 175. 29

**AMS:** 35Q

## 1 引言

为了对孤立子现象有更深入的了解,人们从多方面对可积系统理论进行了研究,其中对非线性发展方程族的代数结构的探讨取得了许多重要结果。最近,程艺<sup>[1,2]</sup>,程艺、李翊神与Bullough<sup>[3]</sup>提出了构造 $2+1$ 维非线性发展方法族的Lax算子的方法。程艺、李翊神给出了所有与AKNS系统相关联的Lax算子族的代数结构,并指出所有Lax算子构成一无穷维Lie代数。虽然KdV系统可以纳入AKNS系统,我们却难以由此约化KdV系统的标量形式的Lie代数。

本文指出,不必将KdV系统纳入AKNS系统中,所有与Schrödinger算子相关联的Lax算子也构成一个无穷维Lie代数,每一Lax算子皆为标量形式的微分算子,我们给出了它们的明确构造及代数结构。由此可导出有关KdV系统可积性的代数性质。

## 2 主要结果

考虑 Schrödinger 特征值问题

$$L\varphi = \lambda\varphi \quad (1)$$

其中 $L = D_x^2 + q$ , 且当 $x \rightarrow \infty$ 时 $q$ 充分快地趋于零。

**定义 1** 算子 $A = \sum_{i=0}^n (\alpha_i D_x L^i + \beta_i L^i)$ 称为Lax算子, 如果

1989年10月25日收到。

\* 国家教委霍英东青年教师基金资助项目。

$$[A, L] + \sum_{k=0}^{n+1} \varepsilon_k L^k = a \quad (2)$$

其中  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n+1}$  为常数,  $a, \alpha_j, \beta_j, j=0, 1, \dots, n$  为  $x, q, q_x, \dots$  的光滑函数。

$a$  称为相应于  $A$  的乘积算子, 全体 Lax 算子的集合记为  $\mathcal{A}$ 。展开 (2) 式, 可得

$$\begin{aligned} 2\alpha_{n+1} &= \varepsilon_{n+1} \\ \alpha_{j+1} + 2\beta_j &= 0 \\ \beta_{j+1} - 2\alpha_{j+1}q - \alpha_j q_x + 2\alpha_{j-1} + \varepsilon_j &= 0 \\ a &= \alpha_0 q_x + 2\alpha_0 q - \beta_0 + \varepsilon_0 \end{aligned}$$

$j=1, 2, \dots, n$ 。

不失一般性, 可取  $\beta_j = -\frac{1}{2}\alpha_{j+1}$ , 于是全体 Lax 算子均可写为

$$\sum_{j=0}^n \left( \alpha_j D_x L^j - \frac{1}{2} \alpha_{j+1} L^j \right) \quad (3)$$

其系数满足以上微分方程组

$$\begin{aligned} \alpha_{n+1} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{n+1} \\ \alpha_{j-1} &= \frac{1}{2} \alpha_j q_x + \alpha_j q + \frac{1}{4} \alpha_{j+1} + \frac{1}{2} \varepsilon_j \\ a &= \alpha_0 q_x + 2\alpha_0 q + \frac{1}{2} \alpha_1 - \varepsilon_0 \end{aligned} \quad (4)$$

$j=1, 2, \dots, n$ 。

如果取  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = \dots = \varepsilon_n = 0$

$$\alpha_n(x) = \frac{1}{2} (\varepsilon_{n+1} x + (2 - \varepsilon_{n+1})) \quad (5)$$

$\alpha_j(x) \rightarrow 0$ , 当  $x \rightarrow -\infty, j=0, 1, \dots, n-1$

则可唯一确定 Lax 算子。分别记  $\varepsilon_{n+1} = 0, 2$  时满足上述边界条件的 Lax 算子为  $B_n, C_n$ , 相应的乘积算子记为  $b_n, c_n$ 。由于方程组 (4) 是线性的, 易知线性空间  $\mathcal{A}$  可由  $\{B_n, C_n; n=0, 1, \dots\}$  张成。  $B_n, C_n$  满足关系式

$$\begin{aligned} [B_n, L] &= b_n(q) \\ [C_n, L] &= c_n(q) - 2L^{n+1} \end{aligned} \quad (6)$$

且由 (5) 式及  $q$  的渐近性质可得

$$\begin{aligned} B_n &\rightarrow D_x^{2n+1}, b_n \rightarrow 0, \text{ 当 } x \rightarrow -\infty \text{ 时} \\ C_n &\rightarrow x D_x^{2n+1} - \frac{1}{2} D_x^{2n}, c_n \rightarrow 0, \text{ 当 } x \rightarrow -\infty \text{ 时} \end{aligned} \quad (7)$$

**定义 2** 如果  $A, \bar{A}$  为 Lax 算子, 其配合定义为

$$[A(q), \bar{A}(q)] = A'[\bar{a}] - \bar{A}'[a] + [A, \bar{A}] \quad (8)$$

其中  $a, \bar{a}$  为相应于  $A, \bar{A}$  的乘积算子,

$$A'[\bar{a}] = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial h} A(q + h\bar{a}) \quad (9)$$

为泛函导数.

作为本文的主要结果, 我们可以得到下述定理

**定理 1** 全体Lax算子关于  $[[\cdot, \cdot]]$  构成李代数.

为此, 我们先给出几个引理.

**引理 1** 若记全体形如  $\sum_{i=0}^n (\alpha_i D_x L^i + \beta_i L^i)$  的算子为  $H$ , 则  $L^i(\alpha L^k), L^i(\alpha D_x L^k), D_x(L^i(\alpha L^k)), D_x L^i(\alpha D_x L^k), (L^i)'[\tau], (D_x L^i)'[\tau]$  均为  $H$  中算子.

**证** 由于

$$\begin{aligned} L(\alpha L^k) &= (D_x^2 + q)(\alpha L^k) = \alpha_{xx} L^k + 2\alpha_x D_x L^k + \alpha L^{k+1} \\ L(\alpha D_x L^k) &= \alpha D_x L^{k+1} + \alpha_{xx} D_x L^k + 2\alpha_x L^{k+1} - (2q\alpha_x + \alpha q_x) L^k \end{aligned}$$

知  $L(\alpha L^k), L(\alpha D_x L^k)$  皆属于  $H$ , 利用数学归纳法知  $L^i(\alpha L^k), L^i(\alpha D_x L^k)$  皆为  $H$  中算子. 同理可证  $D_x L^i(\alpha D_x L^k), D_x L^i(\alpha L^k)$  也都是  $H$  中算子. 又因

$$\begin{aligned} (D_x L^i)'[\tau] &= \sum_{i=0}^j D_x L^i (L^i)'[\tau] L^{j-i-1} = \sum_{i=0}^j D_x L^i (\tau L^{i-1}) \\ (L^i)'[\tau] &= \sum_{i=0}^j L^i (\tau L^{i-1}) \end{aligned}$$

于是  $(D_x L^i)'[\tau], (L^i)'[\tau]$  均是  $H$  中算子.

**引理 2**  $\mathcal{A}$  关于  $[[\cdot, \cdot]]$  是封闭的, 即若  $A, \bar{A}$  是Lax型算子,  $[[A, \bar{A}]]$  也是Lax型算子.

**证** 事实上, 只要证明全体  $B_n, C_n, n=0, 1, 2, \dots$  关于  $[[\cdot, \cdot]]$  仍然产生出Lax型算子即可.

$$\begin{aligned} [[b_n, c_n]] &\equiv b'_m [c_n] - c'_n [b_m] = [B'_m [c_n], L] + [B_m, L' [c_n]] \\ &\quad - [C'_n [b_m], L] - [C_n, L' [b_m]] - (2L^{n+1})' [b_m] \\ &= [B'_m [c_n] - C'_n [b_m], L] + [B_m, [C_n, L]] \\ &\quad + [B_m, 2L^{n+1}] - [C_n, [B_m, L]] - \sum_{k=0}^{n+1} 2L^k L' [b_m] L^{n-k} = [[B_m, C_n], L] \end{aligned}$$

按定义可知  $[[B_m, C_n]] \in \mathcal{A}$ , 同理可证  $[[C_m, C_n], [B_m, B_n]]$  皆属于  $\mathcal{A}$ .

**引理 3**  $[[B_n, B_n]] = 0, [[C_m, C_n]] = 2(m-n)C_{m+n}, [B_m, C_n] = (2m+1)B_{m+n}$

**证** 由(7)式可知, 当  $x \rightarrow -\infty$  时以下渐近式成立

$$\begin{aligned} [B_m, B_n] &\rightarrow [D_x^{2m+1}, D_x^{2n+1}] = 0 \\ [B_m, C_n] &\rightarrow [D_x^{2m+1}, xD_x^{2n+1} - \frac{1}{2}D_x^{2n}] = (2m+1)D_x^{2(m+n)+1} \end{aligned}$$

$$[C_m, C_n] \rightarrow [xD_x^{2m+1} - \frac{1}{2}D_x^{2m}, xD_x^{2n+1} - \frac{1}{2}D_x^{2n}] = 2(m-n)(xD_x^{2(m+n)+1} - \frac{1}{2}D_x^{2(m+n)})$$

由唯一性可知, 引理所述关系式成立.

**定理 1 的证明** 因为  $[[\cdot, \cdot]]$  关于每一分量显然是线性的, 同时满足反对称条件, 而  $B_n, C_n, n=0, 1, 2, \dots$  构成线性空间  $\mathcal{A}$  的一组基, 因此只需证明  $B_n, C_n, n=0, 1, 2, \dots$  满足Jacobi恒等

式即可。

$$\begin{aligned} & \llbracket \llbracket B_m, C_n \rrbracket, C_k \rrbracket + \llbracket \llbracket C_n, C_k \rrbracket, B_m \rrbracket + \llbracket \llbracket C_k, B_m \rrbracket, C_n \rrbracket \\ &= \llbracket (2m+1)B_{m+n}, C_k \rrbracket + \llbracket 2(n-k)C_{n+k}, B_m \rrbracket - \llbracket (2m+1)B_{m+k}, C_n \rrbracket \\ &= \llbracket (2m+1)(2(m+n)+1) - 2(n-k)(2m+1) - (2m+1)(2(m+k)+1) \rrbracket B_{m+n+k} = 0 \end{aligned}$$

其它情形可类似证明, 于是  $\mathcal{A}$  成为 Lie 代数。作为例, 我们计算  $B_0, B_1, B_2, C_0, C_1$ 。

$$B_0 = D_x, \quad b_0 = q_x$$

$$B_1 = D_x L + \left( \frac{1}{2} q D_x - \frac{1}{4} q_x \right)$$

$$b_1 = \frac{3}{2} q q_x + \frac{1}{4} q_{xxx}$$

$$B_2 = D_x L^2 + \left( \frac{1}{2} q D_x L - \frac{1}{4} q_x L \right) + \left( \frac{3}{8} q^2 + \frac{1}{8} q_{xx} \right) D_x - \left( \frac{3}{8} q q_x + \frac{1}{16} q_{xxxx} \right)$$

$$b_2 = \frac{1}{16} (30 q^2 q_x + 11 q_x q_{xx} + 7 q q_{xxx} + q_{xxxx})$$

$$C_0 = x D_x - \frac{1}{2}$$

$$c_0 = x q_x + 2q$$

$$C_1 = \left( x D_x L - \frac{1}{2} L \right) + \frac{1}{2} \left( x q + \int_{-\infty}^x q dx \right) D_x - \frac{1}{4} (x q_x + 2q)$$

$$c_1 = \frac{1}{4} \left( 8 q^2 + 2 q_x \int_{-\infty}^x q dx + 6 x q q_x + 4 q_{xx} + x q_{xxx} \right)$$

$b_1$  关于  $q$  具有 KdV 形式。

在本文写作过程中, 作者们受到李翊神教授关于 AKNS 系统的有关结果的启发, 特此致谢。

### 参 考 文 献

- [1] Cheng Yi, *Phys. Lett.*, **127A**(1988), 205—208.
- [2] Cheng Yi, in *Nonlinear Physics, Research Reports in Physics* (Gu Chao-hao, Li yishen & Tu Guizhang eds), Springer-Verlag, Berlin, 1989, 12—22.
- [3] Cheng Yi, Li Yishen, *Bullough R K, J. Phys.*, A: *Math. Gen.*, **21** (1988), L443—448.

# Lax Algebra Related to the KdV System

Zhang Zuoshun    Cheng Yi

*(Department of Mathematics)*

## Abstract

The set of all Lax operators related to the Schrödinger spectral problem is proved to give rise to an explicit representation of an infinite dimensional Lie algebra. As results, all the algebraic properties associated with KdV system can be obtained.

**Key words:** soliton, KdV equation, Lax pair and Lax algebra.

# 最大值原理在地块价格评价中的应用\*

杨孝先

(数学系)

## 摘 要

应用 Pontryagin 最大值原理, 讨论了在一般的权函数下对地块上建筑物的最优维修投资计划以及地块价格的评价问题。

**关键词:** 最优控制, 经济管理系统, 控制理论应用, 地块价格。

**中国法分类号:** F224.1

**AMS:** 93C

## 1 引言

随着“改革、开放”的逐步深入发展, 地块上的房产的转让、抵押、出租、转租及出售等等交易随之出现。在城市动态经济系统的分析中, 如何对地块价格进行科学的评价就显得越来越重要。一般来说, 所谓地块价格是根据地块上建造种种建筑物后, 所得到的利润计算出来的。目前已经提出了各种地块价格的评价模型<sup>[1,2]</sup>。

在[1]中, J.L. Sweeney将地块上建筑物的质量作为时间的指数衰减函数, 且用进行最优的连续维修投资所得到的利润, 构成对地块价格的评价。然而, 连续维修投资仅适用于宏观的经济管理模型, 对于微观的经济管理模型是不适用的。在[2]中, 提出了进行定期的不连续维修投资的微观经济管理模型, 且对定常的贴现率导出了最优维修投资计划及地块价格的评价。本文应用最大值原理考虑了在一般的权函数之下的, 最优维修投资计划及地块价格的评价问题。

## 2 最优维修投资计划

假设地块上建筑物的质量为  $x(t)$ , 按时间  $t$  的衰减率为  $\alpha$ 。但是, 建筑物的所有者(房主)在时间区间  $[t, t+\tau]$  内, 为了保持建筑物原来的质量或增加某些现代化的设备, 要进

1989年12月26日收到。

\* 国家自然科学基金资助项目。

行定期的检查和维修。因此,质量 $x(t)$ 的变化动态模型应为

$$\dot{x}(t) = -\alpha x(t) + u(t) \quad (1)$$

其中

$$u(t) = \sum_{k=1}^N g(m_k) \delta(t - k\tau) \quad (2)$$

$\alpha > 0$  (常数),  $m_k \geq 0$ ,  $x(0) = x_0$ 。

若房主把地块上的房产在时间区间  $[0, T]$  租借出去后得到的利润是

$$J(m_k) = \int_0^T \left[ R(t)x(t) - \sum_{k=1}^N m_k \delta(t - k\tau) \right] \theta(t) dt \quad (3)$$

这里的  $R(t)x(t)$  是租金, 而  $\theta(t) > 0$  为递减权函数, 它说明由函数

$$\left[ R(t)x(t) - \sum_{k=1}^N m_k \delta(t - k\tau) \right]$$

表示的房主的收入, 在时间上是不等值的。假定  $\theta(t)$  的递减速度快于房主收入的增长, 那末, 积分 (3) 是收敛的;  $N = [T/\tau]$ , 此处的  $[\cdot]$  表示不超过“ $\cdot$ ”的最大整数;  $m_k$  是房主在  $k$  次维修或增添设备的投资额;  $g(m_k)$  为对投资后质量的效果函数。假设它满足下列条件

$$g(0) = 0, \quad \frac{dg(m)}{dm} \geq 0, \quad \frac{d^2g(m)}{dm^2} < 0 \quad (4)$$

试确定使房主得到的利润为最大的最优维修投资计划  $m_k^*$ ,  $k = 1, 2, \dots, N$

根据 Pontryagin 的最大值原理 [3], 有

$$H = \left[ R(t)x(t) - \sum_{k=1}^N m_k \delta(t - k\tau) \right] \theta(t) + \lambda(t) [-\alpha x(t) + u(t)] \quad (5)$$

故伴随方程为

$$\begin{cases} \dot{\lambda}(t) = -R(t)\theta(t) + \alpha\lambda(t) \\ \lambda(T) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

容易得到 (6) 的解为

$$\lambda(t) = \int_t^T R(s) e^{-\alpha(s-t)} \theta(s) ds \quad (7)$$

若注意到 (2), 最优维修投资计划应满足条件

$$\frac{\partial H}{\partial m_k} = -\delta(t - k\tau)\theta(t) + \lambda(t) \frac{dg(m_k)}{dm_k} \delta(t - k\tau) = 0$$

或

$$\left[ \lambda(t) \frac{dg(m_k)}{dm_k} - \theta(t) \right] \delta(t - k\tau) = 0 \quad (8)$$

将 (8) 的两端关于  $t$  从 0 到  $T$  积分, 有

$$\left[ \lambda(k\tau) \frac{dg(m_k)}{dm_k} - \theta(k\tau) \right] = 0 \quad (9)$$

把 (7) 代入 (9), 得到

$$\theta(k\tau) \left\{ \frac{dg(m_k)}{dm_k} \int_{k\tau}^T \frac{R(s)\theta(s)}{\theta(k\tau)} \exp[-\alpha(s - k\tau)] ds - 1 \right\} = 0 \quad (10)$$



由于  $\theta(k\tau) > 0$ , 为了使 (10) 成立, 今选取  $m_k^*$  使

$$\left[ \frac{dg(m_k)}{dm_k} \int_{k\tau}^T \frac{R(s)\theta(s)}{\theta(k\tau)} e^{-\alpha(s-k\tau)} ds - 1 \right] = 0 \quad (11)$$

因此, 我们根据权函数  $\theta(t)$ , 及  $R(t)$  与效果函数  $g(m)$  的不同形式, 可由 (11) 给出相应的最优维修计划策略。

例如, 若令  $g(m_k) = \beta \sqrt{m_k}$ ,

其中  $\beta > 0$  为常数, 这时 (4) 显然成立, 且由 (11) 得到最优维修计划策略为

$$m_k^* = \frac{\beta^2}{4} \left\{ \int_{k\tau}^T \frac{R(s)\theta(s)}{\theta(k\tau)} \exp[-\alpha(s-k\tau)] ds \right\}^2 \quad (12)$$

特别, 当  $\theta(t) = e^{-\gamma t}$ ,  $\gamma > 0$  为贴现率;  $R(t) = R$  (常数) 时, 由 (11) 有

$$\frac{R}{(\alpha+\gamma)} [1 - e^{-(\alpha+\gamma)(T-k\tau)}] \frac{dg(m_k)}{dm_k} = 1 \quad (13)$$

再由 (12), 有

$$m_k^* = \left\{ \frac{R\beta[1 - e^{-(\alpha+\gamma)(T-k\tau)}]}{2(\alpha+\gamma)} \right\}^2 > 0 \quad (14)$$

另外, 当  $T \rightarrow +\infty$  时, 由 (13) 得到

$$\frac{R}{(\alpha+\gamma)} \frac{dg(m_k)}{dm_k} = 1, \quad k < \infty \quad (15)$$

再根据 (14), 有定常的最优维修计划策略为

$$m_k^* = \frac{1}{4} \left( \frac{R\beta}{\alpha+\gamma} \right)^2 \quad (16)$$

然而, 随着城市的发展及人口的增加, 现代化和公共设备的充实等等, 租金应随着时间的增加而增加。因此, 可取

$$R(t) = R_0 e^{\eta t}, \quad \alpha + \gamma > \eta \quad (17)$$

当  $\theta(t) = e^{-\gamma t}$  时, 由 (12), 当  $T \rightarrow +\infty$  时, 有

$$m_k^* = \frac{1}{4} \left[ \frac{\beta R(k\tau)}{(\alpha+\gamma-\eta)} \right]^2 \quad (18)$$

这时, 恰和 [2] 中的结果一致。

### 3 地块价格的评价

根据前面得到的结果, 随着时间的增加, 房主得到的利润达最大。这时, 存在最优的维修时期  $T_0^*$ , 而最优的住宅质量为  $x_{T_0}^*$ 。(即指房主获得最大利润时的房产质量), 然后再进行最优的维修投资计划  $m_k^*$ 。于是总的利润为

$$J^* = \max_{\substack{T_0, x_{T_0}, m_k \\ k=1, 2, \dots}} \left\{ \int_{T_0}^{+\infty} [R(t)x(t) - \sum_{k=1}^{\infty} m_k \delta(t - T_0 k\tau)] \theta(t) dt - C(x_{T_0}) \theta(T_0) \right\} - V \quad (19)$$

其中  $C(x)$  是建设质量为  $x$  的建筑物的费用;  $V$  是  $t=0$  时的地块价格。

若  $J^*$  是正的, 房主一般不放手地块; 若  $J^*$  为负一般也不会有人购买此地块。因此, 在所谓完全竞争的市场中, 通常只有  $J^* = 0$  时, 才会进行正常的交易。

在进行正常交易的情形下, 即  $J^* = 0$  时的地块价格  $V$  的评价为

$$V = \max_{\substack{T_0, x_{T_0}, m_k \\ k=1, 2, \dots}} \left\{ \int_{T_0}^{+\infty} [R(t)x(t) - \sum_{k=1}^{\infty} m_k \delta(t - T_0 - k\tau)] \theta(t) dt - C(x_{T_0}) \theta(T_0) \right\} \quad (20)$$

当  $g(m) = \beta \sqrt{m}$  时, 由 (12) 因有

$$m_k^* = \frac{\beta^2}{4} \left\{ \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} \frac{R(s)\theta(s)}{\theta(T_0 + k\tau)} \exp[-\alpha(s - T_0 - k\tau)] ds \right\}^2$$

故

$$V = \max_{\substack{T_0, x_{T_0} \\ k=1, 2, \dots}} \left\{ \int_{T_0}^{+\infty} R(t)x(t)\theta(t) dt - \frac{\beta^2}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\theta(T_0 + k\tau)} \left[ \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} R(s)\theta(s) \exp(-\alpha(s - T_0 - k\tau)) ds \right]^2 - C(x_{T_0}) \theta(T_0) \right\} \quad (21)$$

另外, 有

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = -\alpha x(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \beta \sqrt{m_k^*} \delta(t - k\tau), & T_0 \leq t < +\infty \\ x(T_0) = x_{T_0}. \end{cases}$$

故有

$$x(t) = e^{-\alpha(t-T_0)} x_{T_0} + \int_{T_0}^t e^{-\alpha(t-s)} \sum_{k=1}^{\infty} \beta \sqrt{m_k^*} \delta(s - T_0 - k\tau) ds$$

即有

$$\begin{aligned} \int_{T_0}^{+\infty} R(t)x(t)\theta(t) dt &= x_{T_0} e^{\alpha T_0} \int_{T_0}^{+\infty} R(t)\theta(t) e^{-\alpha t} dt + \\ &+ \frac{\beta^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\theta(T_0 + k\tau)} \left[ \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} R(s)\theta(s) \exp(-\alpha(s - T_0 - k\tau)) ds \right]^2 \end{aligned} \quad (22)$$

令将 (22) 代入 (21), 得到

$$\begin{aligned} V = \max_{T_0, x_{T_0}} \left\{ x_{T_0} e^{\alpha T_0} \int_{T_0}^{+\infty} R(t)\theta(t) e^{-\alpha t} dt + \right. \\ \left. + \frac{\beta^2}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\theta(T_0 + k\tau)} \left[ \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} R(s)\theta(s) \exp(-\alpha(s - T_0 - k\tau)) ds \right]^2 - \right. \\ \left. - C(x_{T_0}) \theta(T_0) \right\} \quad (23) \end{aligned}$$

最后将 (23) 中的  $\{\cdot\}$  关于  $T_0$  及  $x_{T_0}$  求偏微商, 得到最优的维修时期  $T_0^*$  及最优的住宅质量  $x_{T_0}^*$  应满足的必要条件如下

$$e^{\alpha T_0} \int_{T_0}^{+\infty} R(t)\theta(t) e^{-\alpha t} dt - C'(x_{T_0}) \theta(T_0) = 0 \quad (24)$$

$$\begin{aligned}
& \alpha x_{T_0} e^{\alpha T_0} \int_{T_0}^{+\infty} R(t) \theta(t) e^{-\alpha t} dt - x_{T_0} R(T_0) \theta(T_0) - \frac{\beta^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} R(T_0 + k\tau) \\
& \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} R(s) \theta(s) \exp[-\alpha(s - T_0 - k\tau)] ds - \frac{\beta^2}{4} [\theta'(T_0 + k\tau) + 2\alpha\theta(T_0 + k\tau)] \\
& \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\theta(T_0 + k\tau)} \int_{T_0 + k\tau}^{+\infty} R(s) \theta(s) \exp[-\alpha(s - T_0 - k\tau)] ds \right\}^2 + \theta'(T_0) C(x_{T_0}) = 0
\end{aligned} \tag{25}$$

设从 (24) 及 (25) 解得  $T_0^*$  与  $x_{T_0}^*$ 。因此地价为

$$\begin{aligned}
V = & x_{T_0}^* e^{\alpha T_0^*} \int_{T_0^*}^{+\infty} R(t) \theta(t) e^{-\alpha t} dt + \frac{\beta^2}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\theta(T_0^* + k\tau)} \\
& \left\{ \int_{T_0^* + k\tau}^{+\infty} R(s) \theta(s) \exp[-\alpha(s - T_0^* - k\tau)] ds \right\}^2 - C(x_{T_0}^*) \theta(T_0^*)
\end{aligned} \tag{26}$$

特别, 当  $\theta(t) = e^{-rt}$ ,  $r > 0$ ;  $R(t) = R_0 e^{\eta t}$  及  $C(x) = cx$  时, 由 (24) 得到

$$T_0^* = \frac{1}{\eta} \log [c(\alpha + r - \eta) / R_0] \tag{27}$$

再将 (27) 代入 (25), 得

$$x_{T_0}^* = \frac{(r - 2\eta)}{4\eta} c \beta^2 \frac{e^{-(r-2\eta)\tau}}{1 - e^{-(r-2\eta)\tau}} \tag{28}$$

最后, 得到地块价格为

$$V = \frac{1}{4} c^2 \beta^2 \frac{e^{-(r-2\eta)\tau}}{1 - e^{-(r-2\eta)\tau}} e^{-r T_0^*} \tag{29}$$

#### 4 结论

我们给出了一般权函数下的最优维修计划及地块价格的计算公式。这对在我国刚刚起步的地块上房产交易, 科学的评价地块价格与进行最佳的维修有一定的实际意义。当然, 在社会主义制度下应如何合理地解决这个问题是需要进一步研究的问题。

## 参 考 文 献

- [1] Sweeney J L, *Journal of Economic Theory*, 8 (1974), 111—188.
- [2] 板谷 雄二等, 计测自动制御学会论文集, 18 (1982), 306—307.
- [3] Suresh P S, Gerald L T, *Optimal Control Theory Applications to Management Science*, Boston, Martinus Nijhoff Publishing, 1981, 32.

# Maximum Principle Application in Evaluation of Land Value

Yang Xiaoxian

(*Department of Mathematics*)

### Abstract

By using the maximum principle introduced by Pontryagin, this paper discusses problems of optimal maintenance investment programme of a building on the land and the evaluation of land value under a general weight function.

**Key words:** optimal control, management system of economic, application of control theory, evaluation of land value.

# 载流等离子体中的静磁 Vortex

陈 银 华

(近代物理系)

## 摘 要

研究载流等离子体中的静磁对流胞模,导出了描述非线性静磁对流胞模的方程。并且利用 Ларичев-Резник 方法求得该方程的偶极 Vortex 解。

**关键词:** 载流等离子体, 静磁对流胞模, 偶极 Vortex。

**中图法分类号:** O533

## 1 引言

近年来,人们对于磁化等离子体中的非线性低频波进行了广泛的研究。<sup>[1-3]</sup>低频模的非线性发展将会形成二维的规则结构,即 Vortex。各种不同运动速度的 Vortex 将捕获与它相近速度运动的粒子,并携带这些粒子横越磁场运动,从而导致了等离子体的反常输运。在以往的研究中,都假定平衡等离子体是静止的。然而,在实际等离子体系统中,往往是电子成分相对于离子成分以一定速度运动。

本文研究载流等离子体中的非线性静磁模。众所周知,磁化等离子体中存在一支垂直于磁场传播的寻常模,其电场分量平行于外磁场。它是一支纯电磁模,不涉及等离子体的密度扰动。这支寻常模除了有高频的电磁波分支外,还存在类似于静电对流胞<sup>[4]</sup>的零频率电磁分支。即电磁对流胞模<sup>[5]</sup>。由于这种模的电场分量比它的磁场分量小得多,所以又称静磁对流胞模。

我们首先讨论静磁模的线性理论,然后导出描述非线性静磁模的方程,最后采用 Ларичев-Резник 方法<sup>[6]</sup>求出该非线性方程的偶极 Vortex 解。

## 2 静磁对流胞模的线性理论

我们考察磁化载流等离子体。本底磁场  $B_0$  沿  $e_z$  方向,  $e_z$  为  $z$  轴的单位向量。等离子体电子相对于离子以速度  $V_0 = V_0 e_z$  运动。描述静磁对流胞模的方程组为

1989年4月10日收到。

$$\frac{\partial V_z}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla V_z = -\frac{e}{m} E_z + \frac{1}{c} [\mathbf{V} \times \mathbf{B}]_z + \mu \nabla^2 V_z - \nu V_z \quad (1)$$

$$[\nabla \times \mathbf{B}]_z = \frac{4\pi}{c} j_z \quad (2)$$

这里  $V_z$  是电子的纵向速度,  $\mu$  为剪切粘滞系数,  $\nu$  为电子-离子平均碰撞频率. 考虑到静磁对流胞模是极低频模, 在方程 (2) 中略去了位移电流项. 由于离子荷质比小, 可以忽略离子的流动, 于是扰动电流可近似写成

$$j_z = -enV_{z1} \quad (3)$$

扰动磁场和电场可表示成

$$\mathbf{B} = \nabla A_z \times \mathbf{e}_z \quad (4)$$

$$E_z = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} \quad (5)$$

其中  $A_z$  为矢量势的纵向分量,  $n$  为电子的密度. 将 (3) 和 (4) 式代入 (2), 可以求得电子纵向扰动速度

$$V_{z1} = \frac{c}{4\pi en} \nabla^2 A_z \quad (6)$$

将 (5) 和 (6) 代入线性化后的 (1) 式, 考虑到扰动量只依赖于  $x, y$ , 最后可得

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 A_z = \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} \frac{\partial A_z}{\partial t} + \mu \nabla^4 A_z - \nu \nabla^2 A_z \quad (7)$$

令扰动量为  $\exp(i(\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r} - \omega t))$  形式,  $\mathbf{k}_\perp = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ , 于是由 (7) 式可以求得静磁对流胞模的色散关系<sup>[5]</sup>

$$\omega = \frac{-ik^2 c^2 (\mu k^2 + \nu)}{\omega_{pe}^2 + k^2 c^2} \quad (8)$$

可以证明, 这支零频率电磁波的电场分量较之磁场分量小得多, 所以称它为静磁模<sup>[5]</sup>.

### 3 非线性静磁对流胞方程

对于静磁模, 电子的横向扰动速度来源于电子纵向运动速度  $\mathbf{V}_z$  与横向扰动磁场的耦合

$$\mathbf{V}_{\perp 1} = \frac{V_z \mathbf{B}}{B_0} = \frac{V_z}{B_0} \nabla A_z \times \mathbf{e}_z \quad (9)$$

由上式知, 在静磁模中, 粒子在垂直于  $\mathbf{B}_0$  平面内的运动完全类似于粒子在静电对流胞模中的运动 (在静电对流胞模中,  $\mathbf{V}_{\perp 1} = -\frac{c \nabla \varphi \times \mathbf{e}_z}{B_0}$ ) 也是一种对流运动.

将 (6) 及 (9) 式代入 (1) 式, 最后可以求得描述非线性静磁对流胞模的方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 A_z + \frac{V_z}{B_0} (\nabla A_z \times \mathbf{e}_z) \cdot \nabla^2 A_z = \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} \frac{\partial A_z}{\partial t} + \mu \nabla^4 A_z - \nu \nabla^2 A_z \quad (10)$$

其中  $\omega_{pe} = \left(\frac{4\pi ne^2}{m}\right)^{1/2}$  为等离子体振荡频率. 为简单起见, 我们令  $\mu = \nu = 0$ , 于是方程 (10)

式变成

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla^2 - \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} \right) A_z + \frac{V_0}{B_0} (\nabla A_z \times \mathbf{e}_z \cdot \nabla) \nabla^2 A_z = 0 \quad (11)$$

#### 4 非线性方程的 Vortex 解

引入坐标变换  $\eta = y - ut$ , 则  $\frac{\partial}{\partial t} = -u \frac{\partial}{\partial \eta}$ ,  $u$  为常数, 称为 Vortex 速度。于是, 方程

(1.1) 变成

$$-u \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \nabla^2 - \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} \right) A_z + \frac{V_0}{B_0} (\nabla A_z \times \mathbf{e}_z) \nabla^2 A_z = 0 \quad (12)$$

将上方程写成泊松括号形式

$$\left[ \nabla^2 A_z + \frac{B_0 u}{V_0} \cdot \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} x, \frac{V_0}{B_0} A_z + ux \right] = 0 \quad (13)$$

其中

$$[f, g] = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial \eta} - \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \eta}$$

由泊松括号的性质, 方程 (13) 可写成

$$\nabla^2 A_z + \frac{B_0 u}{V_0} \cdot \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} x = F \left( \frac{V_0}{B_0} A_z + ux \right) \quad (14)$$

其中  $F$  为其自变量的任意函数, 遵从求 Vortex 解的标准方法<sup>[6]</sup>, 设  $F$  为线性函数,  $F(W) = cW$ ,  $c$  为常数。引入极坐标  $r, \theta$ ,  $r^2 = x^2 + \eta^2$ , 圆心在坐标原点半径为  $a$  的圆 ( $a$  为自由参量, 称 Vortex 的半径) 将极坐平面分成内区 ( $r < a$ ) 和外区 ( $r > a$ )。于是方程 (14) 在内区和外区分别为

$$\nabla^2 A_z = -k^2 \left( A_z + \frac{B_0 u}{V_0} x \right) - \frac{B_0 u}{V_0} \cdot \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} x \quad (r < a) \quad (15)$$

$$\nabla^2 A_z = p^2 \left( A_z + \frac{B_0 u}{V_0} x \right) - \frac{B_0 u}{V_0} \cdot \frac{\omega_{pe}^2}{c^2} x \quad (r > a) \quad (16)$$

其中要求  $k^2 > 0$ ,  $p^2 > 0$ 。由解的局域性要求, 当  $r \rightarrow \infty$  时,  $A_z \rightarrow 0$ , 于是由 (16) 可以求得

$$p^2 = \omega_{pe}^2 / c^2 \quad (17)$$

由解的正则性及局域性要求, 最后求得偶极 Vortex 解<sup>[1,2,6]</sup>

$$A_z = \left[ AJ_1(kr) - \left( 1 + \frac{\omega_{pe}^2}{c^2 k^2} \right) \frac{B_0 u}{V_0} r \right] \cos \theta \quad (r < a) \quad (18)$$

$$A_z = BK_1(pr) \quad (r > a) \quad (19)$$

积分常数  $A, B$  可由  $A_z$  和  $\nabla^2 A_z$  在  $r = a$  处的连续性要求求得

$$A = \frac{\omega_{pe}^2 B_0 ua}{c^2 k^2 V_0 J_0(ka)}, \quad B = -\frac{B_0 ua}{V_0 K_1(pa)}$$

于是静磁模的偶极 Vortex 解最后可写成

$$A_z = \frac{B_0 ua}{V_0} \left[ \frac{\omega_{pe}^2}{k^2 c^2} \cdot \frac{J_1(kr)}{J_1(ka)} - \left( 1 + \frac{\omega_{pe}^2}{k^2 c^2} \right) \frac{r}{a} \right] \cos \theta \quad (r < a) \quad (20)$$

$$A_z = -\frac{B_0 u a}{V_0} \frac{K_1(kr)}{K_1(ka)} \cos\theta \quad (r > a) \quad (21)$$

其中  $J_1$  和  $K_1$  分别为第一类贝塞尔函数和麦克唐纳函数。

由  $\frac{\partial A_z}{\partial r}$  在  $r = a$  处的连续性可以求得

$$\frac{J_2(ka)}{kJ_1(ka)} = -\frac{K_2(ka)}{pK_1(ka)} \quad (22)$$

对于已知的  $p$ , 可以由方程 (22) 确定  $k$ , 所以称 (22) 为 Vortex 解的色散关系。有关偶极 Vortex 解的图可参阅文献[1]和[6]。

## 5 结论

本文研究了载流等离子体中的线性和非线性静磁对流胞, 导出了描述非线性静磁对流胞模的方程, 并采用 Ларичев-Резник 方法求得它的偶极 Vortex 解。这种静磁对流胞模类似于静电对流胞模, 它们都使等离子体粒子横越磁场发生对流运动, 从而导致了等离子体的反常输运。Dawson 等人<sup>[4]</sup>曾采用粒子模拟方法对非线性静电对流模进行过计算, 发现扩散是类 Bohm 型的。由于静磁模与静电模的类似性, 可以预见, 静磁对流胞模引起的扩散也具有同样的性质。

最后必须指出, 本文所研究的静磁 Vortex, 仅当电子相对于离子以不等于零的速度运动时才存在。正是电子的流动速度与扰动磁场的耦合使得粒子在垂直于本底磁场的运动具有对流的性质, 另外, 电子流动速度不能太大, 以致于电子流产生的磁场对本底磁场的影响可以略去不计。

本工作得到等离子体研究会的支持。特此致谢。



### 参 考 文 献

- [1] Taniuti T *etal.*, *J. phys.Soc.Jap.*, **50** (1981), 980,
- [2] Meiss T. *etal.*, *Phys. Fluids*, **26**(1983), 990.
- [3] Mikhailovskii A B, *et al.*, *Plasma. Phys. Contr. Fusion*, **29** (1987) ,  
No.1, 1.
- [4] Okuda H, and Dawson J M, *Phys.Fluids*, **16**(1973), 408.
- [5] Cheng Chu *etal.*, *Phys.Rev.lett.*, **41**(1978), 653.
- [6] Ларичев Б А, и Резник Г М, Докл. А Н, СССР, **231**(1976), 1077.

## The Magnetostatic Vortex in Current-Carring plasmas

Chen Yinhua

(Department of Modern physics)

### Abstract

The magnetostatic convective cell mode is investigated. The non-linear equation that governs the dynamics of the magnetostatic convective cell is derived. By using the Larichev-Reznik method, the dipole Vortex solution of the nonlinear equation is found.

**Key words:** current-carrying plasma, magnetostatic convective cell,  
dipole vortex.

# 因子分析—光度法测定芳香类化合物

夏四清 潘忠孝 张懋森 刘信安 石乐明 李志良

(中国科学技术大学)

(中国科学院化工冶金研究所)

## 摘 要

测定了 $\alpha$ -萘酚、 $\alpha$ -萘胺、2,7-二羟基萘和2,4-二甲氧基苯甲醛混合体系的紫外光谱,用目标因子分析方法直接对混合体系紫外光谱数据进行处理,成功地确定了混合体系的物种数、物种种类以及各物种的含量。讨论了波长范围、波长间隔选择对计算结果的影响。并将结果同偏最小二乘法做了比较。

**关键词:**  $\alpha$ -萘酚,  $\alpha$ -萘胺, 2,7-二羟基萘, 2,4-二甲氧基苯甲醛, 目标因子分析, 分光光度法。

**中图法分类号:** O 655.29

## 1 前言

$\alpha$ -萘酚 (NAP),  $\alpha$ -萘胺 (NAA), 2,7-二羟基萘 (DHN) 和 2,4-二甲氧基苯甲醛 (DMO) 等芳香类化合物, 都是重要的染料中间体或有机合成试剂。虽然它们在紫外区都有吸收, 但由于吸收光谱的严重重叠, 单纯用紫外分光光度法是不可能测定其混合体系的。

因子分析 (Factor Analysis) 是一种能从数据中抽取多种有用信息的多元统计方法, 是化学计量学 (Chemometrics) 的一个重要分支。目标因子分析 (Target Factor Analysis, 简称 TFA) 是由 Malinowski 等发展起来的一种在化学研究中很有用的因子分析方法<sup>[1]</sup>。我们用目标因子分析方法对上述芳香类化合物的混合体系的紫外吸收数据进行处理, 在不做任何分离的情况下, 成功地确定了混合体系中的物种数目、物种种类以及物种组分的含量。为了进一步验证方法的可靠性, 我们将部分计算结果与偏最小二乘法 (PLS) 所得结果做了比较, 二者有较好的一致性。

1990年1月4日收到。

\* 国家自然科学基金资助课题。

## 2. 基本原理

因子分析的一般步骤可描述为实验数据矩阵的准备—因子数的确定—目标检验确定物种类型—计算出各物种组分的含量。

实验数据阵的准备是为了获得适合于因子分析的数据矩阵。在一多组分吸光体系中，设各组分的吸光度在一定的测试条件下符合比耳定律，且各组分之间线性无关，那么，各组分的吸光度具有加和性：

$$A_{\lambda k} = \sum_{j=1}^n \epsilon_{\lambda j} C_{j k} \quad j = 1, 2, 3 \dots n \quad (1)$$

用矩阵表示为

$$[A] = [E][C] \quad (2)$$

$\lambda$  代表波长， $k$  代表特定的混合体系， $j$  代表物种； $[A]$  是实验数据阵， $[E]$  为行阵， $[C]$  为列阵。为完成对数据矩阵 $[A]$ 的分解，先求出它的协方差矩阵

$$[Z] = [A]^T[A] \quad (3)$$

这时总能找到一个 $[Q]$ 使 $[Z]$ 对角化

$$[Q]^{-1}[Z][Q] = [\lambda_j \delta_{j k}] = [\lambda] \quad (4)$$

$$\delta_{j k} = \begin{cases} 0 & \text{当 } j \neq k \text{ 时} \\ 1 & \text{当 } j = k \text{ 时} \end{cases} \quad (5)$$

$\lambda_j$  为 $[Z]$ 的第 $j$ 个本征值， $[Z]Q_j = \lambda_j Q_j$ ， $Q_j$  是 $[Q]$ 的第 $j$ 列，叫本征向量。因为 $Q_j$  彼此之间正交，因此 $[Q]^{-1} = [Q]^T$ 。据式(3)得

$$\begin{aligned} [Q]^{-1}[Z][Q] &= [Q]^{-1}[A]^T[A][Q] \\ &= [Q]^T[A]^T[A][Q] = [U]^T[U] \end{aligned}$$

这里

$$[U] = [A][Q] \quad (6)$$

可写成

$$[A] = [U][Q]^T \quad \text{与 (2) 相比}$$

$$[Q]^T = [C], [U] = [E] \quad (7)$$

从式(6)和(7)可计算出相应的行阵和列阵，进而可得到 $[A]$ 的复原阵，完成抽象复原步骤。由于实验误差的不可避免，并不是所有的本征向量都是有意义的，只有那些对应于较大本征值的本征向量对于吸收数据才是有贡献的。为了确定有贡献的本征向量的个数，长期的研究实践已提出一些有意义的误差判据<sup>[1, 2-6]</sup>：

$$RE = \left[ \frac{\sum_{j=n+1}^s \lambda_j^0}{w(s-n)} \right]^{1/2} \quad (8)$$

$$IE = \left[ \frac{n \sum_{j=n+1}^s \lambda_j^0}{[ws(s-n)]} \right]^{1/2} \quad (9)$$

$$IND = RE / (s-n)^2 \quad (10)$$

$$ER = \lambda_j^0 / \lambda_{j+1}^0 \quad (11)$$

$$REV = \lambda_j / ((w - j + 1)(s - j + 1)) \quad (12)$$

由于实验误差的存在, 确定体系中吸光物种数时, 应根据多种误差判据来综合考虑, 不能单凭某一种判据进行判断。

确定吸光物种数 (假定为  $n$ ) 之后, 所得到的相应的行阵  $[E^*]$  和列阵  $[C^*]$  均是纯数学上的抽象结果, 没有明确的物理意义。为了确认物种种类, 就需要对抽象的行阵  $[E^*]$  进行目标变换, 主要内容包括:

首先找到目标检验向量  $\bar{E}_i$  ( $i = 1, 2, 3 \dots n$ )。根据化学理论、分析经验或直觉等, 猜测所研究的混合体系中可能包含的纯组分物种, 然后, 测定这些纯组分在相同的测试条件下的吸收光谱, 用线性回归方法求出其吸光系数来构成目标向量  $\bar{E}_i$ , 用以模拟一个真实的基本因子。

其次是求出目标变换向量  $T_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ )。根据第  $i$  个目标检验向量按下式可算出第  $i$  个变换向量  $T_i$ ,

$$T_i = [\lambda^*]^{-1} [E^*]^T \cdot \bar{E}_i \quad (13)$$

式中

$$[\lambda^*] = \begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & & 0 \\ & 1/\lambda_2 & \\ 0 & & 1/\lambda_n \end{bmatrix} \quad (14)$$

$[E^*]^T$  是抽象行阵的转置。

最后求有物理意义的向量,

$$\bar{E}_i = [E^*] T_i \quad (15)$$

如所模拟的真实基本因子  $\bar{E}_i$  确实是一个真实因子, 则式 (15) 所进行的复原将是成功的, 换言之,  $\bar{E}_i$  中每一个元素都应在实验误差范围内与  $\bar{E}_i$  中的每一个对应的元素相符。反之, 则表明  $\bar{E}_i$  不是一个真实向量, 它所表征的因子在体系中不存在。在混合体系中, 可以单独地对每一具体的吸光物种进行目标检验, 这是目标因子分析用来鉴别吸光物种种类的优点所在。为了帮助物种类型的鉴别, 已提出了一些行之有效的目标误差判据<sup>[1, 2]</sup>。

$$RELI = \left( 1 - \frac{(RET)^2 - (RET)_{s.s.t.}^2}{(AET)^2} \right)^{1/2} \quad (16)$$

$$SPOIL = RET/REP \quad (17)$$

一般情况下, SPOIL 函数值小于 6.0, 而  $RELI \geq 0.5$  时, 目标被认为是可接受的。

为了确定体系中各物种的含量, 将经过目标检验的目标向量所对应的变换向量  $T_i$  进行组合就可得到目标变换矩阵

$$[T] = [T_1, T_2, \dots, T_n]$$

然后求出变换后的新的列阵  $[C] = [T]^{-1} [C^*]$ , 这时,  $[C]$  阵就代表各混合体系中各吸光物种的含量。变换后新的行阵  $[E] = [E^*] [T]$ 。

由  $[E]$  和  $[C]$  可得新的复原阵  $[A]$ , 它在实验误差范围内等于原数据矩阵, 即  $[E][C] = [A] \approx [A]$ , 这时因子数  $n$ , 行阵  $[E]$  和列阵  $[C]$  都已具有明确的物理或化学意义。

### 3 实验

**试剂** 实验所用的  $\alpha$ -萘酚、 $\alpha$ -萘胺、2,7-二羟基萘、邻苯二甲酸二丁酯(DBP)、水杨酸甲酯(MSA)和2,4-二甲氧基苯甲醛均为分析纯。称取适量的上述样品用95%的乙醇配成所需浓度作标准储备液。

**仪器** DMS-200型紫外可见分光光度计;选用的工作参数:扫描范围193.95—306.45nm,扫描速度100nm/min,平滑常数1.0sec,狭缝宽度0.8nm;用以采集数据的IBM PC/AT微机带有80286-10CPU和80287-10协处理器(co-processor),通过IEEE-488双向接口同DMS-200连接。联机系统框图如图1。

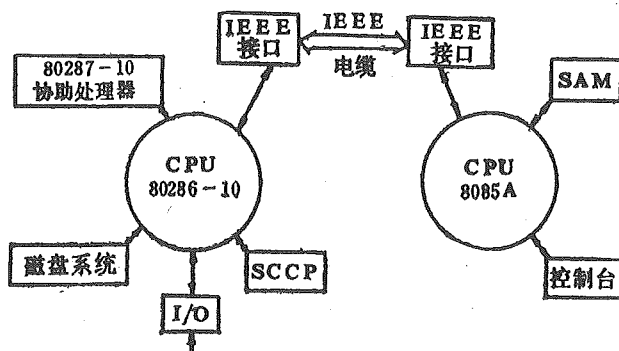


图1 DMS-200与IBM PC/AT机联机系统示意图

为了采集光谱数据,采用从VARIAN公司购进的扫描指令软件包(Scan Command Code Package简称SCCP)。因子分析程序用BASIC语言编写,在IBM Super/XT微机上运行。

**实验步骤** 吸取不同量的各组标准储备液组成一系列的待测模拟混合试样,从193.95—306.45nm,每隔0.5nm,用SCCP将所测试的光谱数据通过IEEE-488双向接口从DMS-200光度计上传送到AT微机的硬盘中,再通过SCCP把这些光谱文件从二进制转换成可读性文件,然后调用一系列辅助程序和因子分析程序计算。

### 4 结果与讨论

**四种有机物的紫外光谱** 四种有机物的紫外吸收光谱如图2所示,其混合物的紫外光谱如图3所示。从图可以看出,它们的紫外吸收光重叠严重,要想在不做任何分离的情况下,直接用常规方法去测定混合体系各吸光物种的浓度是不可能的。

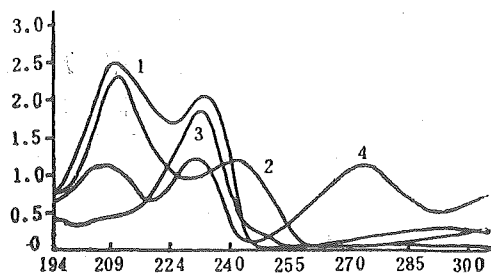


图2 四种有机物的紫外光谱

- 1 NAP(9.600ppm); 2 NAA(6.7616ppm)  
3 DHN(3.376ppm); 4 DMO(12.2144ppm)

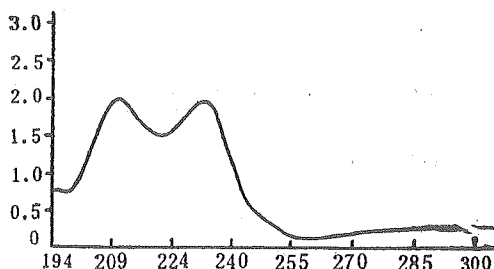


图3 混合物的紫外光谱

- NAP(2.8800ppm); NAA(2.0285ppm)  
DHN(1.3504ppm); DMO(1.2214ppm)

**波长范围对计算结果的影响** 为了检查波长范围的选择对分析结果的影响,我们采用相同的波长间隔,不同的波长选择范围(波范),对同一套混合样品进行计算,所得结果列于表1中。

表1 波长范围选择对计算结果的影响\*

样品 No	组分	实验值 浓度 (ppm)	计算结果(回收率)			No	实验值 浓度 (ppm)	计算结果(回收率)		
			波范1 (%)	波范2 (%)	波范3 (%)			波范1 (%)	波范2 (%)	波范3 (%)
1	NAP	0.3840	96.95	93.88	99.48	2	1.1520	95.33	94.11	105.08
	NAA	0.3381	94.42	108.34	96.79		1.6904	100.39	103.69	104.27
	DHN	0.3376	126.24	91.81	123.97		0.3376	143.11	102.31	118.56
	DMO	0.6107	97.62	101.75	108.18		1.8322	98.99	100.63	96.03
3	NAP	1.1520	101.80	99.96	99.98	4	1.9200	98.68	97.40	100.54
	NAA	1.0142	100.23	108.61	94.85		1.6904	98.94	104.85	101.51
	DHN	1.6880	113.14	100.71	120.92		1.0128	125.80	101.85	113.28
	DMO	0.6107	92.57	100.04	113.48		0.6107	94.27	102.91	167.23
5	NAP	1.9200	97.16	96.44	101.10	6	1.5360	96.67	95.86	107.85
	HAA	0.8452	96.25	103.37	109.23		2.5356	103.27	105.46	107.11
	DHN	0.3376	157.12	113.10	128.78		0.3376	141.41	100.92	135.86
	DMO	1.5268	96.90	98.98	87.56		3.0536	101.49	102.45	81.49

\* 波范1指306.45nm—241.45nm, 波范2指306.45nm—246.45nm,  
波范3指256.45nm—196.42nm, 间隔均为5nm。

从表1可见,对于此类混合体系,波长范围的选择对计算结果产生严重的影响。波长范围1和波长范围2只相差5个nm,而计算结果差别大。如果不是事先知道其组分,确定最佳波长范围是件较难的事,这给因子分析用于此类混合体系的实物分析带来一定的困难。因此在遇到这类体系时最好以组成相似的已知合成样品作为参照来选择合适的计算波长范围。

**波长间隔对计算结果的影响** 为了解波长间隔选择对计算结果的影响,我们保持相同的波长范围,只改变波长间隔对同一套混合样品进行计算,所得结果列于表2中。

表2 波长间隔选择对计算结果的影响\*

样品 组分	实验值 浓度(ppm)	计算结果(回收率%)			实验值 浓度(ppm)	计算结果(回收率%)				
		间隔1	间隔2	间隔3		间隔1	间隔2	间隔3		
1	NAP	0.3380	93.63	92.81	96.65	2	1.1520	93.47	94.68	93.99
	NAA	1.0142	105.27	105.78	105.02		0.3381	106.29	107.53	106.67
	DHN	1.0128	103.59	101.15	102.88		1.0128	104.12	102.76	103.49
	DMO	1.8322	102.59	102.95	102.63		3.0536	100.57	100.46	100.61

续表

3	NAP	2.8800	100.64	100.70	101.09	4	0.9600	95.70	96.62	95.58
	NAA	0.3381	110.38	110.19	110.42		1.3523	107.70	105.86	107.95
	DHN	1.3504	103.43	103.92	103.81		2.5320	100.65	102.01	99.69
	DMO	2.4429	101.78	101.62	101.41		0.6107	101.09	99.77	101.67
5	NAP	0.7680	93.16	94.10	93.18	6	2.8800	98.95	99.03	99.12
	NAA	1.3523	104.83	105.02	104.30		2.0285	106.09	106.14	105.30
	DHN	2.0256	102.35	101.73	102.69		1.3504	99.36	99.20	101.53
	DMO	4.5804	101.35	101.32	101.36		1.2214	100.07	99.96	99.54

\* 间隔 1 为 2.0nm, 间隔 2 为 5.0nm, 间隔 3 为 6.0nm 波长范围为 306.45-246.45nm.

从表 2 可以看出, 波长间隔的改变对计算结果影响不大, 在保证准确度的前提上, 选择尽可能大的波长间隔可减小计算工作量。

**实验数据的因子分析结果** 对几套混合样品的实验数据进行因子分析, 所得结果给出信息情况基本相同, 现将其中一组结果列于表 3 中。

表 3 实验数据的因子分析结果

No	$\lambda^*$ ( $\times 10^4$ )	RE ( $\times 10^2$ )	IE ( $\times 10^2$ )	IND ( $\times 10^4$ )	ER	REV ( $\times 10^4$ )	MISFIT*
1	59638.39	3.6223	1.2074	5.6599	49.95	509.73	108.00
2	1193.88	1.3697	0.6457	2.7954	7.48	12.436	103.00
3	159.52	0.3791	0.2189	1.0530	14.28	2.0717	30.00
4	11.16	0.0251	0.0167	0.1002	602.75	0.1861	0.00
5	0.0185	0.0207	0.0154	0.1293	1.73	0.0004	0.00
6	0.0107	0.0172	0.0140	0.1910	1.83	0.0003	0.00
7	0.0059	0.0147	0.0130	0.3685	2.01	0.0003	0.00
8	0.0029	0.0145	0.0137	1.4485	1.07	0.0002	0.00
9	0.0027						

\* 代表本征值, MISFIT 也是一种误差判据。

从表 3 中可以见到, 在  $n=4$  之后, IE 的值已基本趋于稳定;  $n=4$  时, IND 值为最小, ER 值有一折点; REV 值从  $n=4$  之后则显著变小且大体趋于稳定;  $n=4$  时, MISFIT 值为零, 且在  $n=4$  之后均为零; RE 值在  $n=4$  时为  $2.51E-4$ , 综合考虑这些判据, 可以判断在此套混合样品中, 因子数为 4, 这与实验结果完全相符。

**数据矩阵的目标检验** 在确定混合物的吸光物种数 ( $n=4$ ) 之后, 对可能存在于体系的各个组分进行目标检验, 以确定所存在的物种种类。用在相同测定条件下测得各待定物种在各波长处的吸光系数构成该物种的目标, 对这些目标进行检验。所得结果列于表 4 中。

表 4 数据矩阵的目标检验结果

	NAP	NAA	DHN	DMO	DBP	MSA
AET ( $\times 10^4$ )	1.4167	2.2863	1.4868	0.6287	6.9228	41.080
REP ( $\times 10^4$ )	1.1834	1.2742	1.3603	0.7367	0.3780	1.2430
RET ( $\times 10^5$ )	7.7895	18.983	6.0016	3.8409	0.6913	410.61
SPOIL	0.6583	1.4868	0.4412	0.5213	18.288	33.033
RELI	1.9784	1.2432	1.9384	4.1181	0.3710	0.0689

从表 4 中可以看出, NAP, NAA, DHN, DMO 这四种组分对应的目标的 SPOIL 函数值都较小(最大者不超过 1.5) RELI 函数值都较大, 可以断定这四个目标都是真实目标(存在于所研究的混合体系); 而 DBP (邻苯二甲酸二丁酯) 和 MSA (水杨酸甲酯) 所对应的目标的 SPOIL 函数都较大, RELI 函数值都较小(最大不超过 0.4), 说明这两个目标为非真实目标, 这些情况与实验情况完全相符。

**样品测定结果及其与偏最小二乘法的比较** 本法对近二十个混合样品进行测定, 结果列于表 5 中, 其中将部分样品的结果与偏最小二乘法 (PLS) 所得结果作了比较, 列于表 6 中。

表 5 样品的计算结果

	NAP	NAA	DHN	DMO		NAP	NAA	DHN	DMO
实验值	0.3840	0.3381	0.3376	0.6107		0.3380	1.0142	1.0128	1.8322
1 计算值	0.3605	0.3663	0.3100	0.6214	2	0.3137	1.0728	1.0245	1.8862
回收率	93.88	108.34	91.81	101.75		92.81	105.78	101.15	102.95
实验值	1.1520	0.3381	1.0128	3.0536		0.9600	1.6904	1.6880	1.5268
3 计算值	1.0907	0.3636	1.0407	3.0676	4	0.8797	1.7902	1.6012	1.5799
回收率	94.68	107.53	102.76	100.46		91.64	105.91	94.68	103.48
实验值	1.1520	1.0142	1.6880	0.6107		1.1520	1.6904	0.3376	1.8322
5 计算值	1.1515	1.1015	1.7000	0.6109	6	1.0842	1.7528	0.3454	1.8437
回收率	99.96	108.61	100.71	100.04		94.11	103.69	102.31	100.63
实验值	1.9200	0.3381	1.6880	1.8322		1.9200	1.0142	0.3376	3.0356
7 计算值	1.8916	0.3644	1.7290	1.8457	8	1.8440	1.0504	0.3802	3.0497
回收率	98.52	107.77	102.43	100.74		96.04	103.57	112.63	99.87
实验值	1.9200	1.6904	1.0128	0.6107		2.8800	2.0285	1.3504	1.2214
9 计算值	1.8701	1.7707	1.0315	0.6285	10	2.8520	2.1530	1.3396	1.2209
回收率	97.40	104.75	101.85	102.91		99.03	106.14	99.20	99.96



续表

实验值	2.8800	0.3381	1.3504	2.4429	1.9200	0.8452	0.3376	1.5268
11 计算值	2.9000	0.3726	1.4034	2.4824	12 1.8517	0.8737	0.3818	1.5112
回收率	100.70	110.19	103.92	101.62	96.44	103.37	113.10	98.98
实验值	0.9600	1.3523	2.5320	0.6107	1.5360	2.5356	0.3376	3.0536
13 计算值	0.9276	1.4316	2.5830	0.6093	14 1.4724	2.6740	0.3407	3.1283
回收率	96.62	105.86	102.01	99.77	95.86	105.46	100.92	102.45
实验值	1.9200	0.3381	1.6880	1.8322	0.7680	1.3523	2.0256	4.5804
15 计算值	1.8547	0.3661	1.7113	1.8593	16 0.7227	1.4202	2.0606	4.6411
回收率	96.60	108.29	101.38	101.48	94.10	105.02	101.73	101.32

\*实验值、计算值浓度以ppm计;回收率以%计。

表 6 目标因子分析法 (TFA) 同偏最小二乘法 (PLS) 所得结果 (回收率) 比较\*

	NAP	NAA	DHN	PMO		NAP	NAA	DHN	DMO
实验值	0.3804	0.3381	0.3376	0.6107	1.1520	1.0142	1.6880	0.6107	
1 TFA法	93.88	108.34	91.81	101.75	2 99.96	108.61	100.71	100.04	
PLS法	110.15	103.15	96.92	89.58	101.40	107.38	99.97	92.77	
实验值	1.1520	1.6904	0.3376	1.8322	1.9200	1.6904	1.0128	9.6107	
3 TFA法	94.11	103.69	102.31	100.63	4 97.40	104.75	101.85	102.91	
PLS法	101.90	103.61	95.34	97.55	99.53	104.92	99.20	101.25	
实验值	0.9600	1.3523	2.5320	0.6107	1.5360	2.5356	0.3376	3.0536	
5 TFA法	96.62	105.86	102.01	99.77	6 95.68	105.46	100.92	102.45	
PLS法	99.43	106.95	98.38	94.65	100.61	104.77	97.18	100.69	
实验值	1.9200	0.3381	1.6880	1.8322	0.7680	1.3523	2.0256	4.5804	
7 TFA法	96.60	108.29	101.38	101.48	8 94.10	105.02	101.73	101.32	
PLS法	98.83	107.34	96.55	96.37	101.59	103.90	97.49	98.16	
实验值	2.8800	2.0285	1.3504	1.2214	0.9600	1.6904	1.6880	1.5268	
9 TFA法	99.03	106.14	99.20	99.96	10 91.64	105.91	94.86	103.48	
PLS法	98.05	104.51	99.93	99.84	98.94	104.08	97.38	98.74	

\* 实验值以ppm计,其余为回收率以%计。

从样品计算结果及与偏最小二乘法的比较可以看出,十几个混合样品中96%以上的组分回收率在100±15%之内,与PLS法有较好的一致性,由此可见计算结果的可信程度是相当大的。

## 参 考 文 献

- [1] Malinowski E R Howery D G, Factor Analysis [in Chemistry, John Wiley, New York, 1980.
- [2] Malinowski E R, *Anal. Chim. Acta*, **103** (1978), 339.
- [3] Malinowski E R, *Anal. Chem.*, **49** (1977), 612.
- [4] Malinowski E R, *Acs Symposium, No.52, Chemometrics: Theory and Application*, **1** (1977), p53.
- [5] Malinowski E R, *Journal of Chemometrics* **1**(1987), 33.
- [6] 何锡文等, 分析化学, **14** (1986) , 34.

## Determination of Aromatic Compounds by Factor Analysis—Spectrophotometry

Xia Siqing    Pan Zhongxiao    Zhang Maosen

(*University of Science and Technology of China*)

Liu Xinan    Shi Leming    Li Zhiliang

(*Institute of Chemical Metallurgy, Chinese Academy of Science*)

### Abstract

The UV-spectra data of mixture solutions, which consist of  $\alpha$ -naphthol,  $\alpha$ -naphthylamine, 2,7-dihydroxynaphthalene and 2,4-dimethoxybenzaldehyde, are measured. Number, identities and concentrations of every compound involved are determined successfully by directly using target factor analysis technique. The effects of wavelength range and sampling interval selected on the results have been discussed. The results obtained have been compared with those by Partial Least Square method.

**Key words:**  $\alpha$ -naphthol,  $\alpha$ -naphthylamine, 2,7-dihydroxynaphthalene, 2,4-dimethoxybenzaldehyde, target factor analysis, spectrophotometry.

# 一种多次单输入多输出时间域 模态分析方法的参数研究\*

张培强 高进民

(近代力学系)

## 摘 要

系统地研究了一种多次单输入的空间—时间回归方法中的参数设置问题, 给定了设定原则及数据, 且形成了适于微机的软件。模拟计算结果显示了本算法的可行性和准确性。

**关键词:** 模态分析, 识别技术, 空间时间回归。

**中图法分类号:** O327

## 1 引言

八十年代以来针对大型复杂结构, 各种多输入—多输出的参数识别技术的研究日趋活跃。这一技术对于提高识别精度, 尤其对于重根、密集模态、大阻尼、低信噪比的情况, 以及缩短实验周期, 均有十分显著的改善。张培强等<sup>[1]</sup>于1986年提出了一种多次单输入的空间—时间回归方法, 即利用奇异值分解算法使解有更高的精度和稳定性。尤其对于密集模态, 使用OAMCF(总体置信因子)可以作为确定真实模态阶数的一种有效方法。用简单可行的多次单激励构成含有多激励信息的系统矩阵, 可大大节省设备, 降低实验成本。有效地使用此方法, 必须恰当正确地选择一组计算机用户参数。如用户参数采用不当可能会产生较大的识差, 甚至导致错误。本文用理论分析和计算机仿真试验, 就如何选择一组适合于微机上运行的用户参数以及此法在大阻尼(与一般金属材料, 即相对阻尼比为0.001~0.01相比较而言)、密集模态以及噪音污染等环境下的适应能力进行考查和研究, 并给出有参考价值的参数选择。

## 2 基本原理<sup>[7]</sup>

考虑  $n$  自由度线性系统自由振动方程

1989年10月10日收到。

\* 国家自然科学基金资助项目。

$$M\{\ddot{x}\} + C\{\dot{x}\} + K\{x\} = \{0\} \quad (1)$$

$\{\ddot{x}\}$ ,  $\{\dot{x}\}$ ,  $\{x\}$  分别为加速度、速度和位移响应矢量。M、C、K 依次代表质量、阻尼和刚度矩阵。做变换

$$\{y\} = \begin{Bmatrix} x \\ \dot{x} \end{Bmatrix} \quad \text{记 } A = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -M^{-1}K & -M^{-1}C \end{bmatrix}$$

代入 (1) 可得

$$\{\dot{y}\} = A\{y\} \quad (2)$$

其通解为

$$\{y\} = e^{[A]t} \{y(0)\} \quad (3)$$

$\{y(0)\}$  为对应初始状态的常数阵列。

对于本系统，存在  $2n$  个成对共轭的线性无关特征向量，

$$A = [S][A][S]^{-1} \quad (4)$$

$[S]$  为  $A$  之特征向量矩阵，又称模态矩阵， $[A]$  为特征值组成的对角阵。

令  $\{y(t)\} = [S]\{Z(t)\}$  代入 (4)、(3)，可得

$$\{y(t)\} = [S]e^{[A]t} \{Z(0)\} \quad (5)$$

假设在  $K$  个点激励， $m$  个点测振，激出的模态数为  $M$ 。则可得到物理坐标下单位脉冲响应为

$$\{x(t)\} = [F]e^{[A]t} \{Z(0)\} \quad (6)$$

其中  $\{x(t)\}_{K \times 1}$  为  $\{y(t)\}$  之前  $K$  行元素构成的响应。 $[F]_{K \times 2M}$  为模态矩阵之子矩阵。

$$e^{[A]t} = \begin{bmatrix} \diagdown & & \\ & e^{\lambda_i t} & \\ & & \diagup \end{bmatrix}_{2M \times 2M}, \quad \{Z(0)\}_{2M \times 1}$$

若  $\Delta t$  为采样间隔，记  $t = n\Delta t$ ，

$$u_i = e^{\lambda_i \Delta t}, \quad [u] = \begin{bmatrix} \diagdown & & \\ & u_i & \\ & & \diagup \end{bmatrix}, \quad \text{则在第 } i \text{ 点激励产生的响应为}$$

$$\{x_i(n)\} = [F][u]^n \{Z(0)\}_i \quad (7)$$

可通过不同点的脉冲响应，构成求解特征值特征向量的方程。

令  $P$  为使  $PK \geq 2M$  的最小整数，记

$$[G] = \begin{bmatrix} [F] \\ \vdots \\ [F][u]^P \end{bmatrix}_{(P+1)K, 2M} \quad (8)$$

由于  $[G]$  的行数大于列数，故一定存在一个秩为  $K$  的矩阵  $[Q]_{K, (P+1)K}$ ，使得

$$[Q][G] = [0]_{K, 2M}$$

可令， $[Q] = [B(p) \cdots B(0)]$ ， $[B(0)] = [I]$

$[B(i)]_{K, K}$   $i = 1, 2, \dots, p$  而不失一般性。代入 (8) 式，经变换可得到关于响应  $\{x(t)\}$  的自回归方程。

$$\sum_{s=1}^P [B(s)] \{x(n-s)\} = -\{x(n)\} \quad (9)$$

由(9)可求得系统矩阵,  $[B(i)], i=1, 2, \dots, p$ .

经过  $[B]$  的友矩阵 (companion matrix) 构成标准特征值问题<sup>[2]</sup>.

令

$$[\bar{B}] = \begin{bmatrix} -[B(1)] & -[B(2)] & \dots & -[B(p)] \\ [I] & 0 & \dots & 0 \\ 0 & [I] & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & [I] \end{bmatrix}_{PK, PK}$$

则

$$[\bar{B}] \begin{bmatrix} [F]_i u^{p-1} \\ \vdots \\ [F]_i u_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [F]_i u^{p-1} \\ \vdots \\ [F]_i u_0 \end{bmatrix} u_i \quad (10)$$

由计算出的特征向量矩阵中找到  $[F]$ , 它由  $K$  维  $2M$  个共轭的模态向量构成。由(10)式求得  $u_i$ , 则第  $r$  阶模态阻尼和固有频率可由下式求出

$$\text{令 } e^{\lambda_r \Delta t} = a_r + i b_r, \lambda_r = \alpha_r + i \beta_r,$$

$$\begin{aligned} \alpha_r &= \frac{1}{2\Delta t} \ln(a_r^2 + b_r^2) \\ \beta_r &= \frac{1}{\Delta t} \text{tg}^{-1} \left( \frac{b_r}{a_r} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

设  $\lambda_r = -\zeta_r \omega_r + i \omega_r \sqrt{1 - \zeta_r^2}$ , 则

$$\begin{aligned} \omega_r &= \sqrt{\alpha_r^2 + \beta_r^2} \\ \zeta_r &= -\frac{\alpha_r}{\sqrt{\alpha_r^2 + \beta_r^2}} \end{aligned} \quad (12)$$

$\omega_r$  为无阻尼时第  $r$  阶固有频率,  $\zeta_r$  为阻尼比。

为求  $m$  维模态, 只要通过(6)式求出模态坐标下的初始条件  $\{Z(0)\}$ , 再由  $\{Z(0)\}$  与  $m$  的维模态向量间简单关系即可得到。

### 3 用户参数设置的研究

在本方法的程序实现过程中, 有许多参数需要设置。这些参数间是相互制约和影响的。例如, 在相同的识别环境下, 选择不同的参数, 能导致识别结果相差很大。因此, 选择合适的用户参数对于整个算法的准确性和可行性都是至关重要的。根据理论分析及大量模拟计算结果, 可将主要参数归结如下。

#### (1) 多激励次数 (NE)

采用多激励 (多输入)、多输出的方法, 使得被激励结构能量分布均匀、信噪比高、物理概念也较合理。若用单激励的方法可能使激励位置落在某一阶模态的节点或节线上, 因此, 而丢失该阶模态的信息。这对于大型复杂结构或噪音严重污染的情况尤为显著。

表 1 是对应单激励和三次激励条件下, 不同噪信比的模拟识别结果。在计算机仿真计算中

假设二自由度线性系统，其固有频率和阻尼分别为  $f_1 = 700\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = 0.01$ ,  $f_2 = 900\text{Hz}$ ,  $\zeta_2 = 0.02$ . RT 为噪信比 (%),  $\Delta f$ ,  $\Delta \zeta$  分别为固有频率及阻尼比识别值与各自理论值的相对误差。

表 1 的结果表明，当噪信比一定时，多激励的优越性表现得十分明显。

表 1 不同激励次数条件的模拟识别结果

RT (%)	NE	$f_1$ (%)	$\zeta_1$ (%)	$f_2$ (%)	$\zeta_2$ (%)
2	1	700.2 0.029	0.010 0.0	899.9 0.111	0.020 0.0
	3	700.0 0.0	0.010 0.0	900.0 0.0	0.020 0.0
5	1	701.4 0.200	0.009 10	898.1 0.211	0.019 5.0
	3	700.1 0.014	0.011 10	900.1 0.111	0.020 0.0
8	1	701.9 0.271	0.008 20	896.8 0.356	0.019 5.0
	3	700.1 0.300	0.011 10	900.1 0.111	0.020 0.0
15	1	702.1 0.014	0.006 40	892.7 0.811	0.017 15.0
	3	700.2 0.029	0.011 10	900.4 0.444	0.020 0.0
18	1	701.7 0.243	0.004 60	890.6 1.040	0.015 25.0
	3	700.0 0.0	0.011 10	900.1 0.111	0.021 5.0

注 在  $f_1, \zeta_1, f_2, \zeta_2$  后面括号内的值是它们各自相对误差的百分比，即  $\frac{\Delta f_i}{f_i}(\%)$ ,  $\frac{\Delta \zeta_i}{\zeta_i}(\%)$ 。

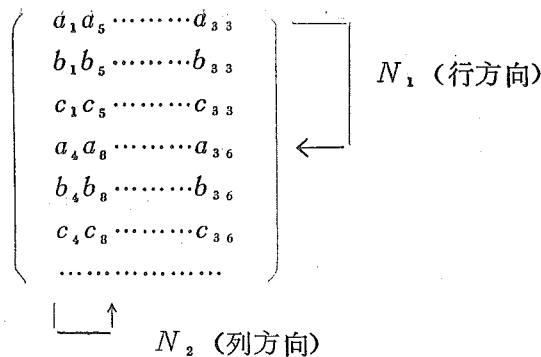
(2) 测量站数 (NM)，响应矩阵行、列方向上的时间延迟  $N_1, N_2$ 。

在实际测量中，由于试验仪器和条件的限制，实际的测量点数往往受到限制，本文借助于“虚拟测点”的概念<sup>[5, 6]</sup>，构成超定的数据矩阵。

具体做法是：将  $K$  个原始测点的响应信号时间延迟  $N_1$  时刻，看成一组 ( $K$  个) 新的测点——虚拟测点的响应，和原始测点的响应一起填入数据矩阵中。

在某些情况下，为使每个测点的时间记录长度中包含更多的低频成分，相应地在响应矩阵的列方向时间延迟  $N_2$ 。

例如，对一个三通道测量系统，取  $N_1 = 3, N_2 = 4$  时的响应矩阵形式为



采用虚拟测点及时间延迟后,为不丢失模态信息保证识别精度,还应注意使响应数据尽量连续。例如取回归阶数为2时,取 $N_1 = 2 + 1 = 3$ ,就可以保持数据在行方向上的连续。对于 $N_2$ 的选择,不仅要使数据连续,而且 $N_2 \cdot \Delta$ ( $\Delta$ 为采样间隔)不应是所需识别的各阶模态周期的整倍数。否则采样点总是在该波的不同位置,信息不全,不会有好的识别结果。此外 $N_2$ 的取值也不宜太大。因为 $N_2$ 过大采样率不易实现,同时因为单位脉冲为衰减响应,数据取得越后,信噪比相对变低。根据我们的经验,考虑到综合效果,建议 $N_2$ 取1或3为好。

### (3) 采样间隔( $\Delta$ )和时间记录长度(NDN)

若记采样率为 $SF$ ,则有 $SF = \frac{1}{\Delta}$ 。由数字信号理论可知, $SF$ 应满足采样定律

$$SF \geq 2f_{\max} \quad (13)$$

$f_{\max}$ 为感兴趣频带内的最大频率值。

但在本算法中,由于数据在列方向上的延迟 $N_2$ ,因此相应的公式为

$$SF \geq 2N_2 f_{\max}$$

例如,取 $N_2 = 5$ ,对 $f_1 = 4\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = 0.001$ ,  $f_2 = 20\text{Hz}$ ,  $\zeta_2 = 0.01$ ,  $\Delta = 0.015\text{s}$ 进行识别。

此时 $SF = \frac{1}{\Delta} \approx 66 \geq 2f_{\max} = 40$ ,但小于 $2N_2 f_{\max} = 200$ ,故识别结果为 $f_1 = 3.998\text{Hz}$ ,

$\zeta_1 = 0.00104$ ,而 $f_2, \zeta_2$ 识别不出来。

若改为 $\Delta = 0.003\text{s}$ , $N_2 = 2$ 时,满足 $SF \geq 80$ ,此时识别结果 $f_2 = 19.993\text{Hz}$ , $\zeta_2 = 0.01018$ ,而 $f_1, \zeta_1$ 又识别不出来。原因涉及到另一个参数记录长度的选择。

根据本算法公式,上例参数下所需采样总数NDN为42。此时对应总的记录时间为

$$\Delta_{\text{总}} = 42 \times \Delta = 0.126\text{s}$$

而对应 $f_1 = 4\text{Hz}$ , $T_{\max} = 0.25\text{s}$ ,可见, $\Delta_{\text{总}}$ 不能包含 $f_1$ 完整的信息,故识别不出来。

根据经验及计算结果,一般选取NDN应至少包含两个基波的长度才行。

总之, $\Delta$ 与NDN的选择,既要满足采样定律,又要包含至少两个基波。

### (4) 计算自由度数(NDOF)

在实际测量中,不可避免地要混入噪音,

$$\{x(t)\} = \sum_{i=1}^{2N} \{\psi_i\} e^{\lambda_i t} + \{N(t)\} \quad (14)$$

$\{N(t)\}$ 为测量噪音。它可以看成是由许多“噪音模态”迭加而成的。为使噪音有出口，采用 NDOF 值大于真实激励出的模态数的方法，即选择“超定数学模型”给噪音留下出口，再以模态置信因子（后面讨论）来检验真伪。NDOF 的取值主要根据噪音污染的程度以及所研究范围内激励出的模态数来定。一般说来 NDOF 取值愈大，频率的计算精度愈高。而噪音对阻尼的影响远比对频率的影响大得多<sup>[6]</sup>。举一个极端例子： $RT = 20\%$ ， $f_1 = 700\text{Hz}$ ， $\zeta_1 = 0.01$ ， $f_2 = 900\text{Hz}$ ， $\zeta_2 = 0.02$  分别取 NDOF 为 4 和 24，识别结果分别为：

NDOF	$f_1$	$\frac{\Delta f_1}{f_1} \%$	$\zeta_1$	$\frac{\Delta \zeta_1}{\zeta_1} \%$	$f_2$	$\frac{\Delta f_2}{f_2} \%$	$\zeta_2$	$\frac{\Delta \zeta_2}{\zeta_2} \%$
4	791.336	13	0.0835	735	801.068	5.4	0.0806	353
24	698.511	0.2	0.01198	19.8	901.151	0.13	0.02133	6.6

表 2 不同计算自由度的模拟识别结果

RT (%)	NDOF	$f_1$ (%)	$\zeta_1$ (%)	$f_2$ (%)	$\zeta_2$ (%)
5	8	714.6 2.09 <sub>2</sub>	0.050 400	905.1 0.567	0.009 55
	12	704.0 0.571	0.012 12	897.0 0.300	0.020 0
	16	701.4 0.200	0.009 10	900.5 0.056	0.020 0
	18	699.3 0.100	0.010 0	900.1 0.011	0.020 0
	24	700.1 0.014	0.011 10	900.1 0.011	0.020 0
8	8	728.6 4.090	0.720 620	907.0 0.788	0.005 75
	12	707.2 1.030	0.012 20	895.3 0.522	0.023 15
	18	702.6 0.371	0.009 10	901.1 0.122	0.022 10
	24	700.1 0.014	0.011 10	900.1 0.011	0.020 0
12	18	705.0 0.714	0.009 10	901.7 0.190	0.023 15
	24	700.1 0.014	0.001 10	900.3 0.022	0.020 0
15	24	700.2 0.028	0.010 10	900.4 0.044	0.020 0
18	8	684.5 2.210	— —	925.7 2.86	— —
	12	719.1 2.720	0.008 20	893.7 0.744	0.038 90
	18	708.4 1.200	0.008 20	902.7 0.300	0.024 20
	24	700.0 0.0	0.014 10	900.1 0.011	0.021 5
	30	698.5 0.214	0.012 20	901.2 0.133	0.021 5

注 “—” 表示识别不出。

(%)同表 1 注。



NDOF 值增大, 使计算精度提高, 但同时也会导致计算时间成平方倍比例增加。根据我们的模拟计算及有关文献推荐<sup>[3-5]</sup>, 一般取 NDOF 为激出模态数的 2—4 倍就可以满足一定的精度。另一方面, 从模态置信因子设置来看, NDOF 与测量站数也有一定的关系。表 2 给出不同噪信比条件下, 不同 NDOF (NM 一定) 的识别结果。其中  $f_1 = 700\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = 0.01$ ,  $f_2 = 900\text{Hz}$ ,  $\zeta_2 = 0.02$ , 测量站 NM 为 6。计算结果表明, 在激出的模态数一定的条件下, 允许的误差范围内, 没有必要无限制地放大 NDOF。

如频率误差在千分之几, 阻尼比在百分之几内, NDOF 与 NM 有如下关系:

$$\begin{aligned} RT \leq 5\%, & \quad \text{NDOF} = (2-3)NM \\ RT \leq 100\%, & \quad \text{NDOF} = (3-4)NM \\ RT \leq 15\%, & \quad \text{NDOF} = 4NM \end{aligned}$$

### (5) 主值( $\bar{K}$ )选取

由采样定律, 若被识别系统的振动频率在  $f_{\min}$  和  $f_{\max}$  之间, 第  $i$  阶固有频率  $\omega_{di}$  须满足

$$2\pi f_{\min} \leq \omega_{di} = \frac{1}{\Delta} \text{tg}^{-1} \left( \frac{b_i}{a_i} + \bar{K}\pi \right) \leq 2\pi f_{\max} \quad (15)$$

$$\bar{K} = 0, 1, 2, \dots$$

对于某一  $\bar{K}$  值, 应有

$$\frac{\bar{K}\pi}{\Delta} \leq 2\pi f_{\min}$$

$$\frac{(\bar{K}+1)\pi}{\Delta} \geq 2\pi f_{\max}$$

可解得

$$\frac{f_{\max}}{f_{\min}} \leq \frac{\bar{K}+1}{\bar{K}}$$

或

$$\bar{K} \leq \frac{f_{\min}}{f_{\max} - f_{\min}} \quad (16)$$

对于不同的频带及不同处理要求(低通、带通), 可以选择不同的  $\bar{K}$  值。

### (6) 模态置信因子 MCF, OAMCF 的设定

前面提到, 为了提高识别精度而采用“超定数学模型”。模态置信因子 MCF (Modal Certification Factor) 以及 OAMCF (Overall MCF) 的提出就是来判别真实模态和噪音模态。

设响应矩阵为  $R = \begin{bmatrix} R_H \\ \dots \\ R_L \end{bmatrix}$ ,  $R_H, R_L$  分别表示上、下部。取定某一值  $\Delta_1$ ,  $R_L$  是由  $R_H$  的相应元素经时间延迟  $\Delta_1 = d\Delta$  所致。理论上, 无噪时的第  $i$  阶模态  $\psi_i$ , 其上、下部  $\psi_{iH}, \psi_{iL}$  应满足关系

$$\psi_{iL} = \psi_{iH} e^{\lambda_i \Delta_1}$$

取

$$MCF = \frac{\psi_{i,r}}{\psi_{i,r} e^{\lambda_i A_i}} \quad (17)$$

MCF 定义为模态置信因子。理论上，对于真实模态应满足幅值为 1，相角为零。对于噪音模态，由于其随机性，一般不满足这个关系。由此来辨别真伪态。可以人为地规定衡量标准（如实、虚部大小，或幅值、相角限制），在每阶模态中，满足这个标准的百分数定义为总体模态置信因子（OAMCF）。在本算法实况中，按 MCF 的幅值、相位规定三个标准

- 1) Amp  $1.00 \pm 0.05$ , ph.  $\pm 10^\circ$
- 2) Amp  $1.00 \pm 0.1$ , ph.  $\pm 15^\circ$
- 3) Amp  $1.00 \pm 0.4$ , ph.  $\pm 30^\circ$

模拟计算结果及 [6] 文中对真实圆盘结构的识别表明，MCF 可以有效地识别出真实模态和计算模态。但是，由于用 MCF 判断仅是真实模态存在的必要条件，因此，有时需根据经验加上物理判断做为辅助手段来区分真伪。

### (7) 多次平均数 (NS)

对噪音敏感是识别技术中的一个需要解决的问题。单纯采用增大 NDOF 的方法，虽然可以提高计算精度，但也增加了运算时间及内存。本方法采用系统矩阵中的元素多次平均计算，在不增加 NDOF 条件下，可以增强抗噪能力。这是因为采用多次平均的方法可以克服噪音分布的随机性，使系统趋于稳定。

以 
$$B = \frac{1}{NS} [B_1 + B_2 + \dots + B_{NS}] \quad (18)$$

作为系统矩阵。

表 3 不同平均次数的模拟识别结果

NS	$f_1$	(%)	$\zeta_1$	(%)	$f_2$	(%)	$\zeta_2$	(%)
2	19.959	0.205	0.012	20	39.90	0.250	0.012	20
4	19.957	0.215	0.013	30	39.886	0.285	0.009	10
6	19.963	0.185	0.013	30	39.855	0.306	0.008	20
8	19.971	0.145	0.011	10	39.880	0.300	0.009	10
10	19.980	0.100	0.010	0.0	39.884	0.290	0.010	0.0
12	19.973	0.135	0.008	20	39.854	0.363	0.010	0.0
14	19.972	0.140	0.008	20	39.909	0.228	0.010	0.0
16	19.967	0.165	0.008	20	39.938	0.155	0.009	10
18	19.970	0.150	0.009	10	39.965	0.087	0.009	10
20	19.977	0.115	0.009	10	39.948	0.105	0.010	0.0

(%)同表 1 注。

表 3 是多次平均结果。其中  $RT = 5\%$ ,  $f_1 = 20\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = 0.01$ ,  $f_2 = 40\text{Hz}$ ,  $\zeta_2 = 0.01$  的识别结果。

在 IBM-PC/XT (附 8087 协处理器) 运算时，取  $NDOF = 12$ ，计算时间为 2 min，取  $NDOF = 24$  时，时间为 13min，而在  $NDOF = 12$  条件下，增加一次平均次数的时间为 45s。

#### 4 模拟计算

在模拟计算中,除了上节所说的选择合理的参数外,还采取两项技术措施以提高算法识别精度。一是采用奇异值分解技术求解系统的特征值提高计算精度;二是预处理中采用数字滤波处理,将无关的噪音滤掉。带通处理可以大大减少计算机内存及运算时间,更适合微机应用。从模拟结果来看,本算法在密集模态、大阻尼以及一定的噪音污染环境下,均有较理想的识别结果。

表4是对分离模态的识别。其中  $RT = 5\%, 10\%$ ,  $f_1 = 800\text{Hz}$ ,  $f_2 = 1200\text{Hz}$ ,  $f_3 = 1400\text{Hz}$ ,  $f_4 = 1600\text{Hz}$ ,  $f_5 = 1800\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = \zeta_4 = \zeta_5 = 0.01$ 。

表5是对大阻尼情况下进行的识别结果其中  $RT$  为零。分四种情况:其中,

A情况,  $RT = 0$ ,  $f_1 = 800\text{Hz}$ ,  $\zeta_1 = 0.1$ ,  $f_2 = 1200\text{Hz}$ ,  $\zeta_2 = 0.2$ ;

B情况,  $RT = 0$ ,  $f_3 = 800\text{Hz}$ ,  $\zeta_3 = 0.3$ ,  $f_4 = 1000\text{Hz}$ ,  $\zeta_4 = 0.4$ ;

C情况,  $RT = 0$ ,  $f_5 = 800\text{Hz}$ ,  $\zeta_5 = 0.5$ ,  $f_6 = 900\text{Hz}$ ,  $\zeta_6 = 0.6$ ;

D情况,  $RT = 0$ ,  $f_7 = 900\text{Hz}$ ,  $\zeta_7 = 0.7$ ,  $f_8 = 700\text{Hz}$ ,  $\zeta_8 = 0.8$ ;

表4 分离模态的模拟识别结果

RT(%)	$f_1$	(%)	$\zeta_1$	(%)	$f_2$	(%)	$\zeta_2$	(%)	$f_3$	(%)
5	799.3	0.089	0.010	0.0	1200.7	0.058	0.011	10	1401.3	0.093
10	798.8	0.150	0.011	10	1201.4	0.116	0.011	10	1400.2	0.014

RT(%)	$\zeta_3$	(%)	$f_4$	(%)	$\zeta_4$	(%)	$f_5$	(%)	$\zeta_5$	(%)
5	0.011	10	1599.8	0.013	0.010	0.0	1800.4	0.022	0.010	0.0
10	0.010	0.0	1598.8	0.075	0.010	0.0	1800.6	0.033	0.010	0.0

(%)同表1注。

表5 大阻尼的模拟识别结果

A	$f_1$	(%)	$\zeta_1$	(%)	$f_2$	(%)	$\zeta_2$	(%)
	799.9	0.013	0.10	0.0	1206.9	0.575	0.197	0.2
B	$f_3$	(%)	$\zeta_3$	(%)	$f_4$	(%)	$\zeta_4$	(%)
	800.2	0.025	0.30	0.0	1001.9	0.190	0.398	0.5
C	$f_5$	(%)	$\zeta_5$	(%)	$f_6$	(%)	$\zeta_6$	(%)
	800.0	0.0	0.50	0.0	905.2	0.578	0.603	0.5
D	$f_7$	(%)	$\zeta_7$	(%)	$f_8$	(%)	$\zeta_8$	(%)
	900.4	0.044	0.70	0.0	698.7	0.186	0.801	0.1

(%)同表1注

表 6 密集模态的模拟识别结果

情况	RT (%)	$\Delta f$	$f_1$ (%)	$\zeta_1$ (%)	$f_2$ (%)	$\zeta_2$ (%)
A	0	0.1	5.000 0.00	0.0200 0.0	5.100 0.00	0.0201 0.5
		0.01	5.000 0.00	0.0200 0.0	5.012 0.04	0.0196 2.0
B	0.1	0.1	30.00 0.00	0.0199 0.5	30.10 0.00	0.0200 0.0
		0.05	30.01 0.03	0.0201 0.5	30.03 0.07	0.0199 0.5

(%)同表1注

表 7 不同 RT 的模拟识别结果

RT (%)	$f_1$ (%)	$\zeta_1$ (%)	$f_2$ (%)	$\zeta_2$ (%)
2	700.0 0.0	0.010 0.0	900.0 0.0	0.020 0.0
5	700.1 0.014	0.010 0.0	900.1 0.011	0.020 0.0
8	700.1 0.014	0.011 10	600.1 0.011	0.020 0.0
12	700.2 0.029	0.011 10	900.3 0.030	0.020 0.0
15	700.2 0.029	0.011 10	900.4 0.044	0.020 0.0
18	700.2 0.029	0.011 10	904.6 0.511	0.024 20

(%)同表1注

表 6 是对密集模态的识别结果。其中：

A 情况，  $RT=0$ ，  $f_1=5\text{Hz}$ ，  $f_2=f_1+\Delta f$ ，  $\zeta_1=\zeta_2=0.02$

B 情况，  $RT=0.1\%$ ，  $f_1=30\text{Hz}$ ，  $f_2=f_1+\Delta f$ ，  $\zeta_1=\zeta_2=0.02$

表 7 是抗噪能力的检验。其中  $f_1=700\text{Hz}$ ，  $\zeta_1=0.01$ ，  $f_2=900\text{Hz}$ ，  $\zeta_2=0.02$ 。

从表 7 中结果看，在  $RT \leq 20\%$  内，本算法有一定的识别精度。

## 5 结论

经过理论分析及大量模拟计算，系统研究了本算法中有关用户参数设置的可行性和合理性，给出了设定的原则和数据，供实际识别时参考。模拟计算结果表明，本算法具有算法准确、稳定、计算省时等优点。程序的微机实现以及简单操作，为今后的实际应用提供了前景。

## 参 考 文 献

- [1] Huang T C, Zhang P Q, Feng W Q, *Journal of Modal Analysis*, 1 (1986), 1—7.
- [2] Vold H, Rockling G T, 1st Proc. of IMAC 1982, P542—548.

- [ 3 ] Vold H, Kundrat J, Rocklin G T, and Russell, R., SAE Paper Number 820194.
- [ 4 ] Vold H, Crowley J, 3rd Proc. of IMAC, 1985.
- [ 5 ] Ibrahim S R, Pappa R S, Shock and Vibration Bulletin, No.51, Part3, 1981, P43—70.
- [ 6 ] 吴勇, Ibrahim 时域法中噪音模态试验——论 ITD 法, 振动与冲击, 1986, 第 3 期。
- [ 7 ] 高进民, 一种多输入多输出时间域模态参数识别方法, 中国科技大学硕士学位论文, 1989年 6 月。

## A Parametric Study on Modal Analysis Algorithm With Multiple—Single Input and Multi—Output Space—Time Regression Method

Zhang Peiqiang      Gao Jinmin

*(Department of Precision Machinery and Instrumentation)*

### Abstract

A Multiple-Single Input and Multi-Output algorithm is presented and a parametric study for the rules data and software used in micro-computer is given. The simulated result shows that this algorithm is practical and accurate.

**Key words:** modal analysis, identification technology, space-time regression.

# 内孔挤压强化板的弹塑性分析

王朝蜀

(近代力学系)

## 摘 要

基于塑性增量理论,用有限元方法,对内孔挤压增强的板条,在冷挤压过程中孔周的弹塑性应力场和挤压后孔周的残余应力场进行了计算分析,由有限元方法获得应力解与理论解完全符合。结果表明,有限元法是计算残余应力较精确方法。

**关键词:** 残余应力,有限元,冷挤压加工。

**中图法分类号:** O344.3

## 1 引言

为了改善飞机结构中紧固孔的疲劳性能,延长飞机的安全使用寿命,航空工业部门常采用冷挤压、干涉螺接或干涉铆接等新工艺。

所谓冷挤压就是用过盈芯棒预先挤压紧固孔,通过在孔周形成受压的残余应力场及其他一些机械效果来提高紧固孔的抗疲劳性能。

围绕着提高挤压效果,改善挤压工艺,以及如何考虑利用挤压作用来进行断裂控制设计等问题,国内外进行很多工作<sup>[1]</sup>。对挤压强化机理的研究集中在两个方面:残余应力的分析和微观结构的分析。这些研究多采用实测法,如采用高精度的云纹干涉法<sup>[2]</sup>。工程计算中曾用类似问题的解析解来近似估算冷挤压构件的弹塑性分界区的半径 $r_p$ <sup>[3]</sup>。本文通过有限元方法,对一组有限宽度板条,计算中心内孔受挤压时形成的弹塑性应力场和挤压增强后的残余应力场,得到残余应力分布的结果。该结果与云纹干涉法结果<sup>[2]</sup>相比是符合的。

## 2 本构关系

当载荷有一增量时,系统内应力张量 $\{\sigma\}$ 和应变张量 $\{e\}$ 分别有增量 $\Delta\{\sigma\}$ ,  $\Delta\{e\}$ 。并有

$$\Delta\{e\} = \Delta\{e^e\} + \Delta\{e^p\}$$

其中 $e$ 表示弹性部分, $p$ 表示塑性部分。

弹性本构方程为

1989年12月6日收到。

$$\Delta\{\varepsilon^e\} = [D]^{-1} \Delta\{\sigma\} \quad (1)$$

式中  $[D]$  为弹性矩阵。

材料的屈服条件  $f(\{\sigma\}, \{\varepsilon\}) = 0$

塑性势函数  $Q(\{\sigma\}, \{\varepsilon\}) = 0$

按塑性增量理论<sup>[4]</sup>, 相关连情况  $f = Q$

按塑性势理论<sup>[4]</sup>

$$\Delta\{\varepsilon^p\} = d\lambda \frac{\partial Q}{\partial \{\sigma\}} = d\lambda \frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}} \quad (2)$$

式中  $d\lambda$  为比例常数, 其值为

$$d\lambda = \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)^T \cdot [D] \cdot \Delta\{\varepsilon\}}{H + \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)^T [D] \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)} \quad (3)$$

式中  $H$  为材料的硬化参数。

塑性本构方程为  $\Delta\{\sigma\} = [D_{e,p}] \Delta\{\varepsilon\} \quad (4)$

式中  $[D_{e,p}]$  为弹塑性矩阵, 表达式为

$$[D_{e,p}] = [D] - \frac{[D] \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right) \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)^T \cdot [D]}{H + \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)^T \cdot [D] \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}}\right)} \quad (5)$$

### 3 有限元求解过程

1) 当进行第  $n$  次加载, 完成  $r-1$  次迭代后, 得到节点位移增量  $\Delta\{\delta\}_n^{r-1}$ , 应力增量  $\Delta\{\sigma\}_n^{r-1}$  和应变增量  $\Delta\{\varepsilon\}_n^{r-1}$ 。

2) 算出总应力及等效应力, 检查该应力状态是处于加载, 卸载还是中性变载。

3) 如果是卸载, 按弹性关系 (1) 式计算。如果是加载, 应力已超过加载面, 由 (3) 式求  $d\lambda$  比例常数。再按流动法则 (2) 式, 求塑性应变增量  $\Delta\{\varepsilon^p\}$ 。由各向同性强化原理求当前加载面的位置。再求出满足平衡方程和本构关系的应力  $\{\sigma\}_n^{r-1}$ 。

4) 由上述计算得到第  $n$  次加载第  $r-1$  次迭代的应力后由下式求各节点不平衡力  $\Delta\{\phi\}_n^{r-1}$ 。

$$\Delta\{\Delta\phi\}_n^{r-1} = \int_{\Omega} [B]\{\sigma\}_n^{r-1} d\Omega - \left( \sum F + \int_{\Omega} [N]^T \cdot b d\Omega \right) \quad (6)$$

其中  $F$  为系统面力的等效节点力,  $b$  为体力,  $[N]$  为形函数,  $[B]$  为单元几何矩阵,  $\Omega$  为单元面积。

由 (6) 式求得系统各节点不平衡力后, 如果不平衡力足够小, 满足收敛条件, 则完成第  $n$  次加载, 可以进行  $n+1$  次加载。如果不满足, 按弹塑性应变分布由 (5) 式对每个单元的高斯积分点求  $[D_{e,p}]$ , 由 (7) 式求系统总刚度矩阵  $[K]$ 。

$$[K]_n^{r-1} = \sum \int_{\Omega} [B]^T [D_{e,p}]_n^{r-1} \cdot [B] d\Omega \quad (7)$$

$$[K]_r^{-1} \Delta \{\delta\}_r = \{\Delta \psi\}_r^{-1} \quad (8)$$

由(8)式解出第 $n$ 次加载第 $r$ 次迭代的各节点的位移增量,并重复上述各步,直到收敛条件满足为止。

#### 4 弹塑性 EPLAS 程序主要特点

- 1) 能计算平面应力,平面应变,三维轴对称
  - 2) 有四种屈服准则可供选择: Tresca 准则, Von-Mises 准则, Pragre-Drucker 准则, More-Coulomb 准则。
  - 3) 可以选择两种高斯积分:  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , 单元选用矩形等参元, 可选择 4 节点, 8 节点, 9 节点三种。
  - 4) 材料为理想塑性, 线性硬化, 任意幂函数硬化。
  - 5) 计算结果除给出通常节点位移、高斯积分点的应力、约束反力外, 还给出全部卸载后的残余应力和残余变形。给出每次加载后屈服点位置, 从而可以得到塑性区扩展的整个过程。
  - 6) 求解方法: 初刚度法, 切线刚度法及混合解法。
- 本程序可以在 IBM-PC XT 微机上运行, 而且只要载荷步长足够小, 迭代收敛是很快的, 程序在微机上运行一次一般三个小时左右。

#### 4 计算实例

##### 4.1 受均匀内压圆环

尺寸及网格如图 1。元素为四边形等参元。杨氏模量  $E$ , 屈服应力  $\sigma_y$ , 泊桑比  $\nu$ , 硬化系数  $H$  分别为

$$E = 2.1 \times 10^5 \text{ MPa}, \quad \nu = 0.3$$

$$\sigma_y = 240 \text{ MPa}, \quad H = 0.$$

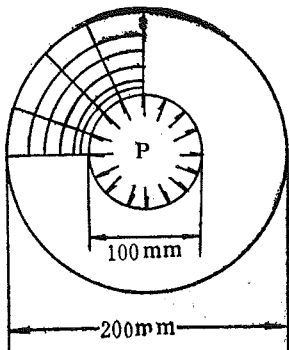


图 1 受内压的圆环

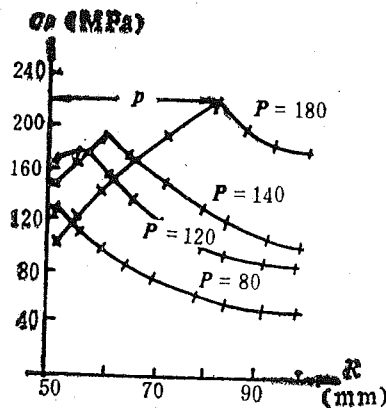


图 2 圆环在不同压力  $P$  下的  $\sigma_r$

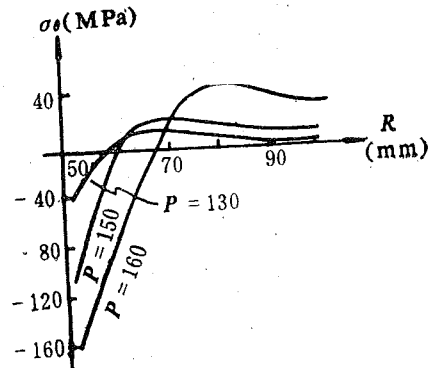


图 3 圆环卸载后残余应力  $\sigma_\theta$

本例采用 Von-Mises 准则, 计算结果如图 2 和图 3。从图 2 中可以看到不同内压  $P$  作用下,



圆环内弹塑性应力  $\sigma_\theta$  的分布情况, 图 3 是不同压力下卸载后, 圆环内留下残余应力  $\sigma_\theta$  分布的确切图象。以上结果, 有限元解与解析解基本上一致, 误差不超过 5%。如果网格划分更密些, 精度可以更进一步提高。

#### 4.2 内孔挤压增强的板条

本例给出不同  $b/R$  值的板条, 由内孔冷挤压增强所引起弹塑性应力场, 板条形状如图 4。

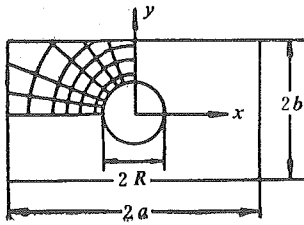


图 4 内孔挤压增强板条

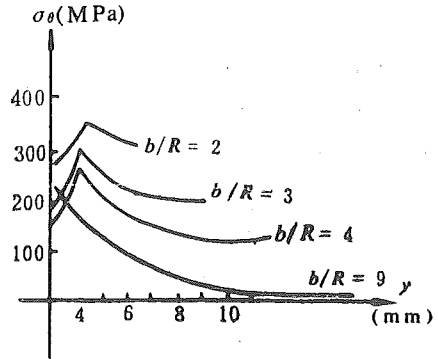


图 5 不同宽度板  $\sigma_\theta$  分布

具体尺寸为:

$$2a = 55\text{mm} \quad 2R = 6\text{mm}$$

板宽  $2b$  分别为 12、18、24、55mm

材料常数为:  $E = 7 \times 10^4 \text{MPa}$

$$\nu = 0.3, \quad \sigma_y = 500 \text{MPa}.$$

$$H = 1.0.$$

内孔半径挤压量  $\Delta\delta = 0.06\text{mm}$ 。图 5 是这四种板条内孔冷挤压到给定量  $\Delta\delta$  时, 在  $x=0, y>0$  截面产生弹塑性应力  $\sigma_\theta$  分布图。图 6 是冷挤压后, 把心棒挤出来(卸载)后, 各种尺寸板条在  $x=0, y>0$  截面留下残余应力  $\sigma_\theta$  的分布图。从以上结果, 作如下讨论

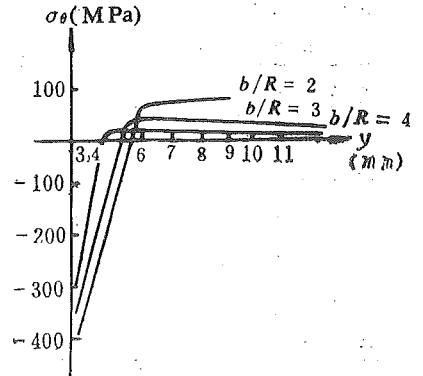


图 6 板条挤压后残余应力

(1) 本文施加挤压量的方法是, 每次把孔边位移增加到给定量的  $\frac{1}{n}$ , 即  $\Delta\delta/n$ 。  $n$  次后孔边位移为挤压量  $\Delta\delta$  值, 在后面文中称为  $n$  次加载。这样作是满足简单加载条件的, 计算中等效力  $\sigma_e$  和等效应变  $\epsilon_e$  的关系, 可由简单拉伸试验确定。如果用 Miess 准则, 等向强化的加载条件为  $\sigma_e - \sigma_y = H \left( \int d\epsilon_e^p \right)$ , 本文采用切线刚度增量法, 一般来说收敛是比较快的, 但是每次迭代, 每增加挤压值都要重新形成刚度矩阵, 再求解线性方程组, 计算机运行时间比较长。如果用初刚度法, 每加载一次只形成一次刚度矩阵, 这种算法可以节约机时, 但载荷步长大时, 收敛不好。

从 4.1 算例可以看到计算结果与理论解<sup>[6]</sup>符合得相当好, 证明本文理论分析和程序设置是正确的。

从4.2算例与文[2]所用试件尺寸与材料不同、因文[2]给出材料常数不全。缺乏试件硬化系数或拉伸曲线，二者结果无法定量比较，但从定性看，曲线变化规律基本一致。

(2) 图5为冷挤压过程中应力 $\sigma_\theta$ 分布图。用一个有过盈量的心棒挤入孔中，孔周围材料产生沿径向的膨胀，该挤压作用由孔边向板边逐渐减弱，当变形超过弹性范围时，距孔中心半径为 $\rho$ （图5曲线中 $\sigma_\theta$ 最高点的横坐标）的范围内材料进入塑性区。塑性区内 $\sigma_\theta$ 随 $r$ 增加而增加。当径向半径 $r > \rho$ 时，仍为弹性区。弹性区内应力 $\sigma_\theta$ 随 $r$ 增加逐渐衰减。在 $r = \rho$ 处为最大。

从图5可以看到板条长宽比对弹塑性应力场影响极大，板条越窄， $b/R$ 越小，应力水平越高， $y$ 轴方向塑性区面积越大。在相同的挤压量的情况下，宽板条（例： $b/R=9$ ）只在孔边出现很小的塑性区。窄板条（例： $b/R=2$ ）可能在 $y$ 轴方向塑性区接近 $(b-R)$ 长度的一半，由此可见窄板条选择适当的挤压量 $\Delta\delta$ 是提高板条疲劳强度的关键。为使 $\Delta\delta$ 选择能提高板条的强度不出现孔边裂纹，应选 $(\Delta\delta/(b-R))$ 小于板条的延伸率与安全系数 $N$ 之比，即

$$\frac{\Delta\delta}{b-R} \times 100 < \text{延伸率}/N$$

(3) 图6为心棒挤压后（卸载），板材在 $x=0, y>0$ 截面上残余应力 $\sigma_\theta$ 分布。这是一组自相平衡残余应力场，应力 $\sigma_\theta$ 在孔边为压应力，数值最大，随着离孔心距离 $r$ 增加而减小一直到变为零。然后进入弹性区变为拉应力。板内由受压区过渡为受拉区，也是材料由塑性区过渡为弹性区，存在残余应力 $\sigma_\theta$ 的这种板条，承受循环拉伸的工作载荷时，大大降低孔边应力集中区的最大应力值。如果板条孔边有裂纹存在，残余应力降低了裂端附近应力场的强度。从而延长了疲劳寿命。因此，在生产和维修飞机关键部位紧固孔时采用冷挤压技术得到一致肯定。

从图6可以看到，在同样挤压量 $\Delta\delta$ 作用下，板条越窄，残余应力越大。如果板条过窄，或者挤压量 $\Delta\delta$ 过大，卸载后孔周围的最大残余应力可能达到材料压缩屈服极限值。这种现象称为反向屈服。运用计算机可以对各种长宽比的板在不同 $\Delta\delta$ 作用下残余应力分布进行比较，选出不发生反向屈服的最佳挤压量 $\Delta\delta$ 。

本文工作得到何世平，王秀喜和刘润桐等副教授的关心和指导，特此致谢。

#### 参 考 文 献

- [1] 苏晓燕，内孔挤压强化对高强度钢疲劳裂纹起始和扩展行为的影响，航空工业部621所硕士论文，1984年8月。
- [2] 何世平等，应用波纹干涉测量冷挤压孔周残余应力分布，实验力学，2(1987)，No.3。
- [3] Poolsur S, Sharpe W N, *J. Appl. Mech.*, 45(1978), 515.
- [4] 王仁、熊祝华、黄文彬，塑性力学基础，科学出版社，1982；91。
- [5] 孟凡中，弹塑性有限变形理论和有限元方法，清华大学出版社，1985；121。
- [6] Hodge P G and White G N, *J. Appl. Mech.*, 17(1950), 180—184。

# An Elasto Plastic Analysis of Cold Expansion at Fastener Holes

Wang Chaoshu

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

The finite elements methods and incremental theory have been used to study elasto-plastic stress fields under the present process of cold working and residual stress fields after cold expansion at fastener holes. The stress results obtained by the finite element method are in excellent agreement with the theoretical results. It is found that the finite element is an excellent method for residual stress.

**Key words:** residual stress, finite elements methods, cold work.

# VQGIS—a Visual Query Language for KGIS

Wu Jiankang      Chen Xuequan

*(Department of Radio electronics)*

## Abstract

This paper presents a visual query language for knowledge-based geographic information system KGIS (VQGIS). VQGIS provides a friendly interactive icon definition utility, which defines icon sketch for all entities and procedures in KGIS and builds links between them. Port icons and window icons are also defined. Constraints for icon sentence construction are maintained as contents of icon dictionary. With the help of icon dictionary and knowledge-based data model of KGIS, the parser of VQGIS translates the icon sentences into a sequence of relational algebraic operations, frame operations and image algebraic operations. With VQGIS, users of KGIS can operate without difficulty even if they have no prior knowledge of KGIS.

**Key words:** visual language, spatial data base, geographics.

## 1 Introduction

Because of recent rapid development of computer science and geographic information system technique, GIS users are urging more sophisticated capabilities of the system. GIS users are usually not computer scientists. They do not know much about inner structure and the physical data organization. Therefore the user interfaces, specifically query languages, should be user-friendly. In other words, the design of query language should match the GIS user model; query definition should be understood by the users without any difficulty. On the other hand, one of the most important applications of

---

Received January 15, 1990.

Project is supported by the National Natural Science Fund of China.

GIS is regional planning, GIS should provide good environment for such intellectual tasks. QPF, a versatile query language for a knowledge-based geographic information system (KGIS) designed and implemented in Image Processing Laboratory, University of Science and Technology of China, is designed to meet such purposes.

The diagram of knowledge-based spatial database system KGIS is shown in Figure 1.

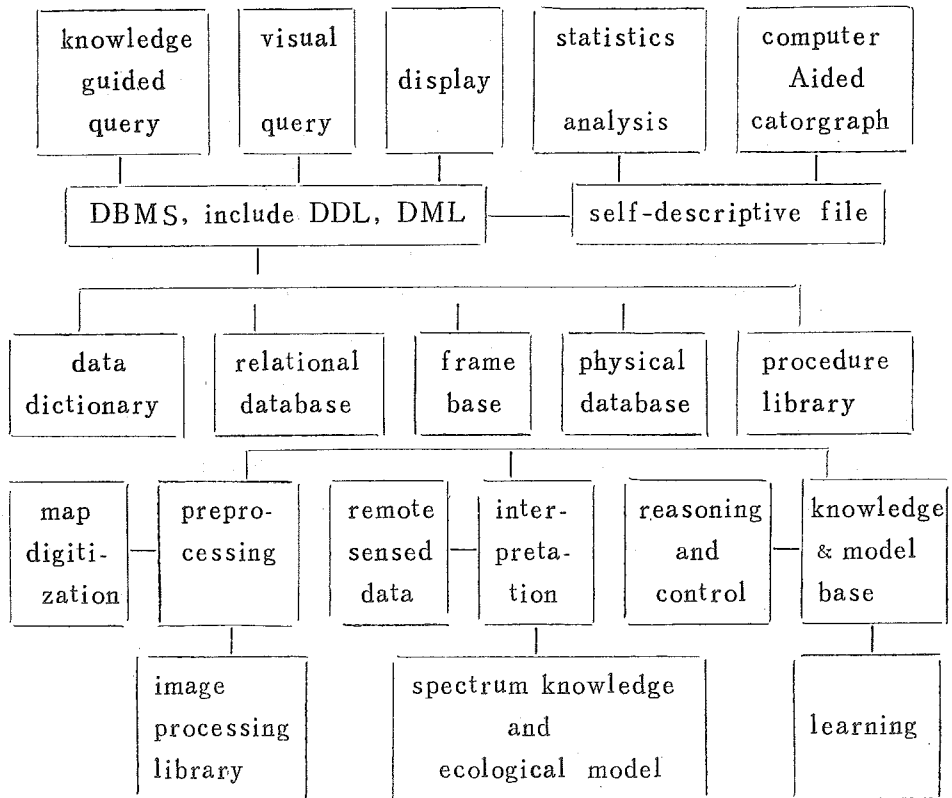


Fig 1 Block-diagram of KGIS

An knowledge-based data model relation-frame-icon is proposed for KGIS<sup>[1]</sup>. Data entries in KGIS are represented by its graphic encoding, relation, frame and the corresponding iconic representations. They are stored in individual databases and managed by a overall management system. Different representations of one data entry are linked by an unique identification number. In so doing easy access is facilitated to any representation of the data.

The query language QPF<sup>[2]</sup>, on the basis of relational algebra, image algebra and frame operations, consists of data definition language and data manipulation language. The data definition language defines the system data dictionary while the data manipulation language provides several levels of

queries: primitive data manipulation procedures, knowledge-guided query, and visual query VQGIS. In the following sections, VQGIS is to be discussed in details.

## 2 Relation-Frame-Icon Description Hierarchy

A relation-frame-icon data model was proposed for KGIS, considering the fact that there is no suitable data model for spatial database system. The model is formally defined as:

```

OBJECT-CLASS      ::=  (<ID><RELATION><FRAME><ICON>)
RELATION          ::=  (<ID><NAME><ATTRIBUTE>)
  ATTRIBUTE       ::=  (<A-NAME><A-VALUE>)
FRAME            ::=  (<F-NAME><SLOTS>)
  SLOT           ::=  (<SNAME><S-VALUES><PROCEDURES>)
    S-VALUE      ::=  (<POINTER><LIST><RANGE><DEFAULT>)
    PROCEDURE    ::=  (<IF-NEEDED><IF-ADDED>)
ICON             ::=  (<I-TYPE><I-NAME><OP-PARAMETER>
  <ASSOCIATION><SKETCH>)

```

The relation model is a well established database model. Relation algebra is a strong mathematical tool for query languages. Therefore relation is still used as the basis for a spatial database model. But relation can only describe static properties of an object. To enrich the descriptive power of the model, a knowledge representation scheme frame is adapted. Frame is object-oriented. Frame can not only well describe objects and their relationships, but also describe some domain specific knowledge used for computer-aided-planning (CAP). Frame representation is consistent with production rules, which are often used in expert systems in model-based image interpretations. By using frame mechanism image algebra operations, a basis for query language processing, are well catalogued, and therefore query language processing is much simplified.

Icon representation is the visual perspective of object class, it provides access to visual query language, which may be considered as a simple simulation for visual thinking.

The data schema for object class CITY, for example, with this data model, is as follows:

```

CITY-REL(ID, NAME, CLASS, POPULATION,...)
CITY-ICON(ID, I-TYPE = object, I-NAME, OP = region-op, SKETCH =
city-sketch)
CITY-FRAME

```

IS-A: RANGE (image primitive)

NAME: RANGE (c10)  
 IF-ADDED (print the name on the terminal)  
 IF-NEEDED (find the value from the  
 field NAME of the data dictionary)

PARENT: RANGE (c10)

CENTER: DEFAULT (integer-range 40 1000)  
 IF-NEEDED (find the coordinate of the center  
 point using procedure CENT-R)

CLASS: DEFAULT (i4)  
 IF-NEEDED (call procedure GET-CLASS)

AREA: DEFAULT (i4)  
 IF-NEEDED (call procedure AREA-R)

POPULATION: DEFAULT (integer-range 1-9999999)  
 IF-NEEDED (get the value from the table or inquire  
 the database administrator)

THROUGH: RANGE (river, road, rail)  
 IF-NEEDED (find the name list of rivers, roads and rails  
 which pass through the region)  
 IF-ADDED (print the list, display the entities on display screen)

TRANSPORTATION: RANGE (i4)  
 IF-NEEDED (find the total transportation capacity of all rivers,  
 roads and rails through the city)  
 IF-ADDED (print the sum)

Relation, frame and icon are three abstract description perspectives (attribute, semantic, visual) of object classes. For individual objects, there are descriptions of relation tuples, frame instances and images (here is encoded graphic data). Access from these three different perspectives results in three different types of query languages (ordinary query, knowledge-guided query, visual query). The descriptive hierarchy is depicted in Fig 2

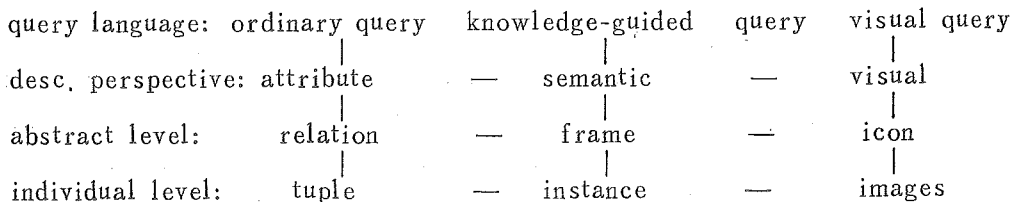


Fig. 2 Descriptive hierarchy of relation-frame-icon model

Relation tuple, frame instance, encoded graphical data are linked to each

other by a unique ID. In this model, query access from any description of physical data is all possible. Therefore, based on a relation-frame-icon-model, languages for ordinary query, knowledge guided query, visual query, spatial query can be developed.

One of the most attractive features of a relation-frame-icon model is its capability of semantic representation. The knowledge in frame is dynamic; query processing can be implemented by subgoal reasoning procedure embedded in frame slots. Because of the consistency of knowledge representation between GIS and expert system, Relation-frame-icon model can provide good environment for computer-aided planning and model-based image interpretation.

Another attractive feature of this knowledge-based data model is visual abstraction of image data using icon concept. The descriptive hierarchy in Fig.2 provides a complete description of pictorial data. This can be considered as the complement of icon theory by Chang<sup>[9]</sup>. Following this framework, the icon (which is the vocabulary of visual language) definition and visual language design can be formulated without difficulty.

### 3 Visual Query Language

The block diagram of the visual query language VQGIS and its interface to the knowledge-based pictorial database system KGIS is shown in Fig. 3.

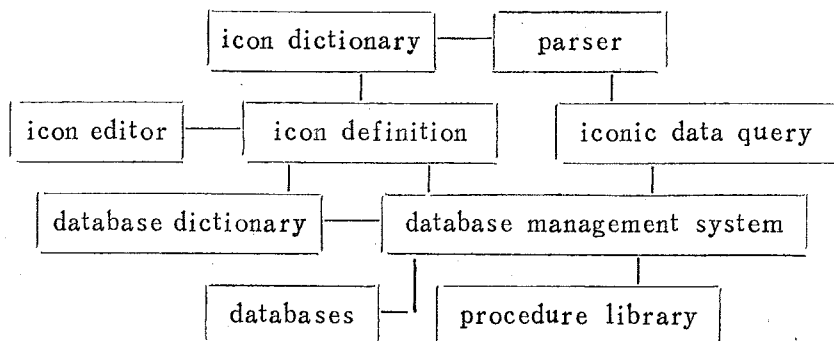


Fig 3 Block diagram of visual query language VQGIS

The visual query language mainly consists of two modules: icon definition and iconic data query. Icon definition module invokes icon editor to create icon sketches and builds links between icons and other descriptive perspectives. Iconic data query module receives user-defined iconic query sentences, analyzes them, translates them into primitive operations, executes them and gets final results. In the following two subsections, icon definition and iconic data query will be discussed respectively.

#### 3.1 Icon Definition



Icon means abstract visual description of data. It is often used to describe object classes. On the other hand, icons constitute the vocabulary of visual language. For an object class, its icon is only a visual perspective of this object class. The complete description of an object class consists of three perspectives: relational, frame and iconic, as in Fig. 2. Therefore the icon definition will concern the definition of attributes of icon itself and the association of icon to other descriptive perspectives.

#### Define-icon

icon-type | icon-name | op-parameter | sketch | association

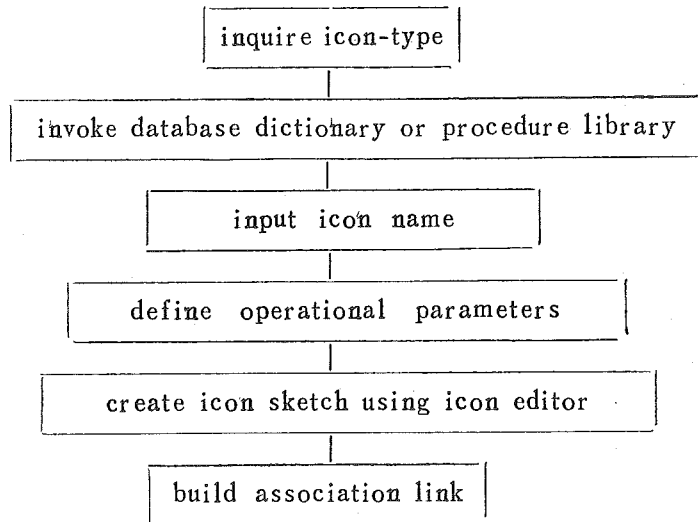


Fig 4 Flow chart of icon definition

There are four icon types: object icon, procedure icon, port icon and execution icon. Execution icons are visual query commands: query print, write (to a disk file), type, help, etc.. Port icons are used to identify input and output devices, such as map digitizer, color display, terminal screen, plotter, disk file. Object icons represent object class stored in database dictionary, which may include district boundary, road, river, etc.. Procedure icons are visual representation of procedures in system procedure library. The classes of procedures contained in procedure library are briefly listed as follows:

1) Relational operation procedures, such as Union, Set difference, Selection, Projection, Cartesian product, Intersection, Quotient, Join, Natural join.

2) Frame operation procedures, such as match a frame instance to the specified conditions, trigger of if-added procedures for local goal reasoning.

3) Image algebraic operation procedures. Image algebraic operations can be further classified into logical, geometric and combined operations.

Operational parameters of object icon and port icon specify the procedures which can perform on the object. The operation will create new object/objects.

Operational parameters of procedure icon and execution icon, on the other hand, specify the object classes to operate on, and specify the output device, disk file or buffer for the results.

Fig. 4 is a flow chart of icon definition. After the completion of icon definition, defined icon and its attributes are stored in icon dictionary.

### 3.2 Iconic Data Query

The general definition form of visual query language VQGIS can be written as:

```
EX {[ (OB1|a11=u1,...,a1i=ui) .PR1. (OB2|...) .PR2. (...) ...] .PRn.  
[...]} PORT
```

where  $O B_i$  is icon name,  $a_{ij}$  is  $j$ th attribute of the relation associated with  $O B_i$ .  $P R$ 's are procedure icons. The most often used procedure icons are: union, intersection, pass-through, to-the-east (south, north, west) of, cross, etc. Brackets are used to enhance expressive power. EX represents execution icon, while PORT port icon.

This definition convention is the visualization of knowledge-guided query language. The user defines his query by picking up icons displayed on screen and form the icon sentence. The system then interprets the icon query definition, executes a sequence of procedures. The results will then be output to the device specified by port icon. In most cases the query results are saved to a self-descriptive file together with the query definition syntax as annotation for later map design which uses computer-aided cartography (CAC) module.

For example, if we try to find all pieces of woodland planting pine situated between 300-500 meters above sea level, and the results are to be displayed on screen, the query definition will be

```
QUERY {FOREST | TYPE=pine .INT. ELEVATION | HEIGHT>300  
.INT. ELEVATION | HEIGHT<500} SCREEN
```

In this example, forest is a thematic object. Its attributes, such as the area of a piece of woodland, are to be updated during intersection with regions between 300-500 meters above sea level and appear in the results. On the contrary elevation data only effect the query results. They do not appear in the results. In query definition the thematic object is always placed in front.

To save query processing time, query optimization is necessary. For example, relational "INT" has higher priority than algebraic "INT"; the same type of entities of non-thematic object which satisfy query conditions are to be first performed on by image algebraic "UNION" operation to be converted

to one data entry. Consequently the order of operations of the above query definition is: relational intersection on "ELEVATION", algebraic union operation on pieces of lands resulted in by first operation, algebraic intersection between woodland and intermediate result. Relational selection is implicitly included in the above-mentioned operation sequence.

Guided by knowledge embedded in frames, queries based on spatial relations can be easily implemented. This can be best illustrated by an example below:

Suppose that we are looking for all rivers crossing a road B102. The query is defined as

```
QUERY {RIVER .CROSS. ROAD road-name=B102} SCREEN
```

Road B102 is a line object. The line object frame has the form as follows:

LINE FRAME:

.....

NAME:

if-needed: read the name from terminal or find the name from entry's attribute.

if-added: output the name list.

.....

CROSS:

default: id list of other line object entries.

if-needed: invoke procedure A-INT1 and find the id list.

if-added: write the result to temporary file and display on the screen.

PASS-THROUGH:

.....

To process this query, the system first check if there is a frame instance for road B102. If there is a frame instance, the value in slot "CROSS" is verified. If-needed procedure is triggered after verification failure to fill in slot "CROSS". If-added procedure is triggered at the end to produce query output. A frame instance is created if there does not exist one. Guided by knowledge presented in frames the query result seems to be straight forward.

### 3.3 Special Queries for VQGIS

Special queries of VQGIS fall into following two categories: 1) Interactive spatial queries. Users can zoom in and out, browsing through the whole area in order to find the right objects or region. They can also interactively define the region of interest. Objects within the region are then selected. 2) Queries by attributes. Objects are indexed by their attributes, for example, the area of region. The data entries with various area are

selected by the position of the cursor on the screen.

To illustrate the idea and implementation of these special query functions of the visual query language VQGIS, two examples are described as follows:

**Example 1** Find all woodland along part of Yangze river from Najing city to Wuhan city.

The user first select object 'city' and type in the name 'Najing'. After the selection of execution icon, Najing city appears on the screen. Wuhan city and Yangze river are retrieved in the same way. Now the user begins definition of region 'along part of Yangze river from Nanjing city to Wuhan city' by drawing on the screen. The last icon sentence is formed by selecting object icon WOODLAND, execution icon CONTAINEDIN and object icon CUREENT, the region of interest just interactively defined. The execution of this icon sentence results in woodland maps within the region of interest in four different scale. Zooming-in can get a close look of the woodland while zooming-out can get an overview of woodland.

**Example 2** Get the view of woodland in terms of area.

The user first selects this query function and then the object of interest WOODLAND, the attributes of interest AREA. After the execution of this icon sentence, a working window on the screen is created. QPF reads in the x-position of the cursor and maps it to the value of area, looks up the indexed relational file to find the right data entry and displays its graphic data on the screen and attributes on the terminal. With the cursor moving along x-direction, woodland with different area appears. Zooming is also possible in this case by changing the scale of graphic data and the detail of attributes.

#### 4 Conclusion and Remarks

We have discussed visual query language for knowledge-based pictorial database system VQGIS. The data description hierarchy of relation frame-icon provides a generic framework for design and implementation of VQGIS. Application practices have shown that VQGIS is suitable for users who do not know much about computer and geographic information system.

VQGIS provides friendly interfaces to users while being capable of handling both accurately defined queries and graphically defined queries.

#### References

- [1] Wu J K, *Scientia Sinica*, 1990, No. 2, 198-203.
- [2] Wu J K, Cheng Tao and Li Yang, *Int. J. GIS*, 3 (1989), 51-57.

- [3] Chang S K, Principles of Pictorial Information Systems Design, Printice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1989.
- [4] Herot C F, *ACM Trans. on Database Systems*, 5 (1980), 493.

## VQGIS——一种用于知识化地理信息 系统KGIS的图示查询言语

吴健康 陈学佳

(无线电电子学系)

### 摘 要

介绍了一个用于知识化地理信息系统KGIS的图示查询语言VQGIS。它具有良好的交互像定义功能,可以规定KGIS中所有实体和过程的像图,并建立它们之间的联系,还给出端口像及窗口像的定义。对像语句的种种限定作为重要内容包含在像字典中。VQGIS的分析器凭借像字典和KGIS的知识化数据模式的帮助将像语句转换为一系列关系代数运算、框架操作和图象代数运算。用户能容易地进行操作,甚至不需要任何KGIS的先验知识。

**关键词:** 可视语言, 空间数据库系统, 地图制图。

**中图法分类号:** TP391.41

# 找K个最小生成树的并行算法

唐策善 梁维发

(计算机科学技术系)

## 摘 要

基于SIMD机器——一种可以同时读但不可同时写的共享计算模型(CREW-PRAM)给出了找K个最小生成树的并行算法,此算法需 $O(\log^2 n + K \log n^*)$ 时间及 $O(n^2)$ 处理器;而基于可以同时读、写的更强计算模型(CRCW-PRAM),求K个最小生成树仅需 $O(K \log n)$ 时间及 $O(n^2)$ 处理器,这里n是图的顶点数。

**关键词:** 并行算法, 最小生成树, 图论

**中图法分类号:** TP338.6, TP301.6

## 1 引言

近年来,随着并行处理的兴起,各类图论问题的并行算法亦相继出现。本文建议了一个找K个最小生成树的并行算法。不失一般性,假定 $G(V, E)$ 是一无平行边的无向连通图,且边赋有大于0的权值, $V = \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $|E| = m$ ;若 $e \in E$ ,则 $W(e)$ 表示赋予边 $e$ 的权值,用邻接矩阵表示 $G$ 和带权的邻接矩阵 $W$ 表示 $G$ 的权。所谓最小生成树 $T_1$ ,是指在 $G$ 的所有生成树 $T$ 中,满足 $\min\{W(T) = \sum_{e \in E(T)} W(e)\}$ 的生成树 $T_1$ 。此问题的串行算法已有许多学者进行了广泛的研究,其中Yao<sup>[1]</sup>给出时间复杂性为 $O(m \log \log n)$ 的著名算法,就其并行化工作亦受到相当的重视,Savage<sup>[2]</sup>曾在CREW-PRAM上首次给出了 $O(\log^2 n)$ 时间和 $O(n^2)$ 处理器的并行算法,其后Tsin and Chin<sup>[3]</sup>又改进了Savage的结果,在时间复杂性不变的情况下,处理器数降至 $O(n^2 / \log^2 n)$ ;最近Awerbuch and Shiloach<sup>[4]</sup>在CRCW-PRAM上给出了 $O(\log n)$ 时间和 $O(n^2)$ 处理器的并行算法,Pawagi和Ramakrishnan<sup>[5]</sup>则讨论了在最小生成树权值改变时怎样维护最小生成树算法。对于更一般情形,即找K个最小生成树 $T_1, T_2, \dots, T_K$ 问题, Burns and Haff<sup>[6]</sup>, Camerini and Maffioli<sup>[7]</sup>, Gabow<sup>[8]</sup>,

1989年11月9日收到。

\* 本文log均以2为底。

Katoh, Ibaraki and Mine<sup>[9]</sup>都进行了广泛的研究,尤其是 Gabow 算法仅需  $O(Km)\alpha(m, + m \log n)^*$  时间,而 Katoh, Ibaraki and Mine<sup>[9]</sup> 基于划分解空间这一思想,对 Gabow 算法进行了改进,给出了  $O(Km + \min\{n^2, m \log \log n\})$  的时间复杂性。

本文建议一个找  $K$  个最小生成树的并行算法,采用的计算模型是一个 SIMD 机器,假定有一无限大的共享存储器且处理器个数不受限制,每个处理器可同时从一存储单元读内容,但每次仅允许其中一个处理器向某单元写内容即 CREW-PRAM,若每次允许同时向某个单元读和写内容,则是 CRCWPRAM。我们的算法是对 Katoh, Ibaraki and Mine 算法的并行化,在使用  $O(n^2)$  处理器  $O(\log^2 n + K \log n)$  时间内完成了  $K$  个最小生成树问题的求解。

## 2 逆树及其操作

在并行处理过程中,逆树是一种很有用的数据结构,因此,一般来讲,树以逆树形式存储。逆树定义如下:

**定义 2.1**  $T(V, E')$  是一棵有向树,若边  $\langle i, F(i) \rangle \in E', i \in V$ , 其中  $F(i)$  为  $i$  的双亲。若  $i = r$  ( $r$  为根), 则  $F(r) = r$ 。

由上述定义,进一步引入

**定义 2.2** 逆树  $T: i \in V, i$  在  $T$  中的  $k$  辈祖先  $F^k(i)$ :

$$F^k: V \rightarrow V \quad (k \geq 0)$$

$$F^0(i) = i, F^k(i) = F(F^{k-1}(i)) \quad (k > 0)$$

**定义 2.3** 在逆树  $T(V, E')$  中, 顶点  $i, i \in V$ , 的深度  $D^+(i)$

$$D^+(i) = \min\{k | F^k(i) = r \text{ and } 0 \leq k < n\}.$$

有了上述诸定义,下面我们给出一些重要引理:

**引理 2.1** 已知逆树  $T$  及其函数  $F$  后, 则计算所有  $F^k(i), i \in V, 0 \leq k < n$ , 能在  $O(n^2)$  处理器上用  $O(\log n)$  时间完成。

**证明** 为叙述方便,我们用二维数组形式给处理器标号,即  $n^2$  个处理器分别标号为  $P(i, j), (1 \leq i, j \leq n)$ , 计算  $F^k$  过程如下

```

procedure Ancestors;
  for each proc.  $P(1, j): 1 \leq j \leq n$  pardo
     $F^0(i) \leftarrow i$ 
     $F^1(i) \leftarrow F(i)$ 
  endfor
  for  $t \leftarrow 0$  to  $\lceil \log n \rceil - 1$  do
    for each proc.  $P(s, i): (1 \leq s \leq 2^t) \text{ and } (1 \leq i \leq n)$  pardo
       $F^{2^t+s}(i) \leftarrow F^{2^t}(F^s(i))$ 
    endfor
  endfor

```

不难看出, 上述过程需  $O(\log n)$  时间和  $O(n^2)$  处理器。

\*  $\alpha$  是 Ackerman 函数的逆函数

我们可以用一个  $n \times n$  的阵列  $F^+$  来表示  $F^k(i)$ , 即  $F^+(i, k) = F^k(i)$ ,  $1 \leq i \leq n$ ,  $0 \leq k < n$ . 由  $D^+(i)$  定义,  $D^+(i)$  可用一个处理器对  $F^+$  的第  $i$  行进行折半查找, 根  $r$  最左出现那列即为顶点  $i$  的深度  $D^+(i)$ , 故  $D^+(i)$  ( $1 \leq i \leq n$ ) 可用  $O(n)$  处理器在  $O(\log n)$  时间内求得.

**引理 2.2**  $C_n^2$  个顶点对的最低公共祖先 LCA (即这对顶点的其它公共祖先也是 LCA 祖先) 可在  $O(n^2)$  处理器  $O(\log n)$  时间内完成.

**证明** 对于顶点  $i, j$  的最低公共祖先  $LCA(i, j)$  可用两个处理器对  $F^+$  的第  $i$  行, 第  $j$  行同时进行折半查找, 找出最左同时出现的相同顶点即为  $LCA(i, j)$ , 因共有  $O(n^2)$  个这样的顶点对, 故在  $O(n^2)$  处理器上需  $O(\log n)$  时间. 设  $i, j$  的最低公共祖先用矩阵 LCA 的  $LCA(i, j)$  存贮 ( $i, j \leq n$ ).

**引理 2.3** 令  $E_{m \times x}^k(i)$  ( $k \geq 0$ ) 表示顶点  $i, j \in V$  到其  $k$  辈祖先的路径上权值最大的边, 则计算  $E_{m \times x}^k(i)$  ( $1 \leq i \leq n$ ,  $0 \leq k < n$ ) 可在  $O(n^2)$  处理器上  $O(\log n)$  时间完成.

**证明** 同引理 2.1 类似.

对于逆树  $T$  中任意两顶点  $i, j$ ,  $i$  到  $j$  的路径必经过  $LCA(i, j) = w$ , 假定  $D^+(i)$ ,  $D^+(j)$ ,  $D^+(w)$  均已知, 同时令  $x = D^+(i) - D^+(w)$ ,  $y = D^+(j) - D^+(w)$ , 这样, 我们可以求得  $i$  到  $j$  的路径最大边  $E_{m \times x}^+(i, j) = \max\{E_{m \times x}^+(i), E_{m \times y}^+(j)\}$ , 其中  $E_{m \times x}^0(i) = \langle i, F(i) \rangle$ . 为此得:

**引理 2.4** 求一逆树  $T$  的所有树边同非树边形成的环中最大赋权边需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器.

上面叙述了逆树  $T$  的一些定义和有关性质. 现在我们给出怎样由逆树  $T$  产生新的逆树  $T'$  的算法. 令  $T' = T - \{e\} \cup \{f\}$ , 其中  $e \in T, f \in E - E'$ , 这里  $e$  是非树边  $f$  加入树中形成环的最大树边. 其产生过程是: 设  $T$  存放在  $FK(l, i)$ ,  $i \in V$  中, 而  $T'$  将放在  $FK(s, i)$  中,  $i \in V$ ,  $FK(l, j)$  表示第  $l$  个生成树  $T_l$  顶点  $j$  的双亲. 由前面可知, 若  $F(i) \leftarrow FK(l, i)$ , ( $i \in V$ ), 并已计算出  $F^+$ , LCA,  $D^+$ ,  $E_{m \times x}^+$ , 则下述算法就可从  $T$  产生  $T'$

**procedure** Generatratree ( $T, T', l, s, f$ );

**for each proc.**  $P_i: 1 \leq i \leq n$  **pardo**

$FK(s, i) \leftarrow FK(l, i)$

**endfor**

/\* 令  $f = (u, v)$ ,  $E_{m \times x}^+(u, v) = \langle i, j \rangle$  \*/

$I \leftarrow i$

**if**  $LCA(u, i) = LCA(u, v)$  /\*  $\langle i, j \rangle$  在  $u$  到  $LCA(u, v)$  路径上 \*/

**then**  $temp \leftarrow v, FK(s, v) \leftarrow u$

**else**  $temp \leftarrow u, FK(s, u) \leftarrow v$

**endif**

**for each proc.**  $P(temp, k): 1 \leq k \leq n-1$  **pardo**

**if**  $(F^+(temp, k) = i)$  and  $(F^+(temp, k+1) \neq i)$

**then**  $column \leftarrow k$

**endif**



endfor

for each proc.  $P(\text{temp}, k): 2 \leq k \leq \text{column}$  pardo

$FK(s, F^+(\text{temp}, k)) \leftarrow F^+(\text{temp}, k-1)$  /\*调整方向\*/

endfor

由上得

**定理 2.1** 由逆树  $T$  产生新的逆树  $T' = T - \{e\} \cup \{f\}$ ,  $e \in T$ ,  $f \in E - E'$ . 需  $O(\log n)$  时间和  $O(n^2)$  处理器。

**证明** 因为预处理需  $O(n^2)$  处理器,  $O(\log n)$  时间。

### 3 找 $K$ 个最小生成树的并行算法

在叙述算法之前, 我们给出第  $j$  个最小生成树定义。

**定义 3.1** 第  $j$  个最小生成树递归定义如下:

(1)  $T_1$  是最小生成树;

(2)  $T_i$  是不同于  $T_1, T_2, \dots, T_{i-1}$  且权的和为最小的生成树。

#### 3.1 Katoh, Ibaraki and Mine 算法

Katoh 等人算法的基本思想是: 首先生成  $G$  的最小生成树  $T_1$ , 然后假定前  $j-1$  个最小生成树已生成, 再求第  $j$  个最小生成树  $T_j$ 。我们将  $T_i$  ( $1 \leq i \leq j-1$ ) 满足约束条件的树边及非树边  $f$  交换  $e \in T_i - IN_i$ ,  $f \in E - T_i - OUT_i$  (后面将给出边子集  $IN_i$ ,  $OUT_i$  定义), 令产生的生成树集合为  $T_i^*$ , 则  $T_j$  是  $\bigcup_{i=1}^{j-1} T_i^*$  中具有权值之和最小的生成树。亦即  $T_j$  为

某一  $T_{i^*}^*$  ( $1 \leq i^* \leq j-1$ ) 使  $W(T_{i^*}^*) - W(e^*) + W(f^*)$  最小, 故  $T_j = T_{i^*}^* - \{e^*\} \cup \{f^*\}$  这里  $e^* \in T_{i^*}^* - IN_{i^*}^*$ ,  $f^* \in E - T_{i^*}^* - OUT_{i^*}^*$ 。算法的基础是 Gabow 引理<sup>[1]</sup>, 这里我们省去证明, 仅列出其引理。

**引理 3.1** 如果  $T$  是一棵最小生成树, 满足约束  $IN \subset T$ ,  $OUT \subset E - T$ , 且  $IN \subset E$ ,  $OUT \subset E$ , 那么不同于  $T$  且同  $T$  有相同约束的另一最小生成树是  $T - \{e\} \cup \{f\}$ , 这儿  $f$  是使  $W(f) - W(e)$  为最小的  $f$ , 其中  $e \in T - IN$ ,  $f \in E - T - OUT$ , 而边集合  $IN$ ,  $OUT$  定义如下:

(1)  $IN_1 = \phi$ ,  $OUT_1 = \phi$ ;

(2) 若  $T_1, \dots, T_{i-1}$  已生成, 且  $T_i$  是由  $T_{i^*}$  ( $1 \leq i^* \leq j-1$ ) 通过满足约束条件的树边  $e^*$  及非树边  $f^*$  交换生成的, 则:

$IN_{i^*} \leftarrow IN_{i^*}, OUT_{i^*} \leftarrow OUT_{i^*} \cup \{f^*\}$

$IN_i \leftarrow IN_{i^*} \cup \{e^*\}, OUT_i \leftarrow OUT_{i^*} \cup \{f^*\}$

#### 3.2 找 $K$ 个最小生成树的并行算法 PKMST

PKMST 的高层描述如下:

输入:  $n \times n$  的邻接矩阵  $A$  及带权邻接矩阵  $W$ ;

输出:  $T_1, T_2, \dots, T_K$   $K$  个最小生成树。算法由两大步组成: 第一步为初始化工作, 找出第一棵最小生成树  $T_1$ ; 第二步则为生成其它  $K-1$  棵最小生成树  $T_2, \dots, T_K$ 。

**Step 1** 初始化工作; 并行求  $G(V, E)$  的最小生成树  $T_1$ , 同时置  $IN_1 = \phi$ ,  $OUT_1 = \phi$ ;  
并行求

$T_i = \{T_{i-1} | T_{i-1} \text{ 为一个非树边加入 } T_1 \text{ 形成环, 去掉环上权值最大树边的生成树}\}$

Step 2 执行 2.1) - 2.4)  $K-1$  次. 即

for  $j \leftarrow 2$  to  $K$  do

(1) 设  $T_1^i, T_2^i, \dots, T_{i-1}^i$  已生成, 并行求

$$\underset{i, l}{\text{MIN}} \{W(T_{i, l}^i) | T_{i, l}^i \in \bigcup_{i=1}^{i-1} T_i^i\}$$

(2) 设(1)步求得  $i^*$  使  $T_i = T_{i^*}^i - \{e^*\} \cup \{f^*\}$ ,

$e^* \in T_{i^*}^i - IN_{i^*}^i, f^* \in E - T_{i^*}^i - OUT_{i^*}^i$ , 从逆树  $T_{i^*}^i$  并行生成逆树  $T_i$ , GOTO

(3) 若(1)步不存在  $i^*$ , 则停机.

(3) 修改  $IN_{i^*}^i, OUT_{i^*}^i, IN_i, OUT_i$

(4) 并行计算  $T_i^i$ .

上述我们给出了 PKMST 的简单描述, 应该说明的是, 我们并不保存整个  $T_i^i$ , 而仅保留同  $T_i$  替换的边于一维数组中.

#### 4 PKMST 算法的实现

在详细叙述 PKMST 实现之前, 我们定义使用到的数据结构如下:

$TW[1:K]: TW(j) (1 \leq j \leq K)$  存贮第  $j$  个最小生成树的权和, 即  $TW(j) = \sum_{e \in T_j} W(e)$ ;

$FK[1:K, 1:n]$ : 存贮  $K$  个最小生成树  $T_1, \dots, T_K$ . 设第  $j$  个最小生成树 ( $1 \leq j \leq K$ ) 的顶点为  $v$ , 则其双亲为  $F(j, v)$ ;

$E_{max}^+[1:K, 1:n, 1:n]$ : 存贮  $K$  个最小生成树  $T_1, \dots, T_K$  顶点对之间的最大边. 设第  $j$  个最小生成树  $T_j$  顶点  $u, v$  路径上最大边为  $\langle s, t \rangle$ , 则  $E_{max}^+(j, u, v) = \langle s, t \rangle, (1 \leq j \leq K)$ ;

$Q[1:K, 1:m]$ : 存贮生成树集  $\bigcup_{i=1}^K T_i^i$ . 设第  $j$  个最小生成树 ( $1 \leq j \leq K$ ) 满足约束条件的树边

同非树边交换得到的生成树集  $T_j^i$ , 但每一生成树同  $T_j$  仅一条边不同, 故仅需存入这条边.

$Q(j, k)$  按  $\bar{w}(f) - \bar{w}(e)$  升序存取  $f (1 \leq k \leq m)$ , 令  $f = (u, v)$ , 则  $e = E_{max}^+(j, u, v), f \in E - T_j - OUT_j, e \in T_j - IN_j; (1 \leq j \leq K)$

$TIN[1:K, 1:n, 1:n]$ : 设第  $j$  个最小生成树  $T_j$ , 则  $TIN(j, u, v) = 1$  且  $TIN(j, v, u) = 1$  iff  $(u, v) \in T_j - IN_j$ , 否则  $TIN(j, u, v) = TIN(j, v, u) = 0, 1 \leq j \leq K$ ;

$EOUT[1:K, 1:n, 1:n]$ : 设第  $j$  个最小生成树  $T_j$ , 则  $EOUT(j, u, v) = 1$  且  $EOUT(j, u, v) = 1$  iff  $(u, v) \in E - T_j - OUT_j, 1 \leq j \leq K$ .

算法第一步由下列各子步组成:

- (1.1) 用 Tsing and Chin<sup>[3]</sup> 算法求  $T_1$ ;
- (1.2) 用第二节算法计算  $E_{max}^+(1, 1:n, 1:n)$ ;
- (1.3) 置  $Q(1, 1:m)$  为  $\phi$ ;
- (1.4) 形成逆树  $T_1$  的无向图邻接矩阵  $TT_1$ ;
- (1.5)  $TIN[1, i, j] \leftarrow TT_1(i, j), (1 \leq i, j \leq n)$ ;

(1.6)  $EOUT(1, i, j) \leftarrow A(i, j) - TT_1(i, j), (1 \leq i, j \leq n);$

(1.7) 设  $f = (u, v)$ , 对集合  $\{\bar{W}(u, v) - E_{\max}^+(1, u, v) | (u, v) \in E - T_1\}$  的元素从小到大排序<sup>[10]</sup>。将排序后对应的  $f$  依次存入  $Q(1, 1:m)$  中;

(1.8) 求  $TW(1)$ , 用  $n$  个处理器, 每个处理器  $P_i$  存有  $W(i, F(i))$ , 然后求和即得。算法的 (1.1) 步需  $O(\log^2 n)$  时间,  $O(n^2/\log^2 n)$  处理器<sup>[3]</sup>; (1.2) 步由引理 2.4 可知需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器; (1.3) 步需  $O(1)$  时间,  $O(m) = O(n^2)$  处理器; (1.4), (1.5), (1.6) 步需  $O(1)$  时间,  $O(n^2)$  处理器; (1.7) 步使用 AKS 算法<sup>[10]</sup> 或 Cole 排序算法<sup>[11]</sup> 需  $O(\log m) = O(\log n)$  时间,  $O(m) = O(n^2)$  处理器; (1.8) 步需  $O(\log n)$  时间,  $O(n)$  处理器, 故第一步共需  $O(\log^2 n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器。

算法第 2 步由下列诸子步组成

(2.1) 计算  $MIN_{1 \leq i^* \leq i-1} \{TW(i) + W(Q(i, 1)) - W(E_{\max}^+(i, Q(i, 1)))\}$

(2.2) 若不存在  $i^*$ , 则停机, 仅存在  $j-1$  个最小生成树;

若存在  $i^*$ , 则  $f^* = Q(i^*, 1)$

(2.2.1)  $TW(j) = TW(i^*) + W(Q(i^*, 1)) - W(E_{\max}^+(i^*, Q(i^*, 1)))$

(2.2.2) 分配  $m$  个处理器给  $Q$  的第  $i^*$  行, 每个  $PE$  做  $Q(i^*, l) \leftarrow Q(i^*, l+1) \quad (l = 1, 2, \dots, m-1)$

(2.2.3) /\* 形成逆树  $T_{i^*}$  \*/

for each proc.  $P_i; 1 \leq i \leq n$  **par**do

$FK(j, i) \leftarrow FK(i^*, i); F(i) \leftarrow FK(i^*, i)$

**endfor**

计算  $F^+, D^+$ , 确立  $f^*$  方向;

用 Generatratree  $(T_{i^*}, T_j, i^*, j, f^*)$  产生  $T_j$ , 即求

$FK(j, k), (1 \leq k \leq n)$ :

(2.3) for each proc.  $P(i_1, j_1): 1 \leq i_1, j_1 \leq n$  **par**do

$TIN(j, i_1, j_1) \leftarrow TIN(i^*, i_1, j_1)$

$EOUT(j, i_1, j_1) \leftarrow EOUT(i^*, i_1, j_1)$

**endfor**

令  $f^* = (u, v)$  则

$TIN(j, u, v) \leftarrow 0; TIN(j, v, u) \leftarrow 0$

$EOUT(j, u, v) \leftarrow 0; EOUT(i^*, u, v) \leftarrow 0$

$EOUT(j, v, u) \leftarrow 0; EOUT(i^*, v, u) \leftarrow 0$

(2.4) 计算  $E_{\max}^+(j, i_1, j_1), 1 \leq i_1, j_1 \leq n$

对集合  $\left\{ W(f) - W(E_{\max}^+(j, f)) \mid \begin{array}{l} EOUT(j, f) = 1 \\ \& TIN(E_{\max}^+(j, f)) = 1 \end{array} \right\}$

按值从小到大排序, 将对应的  $f$  进行排序存入  $Q(j, 1:m)$  中;

下面分析算法中第 2 步的复杂性。(2.1) 步集合至多含  $K$  个元素, 故需  $O(\log K) = O(\log n)$  时间,  $O(K) = O(n^2)$  处理器, (2.2.1) 步需  $O(1)$  时间,  $O(1)$  处理器, (2.2.2) 步需  $O(1)$  时

间,  $O(m) = O(n^2)$  处理器; (2.2.3) 步需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器; (2.3) 步需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器; (2.4) 步需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器, 第 2 步需循环  $K-1$  次, 故需时间为  $O(K \log n)$ ,  $O(n^2)$  处理器, 这样我们得定理 4.1.

**定理 4.1** 在 CREW-PRAM 上, 计算一个加权的无向连通图  $G(V, E)$ ,  $|V| = n$ , 的  $K$  个最小生成树需  $O(\log^2 n + K \log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器.

**推论 4.1** 在 CRCW-PRAM 上, 计算一个加权的无向连通图  $G(V, E)$ ,  $|V| = n$ ,  $K$  个最小生成树需  $O(\log n + K \log n) = O(K \log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器.

**证明** 将 PKMST 第一步改用 Awerbuch and Shiloach 最小生成树算法<sup>[4]</sup>产生  $T_1$ , 这需  $O(\log n)$  时间,  $O(n^2)$  处理器, 则计算 PKMST 需  $O(K \log n)$  时间  $O(n^2)$  处理器.

## 5 结束语

本文在 SIMD-CREW-PRAM 上给出了一个找  $K$  个最小生成树的并行算法, 我们的算法仅需  $O(\log^2 n + K \log n)$  时间和  $O(n^2)$  处理器, 若  $m = O(n^2)$ ,  $K \leq \log n$ , 则在忽略  $\log n$  因子的情况下, 我们的算法是一有效算法, 同时还推得在 CRCW-PRAM 上, 找  $K$  个最小生成树需  $O(n^2)$  处理器,  $O(K \log n)$  时间.

## 参 考 文 献

- [1] Yao A C, *Inform. Proc. Lett.*, 4(1975), 21-23.
- [2] Savage C D, Ph. D diss., RT-784, Dept. Math. Univ. Illinois, Urbana, 1977.
- [3] Tsin Y H and Chin F Y, *SIAM J. Comput.*, 13(1984), 580-599.
- [4] Awerbuch B and Shiloach Y, *IEEE Trans. Comput.*, 36(1987), 1258-1263.
- [5] Pawagi S and Ramakrishnan I V, *Inform. Proc. Lett.*, 22(1986), 223-229.
- [6] Burns R N and Haff C E, Proc. of the 5th southeast Conf. on Combinatorics Graph Theory and Computing, 19 (1974), 461-470.
- [7] Camerini P M, Fratta L and Maffioli F, Int. Rep 73-10; IEEE-LCE Politechnico di Milano, Italy, 1974.
- [8] Gabow H N, *SIAM J. Comput.*, 6(1977), 139-150.
- [9] Katoh N, Ibaraki T and Mine H, *SIAM J. Comput.*, 10(1981), 247-255.
- [10] Ajtai M, Komlos J and Szemerédi E, *Combinatorica.*, 3 (1983) 1-19.
- [11] Cole R, IEEE FOCS, 1986, 511-516.

# A Parallel Algorithm for Finding K Minimum Spanning Trees

Tang Ceshan Liang Weifa

*(Department of Computer Science and Technology)*

## Abstract

A parallel algorithm is proposed in this paper for finding  $K$  minimum spanning trees. The algorithm requires  $O(\log^2 n + K \log n)$  time  $O(n^2)$  processors on CREW PRAM,  $O(K \log n)$  time  $O(n^2)$  processors on CRCW PRAM, where  $n$  is the number of vertices of graph.

**Key words:** parallel algorithm, minimum spanning tree, graph theory.

# 铯钠镱和其它金属与固体氩功函数的测量和研究

徐彭寿

(国家同步辐射实验室)

S. L. Qiu M. Strongin

(美国布鲁克海文国家实验室)

## 摘 要

测量了80K下氩吸附在金、钪、镱的表面引起的功函数的改变。结果表明,氩的吸附会引起功函数的减小。当铯(或钠)淀积在固体氩上时,其功函数变得比铯(或钠)本身还要低。更为有趣的是经过一层接一层的交替淀积可溶于氩的金属(如铯、钠、镱),可得到最小功函数 $0.9(\pm 0.1)\text{eV}$ 。其值与金属本身和所用的衬底无关。

本文对上述实验现象进行了解释,并用“大极化子理论”,估算了极化频率和耦合常数。

**关键词:** 铯, 钠, 镱, 固体氩, 功函数, 金属—氩溶液, 大极化子

**中图法分类号:** O481

## 1 引言

碱金属、碱土金属及某些稀土金属(如铯和镱)很容易溶解于氩溶液并不起化学反应<sup>[1]</sup>。最近的实验结果表明,钠和镱也能溶解于固体氩中。此外我们还能观察到它们电子组态的改变和相变过程<sup>[2,3]</sup>。随着固体氩上复盖的钠的增加,它的2p能级的束缚能向低能方向移动,而随着镱上固体氩的复盖量的增加,镱的自旋轨道耦合的4f双重态面峰会向其峰位移。这些实验结果向人们提出这样一个问题。在这些能级位移的过程中,功函数是如何

1989年8月30日收到。

变化的？为此，我们进行了铯、钠、镱和其他金属与固体氨的功函数的测量和研究。

## 2 实验结果和讨论

实验是在美国布鲁克海文国家实验室进行的。实验中使用一个低温恒温器，它可使样品冷却到 80K。样品是一块钽的薄片，它能够通过断续加热到 2000°C 进行清洁处理并能在 (110) 方向再结晶。我们使用吸气剂源 (getter source) 蒸发钠和铯，而使用钨丝蓝蒸发器蒸发镱和金。气体氨通过泄漏阀吸附在冷却的样品上而得到固体氨的薄层。样品室中配有美国珀金—埃尔默公司的 CMA 电子能量分析器。利用稀有气体氩放电灯作为激发源，其光子能量为 21.2eV。样品室的本底真空为  $2 \times 10^{-10}$  torr。

为了进行功函数的测量，使样品与地绝缘并加上 5V 负偏压。利用二次电子截止点和费米能级之间指示的电子动能之差就可得到功函数。即

$$\phi = h\nu - [KE(FL) - KE(\text{二次截止})]^{[4]}$$

其中  $\phi$  为样品的功函数， $h\nu$  为光子能量， $KE(FL)$  为费米能级处电子动能， $KE(\text{二次截止})$  为二次电子截止点动能。

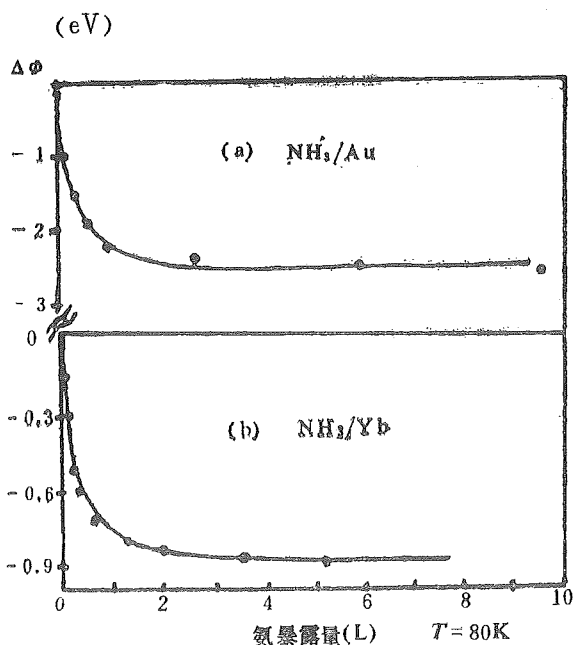


图 1 80K 时氨暴露量与功函数的关系  
(a) Au (b) Yb

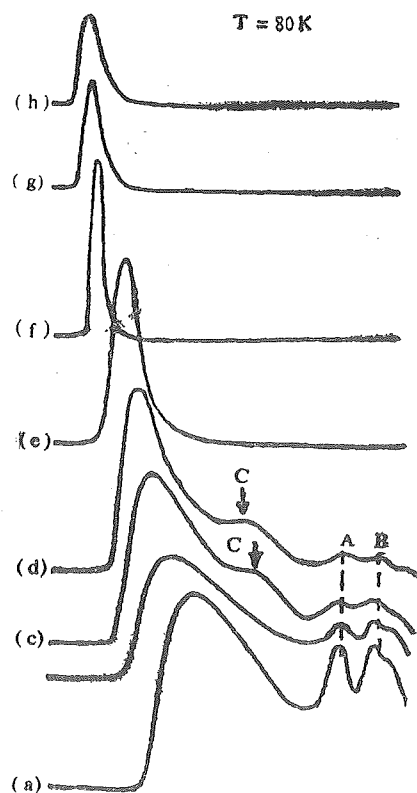


图 2 谱图

图 1 表示了 80K 时氨复盖在金的薄层上所引起的功函数的改变。这是由图 2 中谱 (a) — (e) 中二次电子截止点在氨复盖量增大时引起的位移而得到的。图 2 谱 (a) — (e) 是在金的光电子谱中，二次电子截止点随氨暴露量的变化而引起的改变。可以看到，氨的暴露量直到 9.5L

时费米能级的位置仍然没有变化。这说明二次电子截止点的移动不是来源于表面带电效应，而是由于功函数的变化引起的。谱(f)表示在固体氨上淀积一层铯后，其功函数(1.7eV)比铯本身的功函数(2.1eV)还低。谱(g)表示铯和固体氨一层接一层交替淀积引起功函数的减小谱，(h)表示铯和固体氨的交替淀积获得了最小功函数 $0.9(\pm 0.1)eV$ 。氨在较低的复盖度时金的5d峰A和B的位置没有任何改变，而氨的1e轨道能级c向束缚能高的方向移动。这种移动正反映了功函数的变化。在钽上吸附氨后其功函数的变化趋势与金的情况相似。为了进行比较，我们将80K下的 $NH_3/Yb$ 的实验结果也表示在图1<sup>[3]</sup>。表1中我们列出了金、钽、铯的功函数及其在低温下吸附氨后所引起的功函数的最大改变量。比较图1中的谱(a)和(b)我们可以看到，它们具有类似的特性，即几乎都是在复盖度达到一个氨的单层以后趋向饱和，此时功函数的变化也达到了极大值。类似的结果我们同样可以在100K下的 $NH_3/Pt(111)$ <sup>[6]</sup>和112K下的 $NH_3/Ni(110)$ <sup>[6]</sup>中观察到。

表 1 金、钽、铯的功函数及低温下吸附氨后所引起的功函数的最大改变量

衬底	功函数(eV)	吸附氨后功函数的改变(eV)
Au	5.0	2.5
Ta	4.4	2.4
Yb	2.5	0.9

对于氨吸附在金属上所引起的功函数变化，我们可以作如下的解释：由于氨在表面的取向是氨原子靠近表面的倒立的伞状，它具有较大的偶极矩 $(1.4D)^{[7]}$ 。这附加的偶极矩所产生的电场有利于电子逸出表面从而减弱了原来金属表面的电偶极层，结果导致功函数的减小。

图2中谱(f)表示在金上复盖了较厚的固体氨后再淀积铯所引起的功函数的变化。这时功函数减小0.8eV，而二次电子强度则相当于 $NH_3/Au$ 的50倍。与此类似，在Ta上复盖了较厚的固体氨，再淀积钠后，功函数减小0.7eV，而二次电子强度则相当于 $NH_3/Ta$ 的10倍。得到图2中的谱(f)后，由于功函数非常低，我们就利用图3中的装置直接测量光电子流。

在图3中，我们使用He-Ne激光器作为激发源。由于样品与地绝缘，一个-5V的偏压用来将光电子由样品吸引到样品室壁上形成了闭合回路。在此回路中，串联了一个 $1.55M\Omega$ 的电阻。利用万用表测量出由于光电子流导致的电阻两端的电压为0.93V。如果我们用手电筒代替He-Ne激光器，仍可测到电阻两端的电压。可见此时功函数是非常低的。

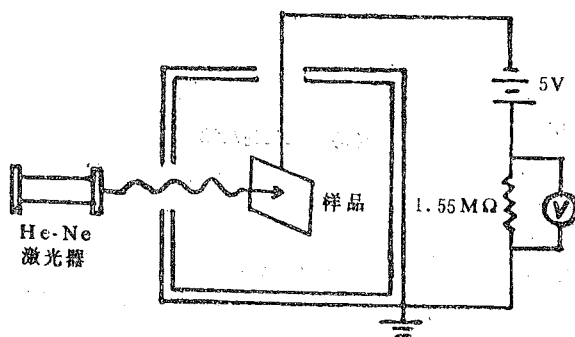


图 3 测量光电子流的装置

由表1我们可看到，金的功函数是5.0eV，在氨的暴露量达到 $9.5L$ 后，其功函数变为2.5eV。此时再淀积铯后，功函数变为1.7eV(见图2中的谱(f))。而铯的功函数为2.1eV，可见此时功函数比铯还低。为什么会出现此种情况呢？这是因为当铯原子淀积在厚层的固体氨上时(我们的实验中相当于10ML的氨)，这时处于铯原子下层的氨分子就会重新取向为



氮原子朝向铯的薄层，这个过程会减弱铯薄层表面的电偶极矩并减小了功函数。

如果我们一层接一层地交替地淀积铯和固体氮，就会发现这时功函数比淀积在固体氮上的铯（图 2 谱(f)）还要低（图 2 谱(g)），而光电子强度明显减弱。这种过程继续进行，最后达到最小功函数  $0.9(\pm 0.1)\text{eV}$ 。这  $\pm 0.1\text{eV}$  的浮动来源于不同实验中铯和氮的比率的变化。此时光电子强度非常低。一个非常有趣的现象是若用钠或镱代替铯，同样采用金属和固体氮交替淀积的方法，我们也可以得到  $0.9(\pm 0.1)\text{eV}$  的最小功函数，而且与衬底的选择无关。但若用金代替铯，我们就不能得到这么小的功函数。以上结果说明，在金属和固体氮共淀积时，只有可溶于氮的金属（例如铯、钠、镱）才能得到最小功函数。它的数值与金属本身及衬底的性质都无关。这个结果与金属—氮溶液中的光吸收有类似之处。在金属—氮溶液体系中，光吸收与溶液中的金属性质也无关<sup>[8]</sup>。

实验证明，为了获得最小功函数，金属和固体氮必须一层接一层交替淀积，最好的结果是氮相对于金属有较大的比例。这说明获得最小功函数时对应于稀释的金属—氮溶液体系，此时金属分解为溶剂化阳离子和溶剂化电子<sup>[1]</sup>。对于象氮这样的极化介质中的导带电子将形成一种大极化子<sup>[9]</sup>。下面我们试图用大极化子理论来描述溶剂化电子和固体氮体系。

Fröhlich<sup>[10]</sup>利用极化场中的电子与极化场的相互作用导出了大极化子的哈密顿量，并得出极化介质中电子最低能态具有自能。

$$E = -ah\omega = -\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon}\right)e^2\left(\frac{m\omega}{2h}\right)^{1/2} \quad \text{其中 } \alpha < \frac{256}{25} \quad (1)$$

式中  $\alpha$  为耦合常数，其表达式为

$$\alpha = \frac{e^2}{h}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon}\right)\left(\frac{m}{2h\omega}\right)^{1/2} \quad (2)$$

其中  $\omega$  表示极化引起的晶格振动频率， $\epsilon$  是静态介电常数， $\epsilon_\infty$  表示高频介电常数， $m$  为电子静止质量。

在零级近似下，我们假设最小功函数等于电子最低能态的自能，即

$$E = 0.9\text{eV} = -ah\omega = -e^2\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon}\right)\left(\frac{m\omega}{2h}\right)^{1/2} \quad (3)$$

对于氮

$$\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} = 0.523^{[11]}$$

代入 (3) 式得

$$\omega = 3.31 \times 10^{14} \quad \text{或} \quad \nu = 1757\text{cm}^{-1} \quad (4)$$

氮分子具有 4 个振动模<sup>[12]</sup>。其中  $\nu_1$ 、 $\nu_2$  是全对称的，而  $\nu_3$ 、 $\nu_4$  是简并的。我们计算的频率与  $\nu_4$  ( $1627.5\text{cm}^{-1}$ ) 较为吻合，这说明计算结果是合理的。

将 (4) 代入 (2) 可得

$$\alpha = 4.13$$

这与式 (1) 要求的  $\alpha < \frac{256}{25}$  相符合。

以上粗略的计算说明用大极化子理论描述固体氮中溶剂化电子体系还是合适的。

### 3 结论

低温下氨吸附在象金、钼、镱这样的金属表面会引起功函数的减小。在氨的复盖度达到一个单层时,它们的功函数几乎都达到饱和。当铯(或钠)淀积在固体氨上时,其功函数变得比铯(或钠)本身还低。通过一层接一层交替淀积可溶于氨的金属(如铯、钠、镱)可得到最小功函数 $0.9(\pm 0.1)\text{eV}$ 。其中 $\pm 0.1\text{eV}$ 的浮动来源于此类金属与氨的比率的变化。最小功函数值与金属本身的性质和衬底均无关。此时我们可以用大极化子理论来描述固体氨中溶剂化电子体系。

### 参 考 文 献

- [1] Cohen M H *et al.*, *Adv. phys.*, **17** (1968), 857.
- [2] Qiu S L *et al.*, NSLS Annual Report, Brookhaven National Lab., 1986, 121.
- [3] 徐彭寿, 中国科学技术大学学报, **19** (1989), 257.
- [4] Briggs D. 等编著, 桂琳琳等译, X射线与紫外光电子能谱, 北京大学出版社, 北京, 1984, 141.
- [5] Fisher G B, *Chem. phys. Lett.*, **79** (1981), 452.
- [6] Lee L *et al.*, *Surf. Sci.*, **165** (1986), L95.
- [7] Weast R C, Handbook of Chemistry and Physics, 45th ed. Cleveland Ohio, 1964, E-37.
- [8] Deigen M F, *Trudy Inst. Fiz. Akad. Nauk. Ukr. S. S. R.*, **5** (1954), 119.
- [9] Mott N F, *Electronic processes in Noncrystalline Materials*, Clarendon Press. Oxford, 1971.
- [10] Fröhlich H, *Adv. Phys.*, **3** (1954), 325.
- [11] Dawgdow A S, *J. Exptl. Theoret. phys. U. S. S. R.* **18** (1948), 913.
- [12] Herzberg G, *Molecular Spectra and Molecular Structure, II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, Van Nostrand, New York, 1945.

# Work Function Measurement and Studies of Cs, Na, Yb and Other Metals With Solid Ammonia

Xu Pengshou

*(Hefei Synchrotron Radiation Lab., China)*

S. L. Qiu            M. Strongin

*(Brookhaven National Lab., U. S. A)*

## Abstract

The work function changes for ammonia absorbed on Au, Ta and Yb have been measured at 80 K. With a layer of Cs deposited on the top of solid ammonia the work function became lower than that of Cs. By co-deposition of  $M$  ( $M = \text{Cs, Na, Yb}$ ) with ammonia a minimum work function of  $0.9(\pm 0.1)$  eV was obtained which is independent on the feature of the metals as well as the substrate. The theoretical solution of "large polaron" was used to calculate the frequency of the polarization field and the coupling constant.

**Key words:** caesium, sodium, ytterbium, solid ammonia, work function, metal-ammonia solution, large polaron

# 草鱼和团头鲂的核型及其C带带型的研究

杨 慧 一

(中国科学院发育生物学研究所)

## 摘 要

采用用血淋巴细胞培养制备染色体和BSG显带技术,研究了草鱼和团头鲂的核型和C带带型,草鱼、团头鲂都是 $2n=48$ ,均有8对中部着丝点染色体,10对亚中着丝点和6对亚端着丝点染色体,它们在核型中除第9对染色体短臂有显著差异外,其余染色体形态很为相似。在C带带型中,大多数染色体都具着丝点C带,但它们各有特殊的带型,差异较大,草鱼有两对不同圆颗粒状带型亚中着丝点C带染色体,并有6对短臂全深染的端位型亚端着丝点C带染色体,还有两对在短臂C带与随体相联的染色体。团头鲂有的在同源染色体长臂间显示对称和不对称的两种插入型C带,次缢痕位于第9对染色体短臂上,亦为C带染色阳性,位于缢痕的裂隙内,无端位带,并对草鱼和团头鲂不同亚科的核型特征以及它们染色体与其物种进化的关系进行了初步讨论。

**关键词:** 染色体, 草鱼, 团头鲂, 染色体组型。

**中图法分类号:** Q343.2

## 1 引言

草鱼 (*Ctenopharyngodon idellus*) 隶属于鲤科(Cyprinidae) 鲤亚科(Cyprininae), 团头鲂 (*Megalobrama amblycephala*) 隶属于鲤科(Cyprinidae) 鲮鲂亚科(Abramidinae)

这两种鱼的核型曾报道过<sup>[1-4]</sup>,但是,他们的结果互不一致,我们用血细胞培养法研究草鱼、团头鲂的染色体组型,结果与已报道的有很大不同。应用显带技术研究鱼类染色体,能深入每个染色体上的区、带变异,表鉴别每一个染色体,同时也为细胞遗传学理论、鱼类物种进化的研究和新技术的发展等提供前提和基础,C带技术是遗传学和细胞分类学中常用的,显示染色体结构异染色质区的主要方法之一,关于草鱼、团头鲂染色体C带带型的研究在国内外尚未见报道。

1989年8月30日收到。

## 2 实验材料和方法

实验用草鱼 7 条, 团头鲂 6 条均购自北京市鱼场, 血淋巴细胞培养方法、染色体制片、测量、组型分析等均同前文的报道<sup>[5,6]</sup>。染色体 C 带按 Sumner<sup>[7]</sup> 的 BSG 法稍加修改。

- 1 标本在 0.2N HCl 溶液中室温处理 20 分钟, 蒸馏水冲洗。
- 2 浸入 5% Ba(OH)<sub>2</sub>·8H<sub>2</sub>O 新配溶液中 (60℃ 水溶) 处理 10 分钟左右, 蒸馏水清洗干净。
- 3 在 2×SSC 溶液中 (60℃ 水溶) 温育 50 分钟, 经蒸馏水洗、晾干。
- 4 用 0.15M 磷酸缓冲液配置 1/10 Giemsa 染液, (PH6.8) 染色 20—25 分钟, 水洗晾干。

## 3 实验结果

我们测量了草鱼、团头鲂各 20 个中期分裂相的每对同源染色体的相对长度和臂比, 如表 1 所示。

### 3.1 核型分析

草鱼  $2n=48$ , 根据 20 个中期分裂相的测量分析, 全部染色体可分为 A(m), B(sm), 和 C(st) 三组, 其中第 1—8 对为中着丝点染色体(m), 在整个组型中着丝点在上下两臂中间, 易于识别, 其臂比 1.00, 可为正中着丝点的指数值, 在第 9—18 对为亚中着丝点染色体(sm), 依大小递减的方式排列, 其臂比都在 1.70—3.0 的 sm 界值内, st 组为 6 对亚端着丝点染色体 (第 19—24 对)。

团头鲂  $2n=48$ , 亦分为 A(m)、B(sm)、C(st) 三组, 其中第 1—8 对为 m, 第 9—18 对为 sm, 第 19—24 对为 st, 根据染色体的大小、形状和着丝点的位置分组排列, 其中最大的一对是第 9 对为亚中着丝点, 最小的一对是第 24 对为亚端着丝点染色体, 较易鉴别。

### 3.2 C 带带型 (见照片 3.4)

根据草鱼、团头鲂各 10 个 C 带染色的中期分裂相的分析, 它们大多数染色体均有大小不一的着丝点 C 带。不同染色体的 C 带有一定差异。

草鱼整个核型中 8 对 m 染色体第 1 对不显带。亚中着丝点染色体 (第 11、16 对) 短臂末端处有两种形状的圆颗粒 C 带, 在同源对上显示的 C 带大小、位置和着色强度相同。亚端着丝点染色体 (第 19—24 对) 显示端位带, 其 6 对染色体的短臂端位全部深染, 前 3 对染色深而形大, 后 3 对小而较浅。其两对明显的随体都位于第 13、22 对染色体短臂上, 为与随体相联的 C 带。

团头鲂亦有 8 对 m 染色体, 都具着丝点区 C 带, 其中  $m_1-m_8$  每对之间的 C 带大小、染色强度都有不同程度的差异, 从照片 4 可见, 与草鱼相比较, 特征是具有插入型 C 带 (第 13、15 对) 染色体长臂间, 第 13 对插入型的 C 带大小、位置染色深浅在同源染色体上均相同, 第 15 对插入型的 C 带呈小圆点、在同源染色体长臂间一条在左, 另一条在右。此外, 有些 C 带表现异型性, 都在同源染色体间如 C 带的大小或染色的深浅差异 (第 1, 3, 4, 6, 22 对染色体 C 带)。第 9 对染色体是全组中最大的一对, 在短臂间具次缢痕, 其 C 带位于缢痕的裂隙内与结构异染色质相联系, 无颗粒状带和端位带。

表 1 草鱼和团头鲂核型指数

染色体 序号	草 鱼						团 头 鲂					
	短臂	长臂	全长	相对长度	臂比	类型	短臂	长臂	全长	相对长度	臂比	类型
1	3.42	3.43	6.85	4.96	1.00	m	3.43	3.44	6.87	4.91	1.00	m
2	3.35	3.36	6.71	4.86	1.00	m	3.36	3.37	6.73	4.81	1.00	m
3	2.62	2.63	5.25	3.80	1.00	m	2.82	2.83	5.65	4.03	1.00	m
4	2.55	2.55	5.10	3.69	1	m	2.81	2.82	5.63	4.02	1.00	m
5	2.52	2.52	5.04	3.65	1	m	2.54	2.55	5.09	3.63	1.00	m
6	2.45	2.46	4.91	3.56	1.00	m	2.55	2.56	5.06	3.61	1.00	m
7	2.35	2.35	4.70	3.40	1	m	2.46	2.47	4.93	3.52	1.00	m
8	2.21	2.22	4.43	3.21	1.00	m	2.35	2.35	4.70	3.35	1	m
9	1.98	5.68	7.66	5.55	2.86	sm	2.57	5.56	8.13	5.81	2.16	sm
10	1.96	5.47	7.43	5.38	2.79	sm	2.38	5.43	7.81	5.58	2.28	sm
11	2.01	4.54	6.55	4.74	2.25	sm	1.96	4.62	6.58	4.70	2.35	sm
12	1.97	4.42	6.39	4.63	2.24	sm	2.02	4.51	6.53	4.66	2.23	sm
13	1.96	4.33	6.29	4.56	2.20	sm	1.93	4.32	6.25	4.46	2.23	sm
14	1.96	4.21	6.17	4.47	2.14	sm	2.02	3.89	5.97	4.26	1.92	sm
15	1.89	3.96	5.85	4.24	2.09	sm	1.85	3.88	5.73	4.09	2.09	sm
16	1.89	3.95	5.84	4.23	2.08	sm	1.86	3.86	5.72	4.08	2.07	sm
17	1.88	3.94	5.82	4.22	2.09	sm	1.85	3.34	5.19	3.70	1.80	sm
18	1.87	3.94	5.81	4.21	2.10	sm	1.87	3.32	5.19	3.70	1.77	sm
19	1.26	4.21	5.47	3.96	3.34	st	1.28	4.23	5.51	3.93	3.30	st
20	1.25	4.19	5.44	3.94	3.35	st	1.27	4.22	5.49	3.92	3.32	st
21	1.25	4.18	5.43	3.93	3.34	st	1.26	4.23	5.49	3.92	3.35	st
22	1.23	4.01	5.24	3.79	3.26	st	1.26	4.23	5.49	3.92	3.35	st
23	1.24	3.82	5.06	3.66	3.08	st	1.25	3.84	5.09	3.63	3.07	st
24	0.89	3.64	4.53	3.28	4.80	st	1.26	3.81	5.07	3.62	3.02	st
			137.9						139.9			

我们依据 10 个草鱼、团头鲂分散好、带型清的中期染色体照片，绘制了它们的 C 带带型模式图（图 1）。

#### 4 讨论

从以上结果可见，在草鱼组型中只有中着丝点 (m)，亚中着丝点 (sm)、和亚端着丝点 (st) 三种类型染色体，而 Ojima 等<sup>[9]</sup>和长江水产所等报道的除以上三种外，还有端着丝点 (t) 染色体，（见表 2）造成这种不同结果的原因，我们认为是在实验过程中秋水仙碱处理时间不当，使染色体收缩过度；或与选用染色体早、中、晚期分裂相的不一致有关，因此

在他们的染色体图象上看到有相当一部分其着丝点的位置未能清楚地显示。这就影响正确判断染色体的类别和分组，造成差错。我们选用的为正中期的分裂相，能清晰地显示出每个染

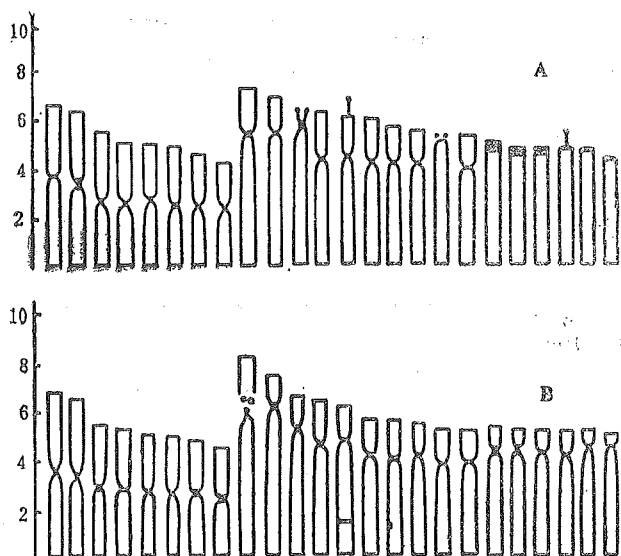


图 1 草鱼(A)和团头鲂(B)的染色体C带模式图

表 2 不同作者对草鱼和团头鲂染色体核型分析结果

染色体数目	染色体分组	特异标志	材料与方法	文献
草 鱼 48	9m + 11sm + 4st	有两对具次缢痕	胚胎细胞气干法	[1]
团头鲂 48	10m + 12sm + 2st			
草 鱼 48	8m sm + st - 10 st + t - 6		肾细胞气干法	[8]
团头鲂 48	18m + 26sm + 4st	有一对具次缢痕	肾组织培养气干法	[2]
草 鱼 48	7m 12sm + st 5t		胚胎压片	[3]
草 鱼 48	8m + 10sm + 6st	有一对具随体	血细胞培养气干法	本文
团头鲂 48	8m + 10sm + 6st	有一对具次缢痕		

色体的长、短臂和着丝点位置。通过核型分析知道，草鱼和团头鲂染色体的类型和分组都是  $8m + 10sm + 6st$ ，并在形态方面有相似之处，而它们在 C 带带型之间差异较大，这表明，用常规核型分析，染色体表现不出其不同亚科间的特异结构和它们的核形特征。

在我们的结果中，草鱼、团头鲂的 C 带带型除显示着丝点 C 带外，还可见其他染色体的特殊带型标记，如草鱼染色体的短臂颗粒状 C 带和短臂端位型 C 带、以及两对与随体相联的 C 带，而团头鲂在染色体长臂显示的插入型 C 带。据 Schmid<sup>[9]</sup>认为，臂间 C 带是在进化过程中染色体发生易位后，由不活动的着丝点附近的异染色质形成的，染色体再经重排的变化，而使 C 带异染色质构成插入型和端位型的可能性。所以，草鱼和团头鲂，其端位型

和插入型的 C 带虽然在全染色体组型中占少数,亦说明它们在各自亚科中均具有种属的特异性和原始性。此外,我们在团头鲂的 C 带带型中还观察到着丝点 C 带异染色质的大小和染色强度有差异,显示异态和多态现象。Arrighi 和 Hsu<sup>[1,9]</sup>曾指出: C 带部分是结构异染色质之所在,这种结构异染色质通常位于着丝点周围,在人类和其它物种类中,常可看到由 C 带异染色质量的变异而组成的多态性<sup>[11]</sup>。又有很多学者认为<sup>[12-15]</sup>结构异染色质有种种的特异性,并能为物种形成提供条件,以 C 带认识物种,探讨物种的亲缘关系,有其鉴别价值。

C 带是特异地显示结构异染色质的一种方法,在同一物种内染色体上的结构异染色质的数量和分布基本是恒定的,但不同物种间则有所不同<sup>[15]</sup>。近年来,又有学者研究表明, C 带是 DNA 中高度重复序列的部位<sup>[16,17]</sup>,不同动物染色体上所显示的 C 带大小的变化,可能和 DNA 中所含重复序列的量有关系<sup>[18-20]</sup>,因此,分析 C 带显示的结构异染色质,对物种的亲缘关系,系统发育和染色体演化等方面的研究,都具有重要的意义。本文所述的两种鱼类 C 带带型亦论证了它们亚科间所具有的特异性。

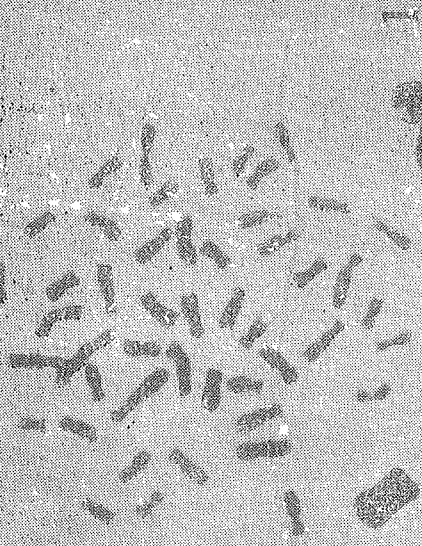
本文照片承李建荣同志协助印制,特此致谢。

#### 参 考 文 献

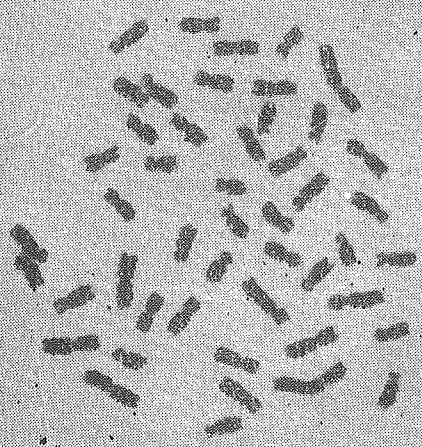
- [1] 管瑞光,遗传学报,6 (1978), 204—209.
- [2] 李渝成,遗传学报,10 (1983), 216—222.
- [3] 长江水产研究所等,淡水渔业科技杂志,1975,第二期,11—13.
- [4] 小島吉雄,遗传,32 (1978), 4—10.
- [5] 杨慧一,遗传学报,9 (1982), 143—146.
- [6] 杨慧一,遗传学报,28 (1982), 28—33.
- [7] Sumner A T, *Exptl. Cell Res.*, 75 (1972), 304—306.
- [8] Ojima Y, *La Kromosomo*, 1979, 2—15—16: 463.
- [9] Schmid M, *Chromosoma*, 68 (1978), 131—148.
- [10] Arrighi F E *et al.*, *Cytogenetics*, 10 (1971), 81—86.
- [11] Comings D E, *Mothids in Cell Biology*, 17 (1978), 115—139.
- [12] Schmid M, *Chromosoma*, 66 (1978), 361—368.
- [13] Takagi N *et al.*, *Chromosoma (Berl)*, 46 (1974), 91—120.
- [14] Bernard J *et al.*, *International Review of Cytology*, 58 (1978), 1—108.
- [15] Yunis J J *et al.*, *Science*, 174 (1971), 1200—1209.
- [16] Goodenough U, *Genetics*, 2nd edition, Holt, Rinehart and Winston, 1978: 251.
- [17] Schciltz-Schaeffer J, *Cytogenetics*, Springer-Verlag and New York, 1980, 44—46, 85—86.
- [18] Dutrillaux B, *Chromosoma*, 41 (1973), 395—402.
- [19] King K, *Chromosoma (Berl)*, 80 (1980), 191—217.
- [20] Nardi I *et al.*, *Chromosoma (Berl)*, 40 (1973), 321—331.



I



1




2

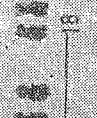
A  8

A  8

B  8

B  8

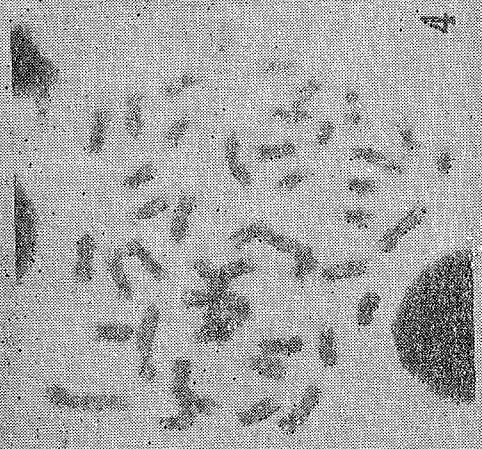
C  8

C  8

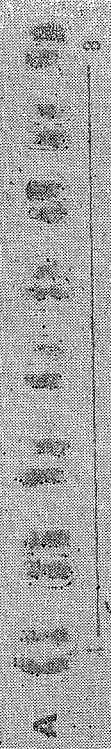
C  8

C  8





4



# Studies on the Karyotypes and C-banding Patterns of Grass Carp (*Ctenopharyngodon idella*) and Blunt Snout Bream (*Megalobrama amblycephala*)

Yang Huiyi

(*Institute of Developmental Biology, Academia Sinica, Beijing*)

## Abstract

The karyotype of cultured peripheral blood lymphocytes in grass carp, blunt-snout bream was studied. Both diploid number all were  $2n=48$ .

The chromosomes of Grass carp and Blunt-Snout Bream had some similarities with each other in morphologies. According to their size, shape and the position of the centromere, All of them were tentatively classified into 3 classes: group A (1—8), group B (9—18), group C (19—24), these chromosomes were metacentric, submetacentric, and subtelocentric. C-banding patterns of grass carp and blunt-snout bream were much different between them.

(1) Grass carp has 6 pairs terminal deep bands on short arms and 2 pairs granule-like terminal deep bands chromosomes, in addition, small satellites were found on the short arms of 2 pairs of chromosomes.

(2) Blunt-snout bream has some pairs interstitial bands on the long arms and secondary constriction on the short arms of 1 pair of chromosome.

The centromeric regions of most chromosomes in those two species of fish were C-banding positive.

**Key words:** Chromosome, grass carp, blunt-snout bream, karyotype.

# Marchenko 方程的递推算法

薛兴恒. 张韵华

(数学系)

Marchenko积分方程是某些反演问题中出现的一类重要的特殊的积分方程,用梯形或抛物形公式离散化可转化为一类特殊的代数方程组.本文叙述并证明了这类代数方程组的一个递推算法.与通常的高斯消去相比,在计算量和存储量方面均为减少,而在数值精度上有所提高.

**关键词:** Marchenko方程, 高斯消去法, 递推算法.

**中图法分类号:** O234.83

**AMS:** 45G

## 1 问题和结果

在有些重要的反演问题中,需要解Marchenko积分方程

$$K(\tau, t) = R(t + \tau) - \int_{-\tau}^{\tau} R(t + \xi)K(t, \xi)d\xi \quad (1)$$

其中 $\tau$ 为参数,  $0 \leq \tau \leq H$ ;  $R(x)$ 是在 $[-2H, 2H]$ 上有定义的已知函数,且当 $x \leq 0$ 时 $R(x) = 0$ ;  $K(\tau, t)$ 是需求的未知函数,既需在 $(\tau, t)$ 平面上的三角形区域 $\{0 \leq \tau \leq H, |t| \leq \tau\}$ 上确定 $K(\tau, t)$ .

用梯形公式或抛物形公式把积分方程离散化可归结到下列方程组

$$(I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) \begin{pmatrix} v_n(n) \\ \vdots \\ v_1(n) \\ v_0(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (*)$$

将(1)转化为

$$(I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) \begin{pmatrix} y_n(n) \\ \vdots \\ y_1(n) \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P_n \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$R_n = \begin{pmatrix} \dot{0} & \dot{0} & \vdots & \dot{0} & \dot{R}_1 \\ 0 & 0 & \vdots & R_1 & R_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & R_1 & \vdots & R_{n-1} & R_2 \\ R_1 & R_2 & \vdots & R_n & R_{n+1} \end{pmatrix}$$

$$R_i = R(i\Delta)$$

其中 $\Delta$ 为步长,  $y_i(n)$ 和 $P_n$ 为未知数,  $I_{n+1}$ 为 $n+1$ 阶单位阵, 我们把(\*)称为Marchenko代数方程组。本文明确地表达和证明了方程组(\*)的一种递推算法, 并且用此算法进行数值试验, 结果表明和常用的主元消去法比较, 不但计算量和存储量减少, 而且精度大为提高。

## 2 基本定理

设 $r_n, f_i(n), g_i(n) (j=0, 1, \dots, n)$ 由下列递推公式确定

$$\begin{cases} r_0 = \Delta \cdot R_1 \\ f_0(k) = 1, g_0(k) = r_k \\ f_i(k) = f_i(k-1) + r_k g_{i-1}(k-1) \\ g_i(k) = g_{i-1}(k-1) + r_k f_i(k-1) \\ \{j=1, 2, \dots, k-1\} \\ f_k(k) = r_0 r_k, g_k(k) = r_0 \\ r_k = \frac{\Delta}{\prod_{i=0}^{k-1} (1-r_i^2)} \sum_{i=0}^{k-1} f_i(k-1) R_{k+1-i} \\ k=1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (A)$$

则方程(2)的解为

$$y_j(n) = \frac{f_j(n) - g_j(n)}{1 - r_n} \quad (j=1, 2, \dots, n)$$

$$P_n = (1 + r_n) \prod_{i=0}^{n-1} (1 - r_i^2)$$

首先用归纳法可证, 由上述递推公式所确定的 $r_n, f_i(n), g_i(n)$ 满足下列关系式

$$\Delta \cdot R_n \begin{pmatrix} f_n(n) \\ \vdots \\ f_1(n) \\ f_0(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_n(n) \\ \vdots \\ g_1(n) \\ g_0(n) \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\Delta \cdot R_n \begin{pmatrix} g_n(n) \\ \vdots \\ g_1(n) \\ g_0(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_n(n) \\ \vdots \\ f_1(n) \\ f_0(n) - Q_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$Q_n = \prod_{i=0}^n (1 - r_i^2)$$

事实上, 当 $n=1$ 时可以直接验证(3)和(4)成立, 即

$$\Delta \cdot R_1 \begin{pmatrix} f_1(1) \\ f_0(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \cdot R_1 \\ \Delta \cdot R_1 & \Delta \cdot R_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_0 r_1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 r_0^2 + r_1 (1 - r_0^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1(1) \\ g_0(1) \end{pmatrix}$$



$$\Delta \cdot R_1 \begin{pmatrix} g_1(1) \\ g_0(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \cdot R_1 \\ \Delta \cdot R_1 & \Delta \cdot R_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0 r_1 \\ 1 - (1-r_0^2)(1-r_1^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(1) \\ f_0(1) - Q_1 \end{pmatrix}$$

今设

$$\Delta \cdot R_{n-1} \begin{pmatrix} f_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ f_2(n-1) \\ f_0(n-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ g_1(n-1) \\ g_0(n-1) \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\Delta \cdot R_{n-1} \begin{pmatrix} g_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ g_1(n-1) \\ g_0(n-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ f_1(n-1) \\ f_0(n-1) - Q_{n-1} \end{pmatrix} \quad (6)$$

又由递推关系式(A)可得

$$f_n(n) = r_0 r_n = r_n g_{n-1}(n-1)$$

$$g_n(n) = g_{n-1}(n-1) = r_0$$

$$\Delta \cdot R_n \begin{pmatrix} g_n(n) \\ g_{n-1}(n) \\ \vdots \\ g_1(n) \\ g_0(n) \end{pmatrix} = \Delta \cdot R_n \left[ \begin{pmatrix} g_{n-1}(n-1) \\ g_{n-2}(n-1) \\ \vdots \\ g_0(n-1) \\ 0 \end{pmatrix} + r_n \begin{pmatrix} 0 \\ f_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ f_1(n-1) \\ f_0(n-1) \end{pmatrix} \right]$$

$$= \left( \Delta \cdot R_{n-1} \begin{pmatrix} 0 \\ g_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ g_0(n-1) \end{pmatrix} \right) + r_n \left( \Delta \cdot R_{n-1} \begin{pmatrix} f_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ f_0(n-1) \\ S_n \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ f_{n-1}(n-1) \\ \vdots \\ f_1(n-1) \\ f_0(n-1) - Q_{n-1} \end{pmatrix} + r_n \begin{pmatrix} g_{n-1}(n-1) \\ g_{n-2}(n-1) \\ \vdots \\ g_0(n-1) \\ S_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_n(n) \\ f_{n-1}(n) \\ \vdots \\ f_1(n) \\ f_0(n) - Q_n \end{pmatrix}$$

$$S_n = \Delta \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f_i(n-1) R_{n+1-i} = r_n Q_{n-1}$$

类似地可以证

$$\Delta \cdot R_n \begin{pmatrix} f_n(n) \\ f_{n-1}(n) \\ \vdots \\ f_1(n) \\ f_0(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_n(n) \\ g_{n-1}(n) \\ \vdots \\ g_1(n) \\ g_0(n) \end{pmatrix}$$

这样我们就用归纳法证明了(3)和(4)。下面即可通过直接验证来完成定理的证明:

$$(I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) \begin{pmatrix} (f_n(n) - g_n(n))/(1-r_n) \\ \vdots \\ (f_1(n) - g_1(n))/(1-r_n) \\ 1 \end{pmatrix} = (I_{n+1} + \Delta \cdot R_n)/(1-r_n) \begin{pmatrix} f_n(n) - g_0(n) \\ \vdots \\ f_1(n) - g_1(n) \\ f_0(n) - g_0(n) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{1-r_n} \begin{pmatrix} f_n(n) - g_n(n) \\ \vdots \\ f_1(n) - g_1(n) \\ f_0(n) - g_0(n) \end{pmatrix} + \frac{1}{1-r_n} \begin{pmatrix} g_n(n) \\ \vdots \\ g_1(n) \\ g_0(n) \end{pmatrix} - \frac{1}{1-r_n} \begin{pmatrix} f_n(n) \\ \vdots \\ f_1(n) \\ f(n) - Q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P_n \end{pmatrix}$$

由此得到 Marchenko 方程组的解

$$\begin{cases} y_j(n) = (f_j(n) - g_j(n)) / (1 - r_n) \\ v_j(n) = y_j(n) / P_n \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

$$v_0(n) = 1 / P_n$$

$$P_n = (1 + r_n) \prod_{i=0}^{n-1} (1 - r_i^2)$$

### 3 Marchenko 方程的数值计算

从上面分析可以看到  $n$  阶 Marchenko 方程的解可用  $f_j(k), g_j(k) j = 1, 2, \dots, k$  来表示,  $f_j(n), g_j(n)$  可用  $r_{n-1}, f_j(n-1), g_j(n-1)$  来表示。计算  $r_k, f(k), g(k)$  的乘除法为  $3k$  次。总

计数为  $\sum_{k=1}^n 3k = 3n^2/2$  次, 对于  $n$  阶方程组的解来说, (通常的方法计算量为  $cn^3$  次) 递推算

法仅用  $1.5n^2$  次。可见它的效果相当令人满意。 $f_j(k-1), g_j(k-1)$ , 序列仅在计算  $r_k, f_j(k), g_j(k)$  时用, 因此可将  $f_j(k), g_j(k)$ , 相应放在  $f_j(k-1), g_j(k-1)$  的位置上, 可见存储量 (连同工作单元) 仅需  $5n$ 。

将递推法常与用的高斯消去法的某些特性相比较:

	高斯消去法	递推算法
存储空间	$O(n^2)$	$O(n)$
计算次数	$O(n^3)$	$O(n^2)$
精确度	递推算法优与高斯消去法	见计算实例

我们选用几组  $R_i$ , 分别用两种方法进行计算, 用三种向量范数来检验误差结果表明, 任意一组  $R_i$ , 任取一种范数, 递推算法的精度都优于高斯消去法。从局部看来, 用高斯消去法可使几乎一半的方程准确相等, 用递推算法几乎每个方程都略有误差, 由于后者的误差分布比较均匀, 因此总体效果反优于前者。从它们的范数计算中我们可以清楚地看到。

可见, Marchenko 方程组用递推算法, 计算速度快, 存储空间占用少, 计算精度高, 确是一种行之有效的方法。

附计算实例, 具体计算公式见 (A) 式。

实例注解:

关系式

$$(I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) X_e = B_e$$

$$(I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) X_i = B_i$$

$$F = (I_{n+1} + \Delta \cdot R_n) X - B$$

其中,  $B_e$  为高斯消去法的解,  $B_i$  为递推算法的解,  $F$  是解的误差向量。

在计算机中由随机数生成  $R$ ，分别用高斯消去法和递推算法解方程，再对两个误差向量分别计算它的  $\|F\|$ ,  $\|F\|_2$ ,  $\|F\|_\infty$ 。计算结果见下表。

方 法	范 数		
	$\ F\ _1$	$\ F\ _2$	$\ F\ _\infty$
高斯消去法	0.048867	0.027109	0.022274
递 推 算 法	0.001444	0.000546	0.000300

### 参 考 文 献

- [1] Berryman J G, Greene R R, *Geophysics*, **45**(1980), 213—233.
- [2] Ware J A and Aki K, *J. Acous. Soc. Am.* **45**(1969), 911—921.
- [3] 冯康等编, 数值计算方法, 国防工业出版社, 北京, 1978, 245—252.

## The Inversion Algorithm of Marchenko Equation

Xue Xingheng      Zhang Yunhua

(*Department of Mathematics*)

### Abstract

Marchenko equation is a kind of important and special integral equation in some inverse problems. Discreted by trapezium formula or parabola formula, it can be formed into a special algebra equations. In this paper, the inversion algorithm solving Marchenko equation is related and proved. Compared with the Gauss reduction, its numerical precision increases and its computational and storage capacity decrease.

**Key words:** Marchenko equation, the Gauss reduction, the inversion algorithm.



# 非晶合金带的一种新退火方法

何正明 姜永君

(物理系)

## 摘 要

用直流电直接流过非晶条带样品,达到同时施加磁场和加温退火的双重目的,实现磁场退火。测量了退火样品的磁化曲线和磁致伸缩,讨论了在非晶合金中感生各向异性形成的机理

**关键词:** 感生各向异性, 磁致伸缩, 非晶条带。

**中图法分类号:** O482.64

## 1 引言

非晶合金因长程无序而使其缺乏磁晶各向异性。从宏观上讲,它应该呈现各向同性,然而大量的实验事实证明了非晶合金具有宏观的各向异性。某些与制备过程有关的结构涨落、应力及成分的不均匀性<sup>[1]</sup>等,在一定程度上破坏非晶态结构程序的完全无规性,是导致宏观各向异性的主要原因。研究非晶合金在磁场下退火、应力退火所产生的感生各向异性对改进非晶磁性材料的技术特性,以及研究其微观结构的变化,有着重要的意义。本文用直流电直接流过样品,同时达到加磁场和退火的两个目的,研究了在这种电流退火下某些非晶合金材料的磁化曲线和磁致伸缩的变化。

## 2 实验

### 2.1 实验装置

图1给出实验装置的方框图。可变的直流电可以沿着样品流动,产生横向磁场,并因样品内的焦耳热使其温度升高。

样品在交变磁场下磁化,此交变磁场由亥姆霍兹线圈产生。样品磁化讯号由补偿线圈和待测线圈输出后经积分器与示波器的Y输入相连,而交变磁场讯号直接从磁场回路中的电阻两端取出与示波器X输入相连。从示波器中可观察到样品的磁滞回线,而磁感应强度值也可

用多位毫伏表读出。

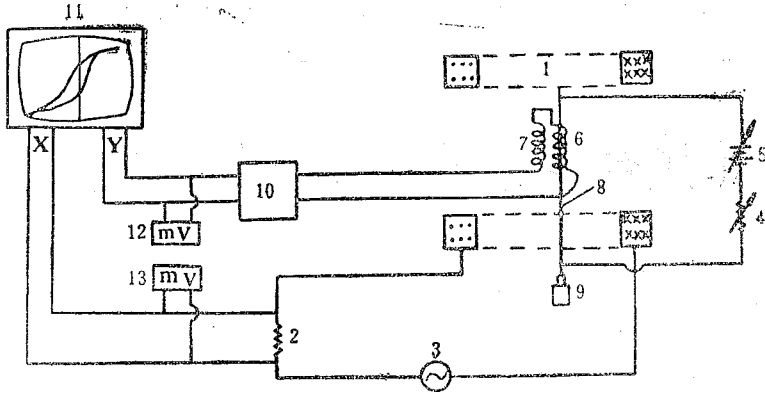


图1 实验装置方框图

1—亥姆霍兹线圈, 2—电阻, 3—交流电源, 4—可变电阻, 5—直流源, 6—待测线圈, 7—补偿线圈, 8—样品, 9—法码, 10—积分器, 11—示波器, 12, 13—毫伏表

## 2.2 实验

由单辊淬火技术制备 Fe-Co-Cr-Ni-Si 和 Fe-Cr-B 两系列非晶条带, 样品宽 1-2mm, 厚 20—40  $\mu\text{m}$ , 经 X 射线鉴定为单相非晶态。本文采用了直流电直接流过样品, 这样同时达到施加磁场和加温退火两个目的。使用这种方法简单, 且达到平衡状态的时间又快, 是一种十分可取的研究方法<sup>[2]</sup>。为了标定通电样品的温度, 在外场下样品达到饱和状态的情况下, 改变炉温测得样品的比饱和磁化强度和磁化强度  $\sigma_s$  随温度  $T$  的变化曲线; 并与样品中直接通入直流电时  $\sigma_s$  随流过样品电流  $I$  (mA) 的变化曲线相比得到流过样品电流  $I$  (mA) 与样品温度  $T$  的关系曲线, 如图 2、图 3 所示。

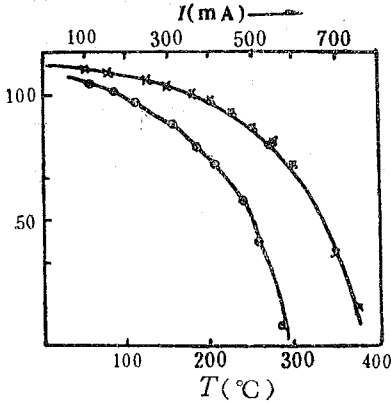


图2  $\text{Fe}_{0.83}\text{Cr}_{0.01}\text{B}_{0.16}$  的  $\sigma_s$  随样品电流  $I$  (mA) 及温度  $T$  的关系

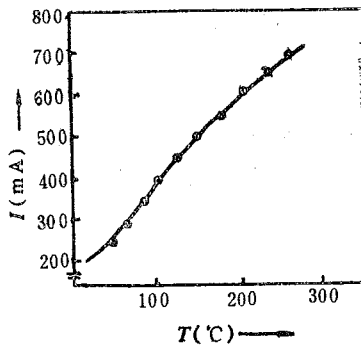


图3 电流  $I$  与样品温度  $T$  的关系

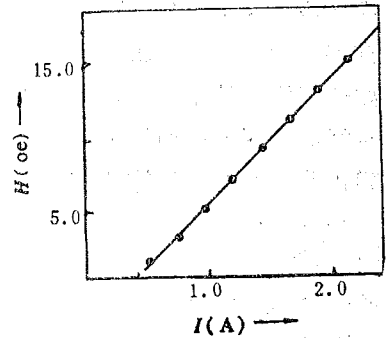


图4 Helmholtz 线圈磁场与磁化电流关系

外加磁场由亥姆霍兹线圈产生, 为了标定亥姆霍兹线圈产生的磁场与所通过的电流的关系, 用高斯计测得  $H-I$  的校准曲线, 如图 4 所示。

比饱和磁化强度用感应法测得 (见实验装置)。通过施加应力在本装置上测得相应的磁致伸缩系数。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 加横向磁场退火的磁化曲线

用 600mA 电流通过样品  $\text{Co}_{76}\text{Fe}_7\text{Ni}_7\text{Cr}_2\text{Si}_8$ , 退火时间 (min) 分别为 5、60、120、180 时, 所得到的磁化曲线由图 5 所示。这些曲线说明横向磁场退火能感生磁各向异性。随着退火时间的增加, 磁化功单调上升 (磁各向异性性能增大), 起始磁化率减小, 矫顽力增大, 从而导致非晶合金材料技术性能的改变。这是由于在磁场退火的情况下, 磁性原子和非磁性原子发生指向有序化重排, 改变了易轴方向引起磁各向异性的变化。对于不同样品横向磁退火的效应是不相同的, 图 6 给出了  $(\text{Fe}_{0.58}\text{Cr}_{0.42})_{84}\text{B}_{16}$  非晶条带在退火电流为 300mA 时退火时间 (min) 分别为 15、60、120 时的磁化曲线。从图中看出当退火时间增

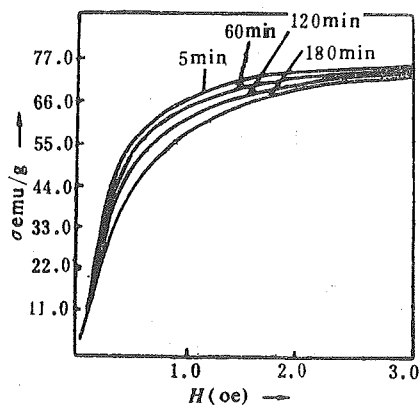


图 5  $\text{Co}_{76}\text{Fe}_7\text{Ni}_7\text{Cr}_2\text{Si}_8$  样品的磁化曲线

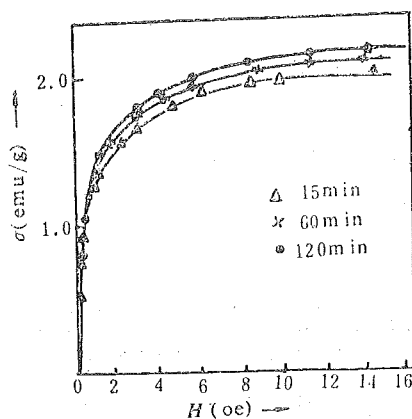


图 6  $(\text{Fe}_{0.58}\text{Cr}_{0.42})_{84}\text{B}_{16}$  样品磁化曲线

加, 磁化功不仅没有增加, 反而减小, 磁化率增大, 矫顽力减小。经过多次重复测量, 并加大退火电流仍有上述结果。这说明 Fe-Cr-B 系非晶合金的横向磁场, 退火效果不明显。其原因可能是由于 Fe-Cr-B 系合金, 有较大的磁致伸缩系数, 其值约  $10^{-5}$  量级, 故应力各向异性占主要地位, 而磁场退火所引起的感生各向异性比它小得多, 几乎可以忽略。而对前者, 样品的磁致伸缩系数  $\lambda_s$  很小, 约  $10^{-7}$ , 故应力各向异性比后者小两个量级, 这时横向磁场退火导致的感生各向异性起了主要的作用。对于 Fe-Cr-B 等具有大磁致伸缩系数的样品, 退火后反而使样品中的结构, 成份的不均匀性减少, 应力减小, 故出现了磁化率上升, 磁化功减小的结果。

#### 3.2 电流退火下样品磁致伸缩的变化

用补偿法测磁致伸缩可用下述公式计算

$$\lambda_s = \mu_0 M_s \Delta H / 3 \Delta \sigma$$

其中  $\Delta \sigma$  为样品上所施加的应力改变,  $\Delta H$  为保证磁化强度不变时, 与应力变化相应的外磁场的变化值。  $M_s$  为样品的饱和磁化强度, 图 7 给出样品  $\text{Co}_{76}\text{Fe}_7\text{Ni}_7\text{Cr}_2\text{Si}_8$  在退火电流分别为 400mA、500mA、600mA 下饱和磁致伸缩  $\lambda_s$  随退火时间的变化关系曲线。从实验结果可看出,  $\lambda_s$  随退火时间的增加而增加, 这点与各向异性性能的变化关系一致, 这说明了两者的相

似起源。在 400mA 和 600mA 的  $\lambda$ - $t$ (min) 曲线上可以看到  $\lambda$  开始随  $t$  的增加而快速增加，出现峰值。然后  $\lambda$  减小到一个极小值，继而又上升。这种变化反应了退火过程中样品结构，成分的变化过程<sup>[8]</sup>。随着温度增加，感生各向异性产生， $\lambda$  增大。但在一定温度范围，样品结构成分趋于均匀，减小应力其结果使磁化率增大， $\lambda$  减小，而出现  $\lambda$  的极小值。当热效应稳定后则随着退火时间的增加， $\lambda$  继续单调上升，最后趋于饱和。

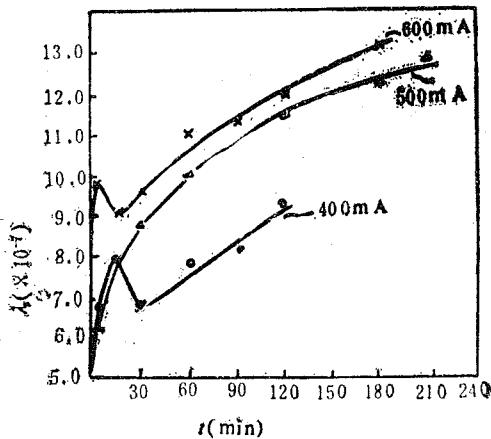


图7  $\text{Co}_{76}\text{Fe}_7\text{Ni}_7\text{Cr}_2\text{Si}_8$  样品的磁致伸缩系数  $\lambda$  随退火时间的变化关系曲线

这种反常行为也许是在此温度下， $\lambda$  随退火时间呈正比这一因素起主要作用，这还有待进一步讨论。

#### 4 结论

证实了用直流电直接通过非晶条带，达到磁场退火是产生感生各向异性的一种好方法。此文实验结果说明横向场退火对  $\lambda$  约为  $10^{-7}$  的样品能产生明显的不可逆感生各向异性，而对  $\lambda$  较大的样品则因样品内应力各向异性占优势，使横向场退火的感生各向异性效果不明显，一般的热处理将减小应力，提高样品的磁化率，减小各向异性能和  $\lambda$  值。

本工作在自制积分器过程中，得到黄教民老师的指导和帮助，物理所赵见高老师提供了部分样品，特此致谢。

## 参 考 文 献

- [1] 林肇华, 物理, 15 (1985), 481.
- [2] Vazquez M, Gonzalez J and Hernando A, *J. Magn. Magn. Mat.*, **53** (1986), 323—329.
- [3] 林肇华, 物理, 13 (1983), 720.

# A New Annealing Method of Amorphous Alloys

He Zhengming      Jiang Yongjun

*(Department of Physics)*

### Abstract

Magnetic field has been created by an electrical current flowing along the amorphous ribbon. This current also produces an increase of the annealing temperature of sample. The magnetic hysteresis loop and magnetostriction of amorphous alloys are measured.

**Key words:** induced magnetic anisotropy, magnetostriction, amorphous ribbon,

# [Ni(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(en)][SO<sub>4</sub>]·2H<sub>2</sub>O晶体的电子吸收 谱的测定和理论解释

李健民 潘国强 王力军

(近代化学系)

## 摘 要

制备了[Ni(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(en)][SO<sub>4</sub>]·2H<sub>2</sub>O的晶体并测定了其d—d电子吸收光谱。采用作者提出的标度径向理论和配位场方法对指定能级进行理论注释，给出的计算值与实验值相差在5%以内。

**关键词：**电子吸收光谱，配位场，标度径向理论。

**中图法分类号：**O641.4

## 1 引言

NiL<sub>6</sub>型络合物一般是“八面体”六配位化合物，其中L是脂肪族的乙二胺或芳香族的2,2'-联吡啶，在它们的晶体结构中，Ni—N的典型键长在2.12—2.14 Å之间，而标题化合物中Ni—N键长为2.06 Å。由于乙二胺是配位化合物中最重要的配体之一，又由于标题化合物中Ni—N键长的特异性，引起我们对这类晶体电子结构的兴趣。鉴于标题化合物的d—d电子吸收光谱尚未见报道，我们制备了该化合物的晶体，测定其d—d电子吸收谱，并利用配位场理论和我们建立的标度径向理论<sup>[1]</sup>，对该谱进行了理论注释，得到的指定能级计算值和实验值相差在5%以内。

## 2 实验结果

### 2.1 晶体样品制备

按文献[2]的方法，取1g NiSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O溶于蒸馏水中，同时取0.2379ml乙二胺，滴入硫酸镍的水溶液中，在室温下搅拌溶液，静置数天后，生成深兰色菱形晶体，其大小为0.5~2mm。经化学分析证实该晶体的化学成份为[Ni(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(en)][SO<sub>4</sub>]·2H<sub>2</sub>O。晶体

1989年6月19日收到。

为单晶, 单斜晶系, 空间群为  $C/2c$ ,  $a = 9.459(4) \text{ \AA}$ ,  $b = 12.192(7) \text{ \AA}$ ,  $c = 12.294(3) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 119.84(4)^\circ$ ,  $z = 4$ .

## 2.2 电子吸收谱的测定

利用中国科学院地球化学研究所装置的小晶体电子吸收光谱仪, 在室温下, 取  $1 \text{ mm}$  大小的晶体样品在  $5000-30000 \text{ cm}^{-1}$  范围内测定其电子吸收谱, 如图 1 所示。

## 3 理论处理与讨论

在配位场理论处理中, 正确选择过渡金属中心离子的  $d$  轨道的径向波函数十分关键。Munor<sup>[3]</sup>报道了在静水压下固体的标度理论, 我们曾引入“非自由度”作为标度, 建立了非自由态  $\text{Co(II)}$ 、 $\text{Ni(II)}$ 、 $\text{Mn(II)}$ 、 $\text{Cu(II)}$  的双- $\xi$  径向波函数。对于具有六个氧、氮原子配位的  $\text{Ni}^{2+}$  离子, 它的  $3d$ -径向波函数可写为<sup>[1]</sup>

$$R_{3d}(r, \Omega) = C^{-1/2} \left\{ 0.534855 \left[ \frac{(2\zeta_1)^7}{b_1} \right]^{1/2} \gamma^2 e^{-\zeta_1 r} + 0.62500 \left[ \frac{(2\zeta_2)^7}{b_1} \right]^{1/2} \gamma^2 e^{-\zeta_1 r} \right\} \quad (1)$$

其中

$$\zeta_1 = 6.1282(1 - 0.351045 \Omega - 0.208760 \Omega^2)$$

$$\zeta_2 = 2.4250(1 - 1.584119 \Omega + 0.32284 \Omega^2)$$

$$c = 1 - 0.668569 \left\{ 0.483577 - \left[ \frac{2(\zeta_1 \zeta_2)^{1/2}}{(\zeta_1 + \zeta_2)} \right]^7 \right\} \quad (2)$$

而

$$\Omega = \frac{N \mu_L e}{\bar{R}} \quad (3)$$

$\Omega$  被定义为非自由度, 单位为 Hartree。(3) 式中  $\bar{R}$  为金属离子和配体间的平均键长, 取原子单位(a.u.),  $\mu_L$  是偶极距, 单位为 Debye,  $N$  为配位数。

由(1)式可求 Slater—Condon 积分  $F^k(\gamma)$ :

$$F^k = \int_0^\infty \int_0^\infty R_{3d}^2(\gamma_1) R_{3d}^2(\gamma_2) \frac{\gamma_1^k}{\gamma_1^{k+1}} \gamma_1^2 \gamma_2^2 d\gamma_1 d\gamma_2 \quad (4)$$

进而计算 Racah 参数  $B, C_D$  在中心场近似下计算出  $\langle \gamma^k \rangle$  和自旋—轨道耦合常数  $\zeta(\gamma)$ 。根据文献[1],  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_6(\text{en})[\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$  晶体中镍离子周围具有四个氧原子和两个氮原子的最近邻, 形成配位数为 6 的混合配位。中心离子  $\text{Ni(II)}$  与氧、氮原子形成具有  $C_{2v}$  的点群对称性, 见图 2。将文献[1]中晶体结构数据和表 1 中的晶场参数, 并考虑平均环境规则<sup>[4]</sup>, 代入晶场矩阵元中计算, 我们获得了各晶场能级的计算结果, 将其与实验结果一起列于表 2。

我们用非自由态离子的标度径向理论导出了第一过渡族二价金属的非自由离子径向波函数, 并利用配位场理论先后计算了二百多种络合晶体的电子结构, 解释了光谱化学系列和 Jørgensen 因子<sup>[5]</sup>, 这些计算结果与实验值均较符合, 从而为用配位场理论定量地解释配位化合物的电子结构提供了一种简明、可行的方法。本法的优点是弱场、强场均适用, 而且对于低对称性( $C_2$ )和无对称性( $C_1$ )的配位化合物亦能给出相当满意的结果。

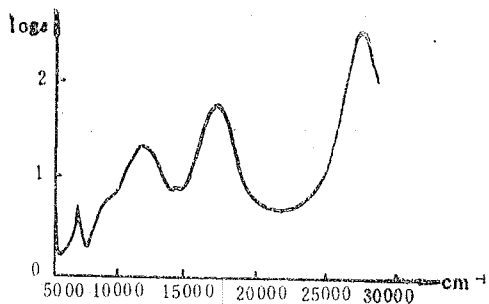


图 1  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  电子吸收谱

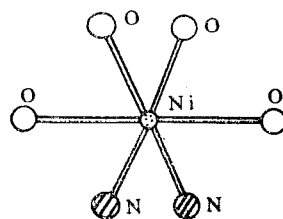


图 2  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  晶体结构

表 1  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  晶体的晶场参数

参 数	配 体		参 数	配 体	
	O	N		O	N
$\Omega$ (Hartree)	0.156028	0.196329	$a_1$	0.56249	0.57039
$\mu$ (Debye)	0.994	1.148	$a_2$	0.65730	0.66652
$R(A)$	2.069	2.061	$\langle \gamma^2 \rangle$	2.15414	2.53014
$t$	0.016670	0.059953	$\langle \gamma^4 \rangle$	12.21812	17.2104
$p^{(2)}$	1.425101	1.67026	$B$	973.1239	902.441
$p^{(4)}$	1.67881	2.14998	$C$	3463.1054	3196.367
$\zeta_1$	5.76126	5.65658	$\zeta_{3d}$	511.3837	473.876
$\zeta_2$	1.84484	1.70104	$N^2$	0.98	0.977

表 2  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  晶体的电子吸收谱计算值与实验值比较

晶场能级	计算值 $\text{cm}^{-1}$	实验值 $\text{cm}^{-1}$	晶场能级	计算值 $\text{cm}^{-1}$	实验值 $\text{cm}^{-1}$
${}^3B_{1g}({}^3A_{2g}, {}^3F)$	0		${}^1T_{2g}({}^1D)$	23660	
${}^3B_{1g}({}^3T_{2g}, {}^3F)$	9810	9300	${}^3A_{1g}({}^3T_{1g}, {}^3p)$	27280	27650
${}^3A_{2g}({}^3T_{2g}, {}^3F)$	10400		${}^3B_{1g}({}^3T_{1g}, {}^3p)$	28060	
${}^3A_{1g}({}^3T_{2g}, {}^3F)$	11850	11500	${}^3B_{2g}({}^3T_{1g}, {}^3p)$	30250	
${}^3B_{1g}({}^3T_{1g}, {}^3F)$	15780		${}^1T_{1g}({}^1G)$	28120	
${}^3B_{2g}({}^3T_{1g}, {}^3F)$	17220	16850	${}^1E_g({}^1G)$	36240	
${}^3A_{1g}({}^3T_{1g}, {}^3F)$	18420		${}^1T_{1g}({}^1G)$	36610	
${}^1E_g({}^1D)$	13630	14050	${}^1A_{1g}({}^1S)$	58660	
${}^1A_{1g}({}^1G)$	22850	22000			



### 参 考 文 献

- [1] 藏荣春、李健民, 中国科技大学学报, 12(1982), 74.
- [2] Peter C H *et al.*, *Aust. J. Chem.*, 37(1984), 921.
- [3] Munor R G, *J. Chem. Phys.*, 67(1977), 3146.
- [4] Rosenberg R C, Root C A, Grory H B, *J. Am. Chem. Soc.*, 97(1975), 21.
- [5] Li Jianmin, Zhang Yongfeng, *J. Struct. Chem. (China)*, 1(1982), 89.

## Experimental Study and Theoretical Interpretation of Electronic Absorption Spectrum of [Ni(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(en)](SO<sub>4</sub>) · 2H<sub>2</sub>O Crystal

Li Jianmin Pan Guoqiang Wang Lijun

(Department of Modern Chemistry)

### Abstract

The electronic absorption spectrum of the crystal of [Ni(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(en)][SO<sub>4</sub>] · 2H<sub>2</sub>O was measured. The experimental results were discussed quantitatively by using the ligand field theory and the radial wave function of nonfree ion Ni(II). The experimental results and the calculated values were found to coincide with each other.

**Key words:** electronic absorption, spectrum, ligand field, scaling radial theory.

# 应用原子极化半径方法对 $\text{CH}_4$ , $\text{SiH}_4$ 和 $\text{GeH}_4$ 的 $X_\alpha$ 方法研究

刘 卫 李俊清 辛厚文

(近代化学系)

## 摘 要

用多重散射  $X_\alpha$  方法 (MS- $X_\alpha$ ) 和原子极化半径的概念对  $\text{CH}_4$ 、 $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  三个分子进行了键长优化, 并计算了分子的部分电离能。优化得到的分子键长值及在最优键长和实验键长两处的电离能计算值与实验数据吻合较好, 且优于其他作者用  $X_\alpha$  方法对  $\text{CH}_4$ 、 $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  分子的计算结果。

**关键词:** 多重散射  $X_\alpha$  方法, 原子极化半径, Norman 规则。

**中图法分类号:** O641.121

## 1 引言

MS- $X_\alpha$  方法自六十年代以来, 已在分子和固体物理等许多方面有了越来越广泛的应用<sup>[1]</sup>。由于方法中 muffin-tin 近似的引入, 计算过程中需要有一种确定原子球半径的方法。一般可采用 Norman 规则来确定原子球半径<sup>[2]</sup>。但对确定含有极性键分子的原子球半径似有缺陷。含有极性键的分子, 由于原子的电负性不同, 会发生电子从电负性小的原子向电负性大的原子迁移, 而 Norman 规则未考虑这种电子迁移效应, 是将中性原子的电荷密度叠加成分子的起始叠代电荷密度。为了改善采用 Norman 规则对极性分子的计算结果, 本文部分作者曾提出了原子极化半径的概念和其计算方法<sup>[3]</sup>, 根据分子中键矩或原子电负性的大小, 让原子带上部分净电荷, 再叠加成分子的起始叠代的电荷密度。本文采用这种方法, 对  $\text{CH}_4$ 、 $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  分子进行了键长的优化和电离能的计算, 与实验数据很好吻合

## 2 计算方法和参数选取

具有四面体结构的  $\text{CH}_4$ 、 $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  分子, 其偶极矩为零, 难以根据实验数据判断

1989年6月22日收到。

分子中各个原子所带的净电荷。这里我们应用文献[3]给出的经验公式确定分子中各个原子所带的净电荷数量,

$$\Delta q = (1 - e^{-\frac{1}{4} |x_A - x_B|^2}) \left(1 - \frac{0.3}{r_{AB}}\right)$$

式中,  $r_{AB}$  是键长 (Å),  $\Delta q$  反映了极性键的电荷迁移数量, 采用原子单位。  $x_A$  和  $x_B$  分别为成键原子 A, B 的电负性, 采用 Pauling 值: C=2.15, Si=1.90, Ge=2.01, H=2.10。因为 C 原子的电负性大于 H 原子, 而 Si、Ge 原子的电负性小于 H 原子, 故在  $CH_4$  分子中 C 原子带净的负电荷, H 原子带正电荷。而在  $SiH_4$  和  $GeH_4$  分子中 Si, Ge 原子带净的正电荷, H 带负电荷。在  $CH_4$ 、 $SiH_4$  和  $GeH_4$  分子中中心原子 C、Si 和 Ge 分别与四个 H 原子相连成键, 计算中取它们带的净电荷数量为上式算出的氢原子所带净电荷的四倍。这里忽略了中心原子与四个氢原子的相关效应。实际上设想 H 原子一个一个地接到中心原子上, 当中心原子带上一定的净电荷后, 它吸引或排斥电子的能力变弱, 因而中心原子所带的净电荷应略小于四倍的  $\Delta q_H$ 。

在计算中, 各原子的  $\alpha$  值均采用 Schwatz 值<sup>[4]</sup>, 球间区和外球区的  $c$  值采用各原子  $\alpha$  值的价电子加权平均。各区分波  $l_{max}$  的取值分别为  $l_c = l_{s_i} = l_{c_c} = 2$ ,  $l_H = 1$ ,  $l_{out} = 3$ 。外球中心取在中心原子上, 并令其与氢原子的原子球重叠量为 0.1 Å, 以得到外球半径。轨道能量和电离能收敛于  $10^{-5}$  Rydberg。

由于用原子极化半径方法确定各原子球的半径与 Norman 规则一样, 仍采用重叠球模型, 故计算值与原子球的重叠量有关。为了便于比较, 计算时中心原子和氢原子的重叠量始终固定在 27% 左右。

### 3 计算结果与讨论

#### 3.1 键长的能量优化

我们采用原子极化半径方法先后对  $CH_4$ 、 $SiH_4$  和  $GeH_4$  分子的键长进行了优化。优化

表 1  $CH_4$  的键长优化数据

$R_{C-H}$	2.020	2.067	2.109	2.150	2.200	2.240
$\Delta q_H$	0.03550	0.03582	0.03608	0.03634	0.03664	0.03686
$\Delta q_C$	-0.14200	-0.14328	-0.14432	-0.14536	-0.14656	-0.14744
$-E/T$	0.987167	0.991199	0.994242	0.997701	1.000140	1.002486
$E_{总}$	-80.56495	-80.58013	-80.58823	-80.59189	-80.59052	-80.58830

表 2  $SiH_4$  的键长优化数据

$R_{Si-H}$	2.700	2.800	2.880	3.000	3.160
$\Delta q_H$	-0.00786	-0.00793	-0.00799	-0.00807	-0.00816
$\Delta q_{Si}$	0.03144	0.03172	0.03196	0.03228	0.03264
$-E/T$	0.998341	0.999120	0.999761	1.000492	1.001201
$E_{总}$	-582.59398	-582.61640	-582.62639	-582.61639	-582.57180

时,对于键长变化的步长,  $\text{CH}_4$  为 0.05 原子单位左右,  $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  为 0.15 原子单位左右,具体取值及优化的数据结果分别列在表 1、表 2、表 3 中。以下能量单位一律取 Rydberg,其它量取如原子单位。

表 3  $\text{GeH}_4$  的键长优化数据

$R_{\text{Ge-H}}$	2.700	2.834	3.000	3.195	3.380
$\Delta q_{\text{H}}$	-0.00160	-0.00162	-0.00164	-0.00166	-0.00168
$\Delta q_{\text{Ge}}$	0.00640	0.00648	0.00656	0.00664	0.00672
$-E/T$	0.999702	0.999873	1.000039	1.000181	1.000280
$E_{\text{总}}$	-4155.05117	-4155.5555	-4155.5694	-4155.5403	-4155.4890

利用表中数据我们作出了总能量——键长的关系图。见图 1、图 2、图 3。

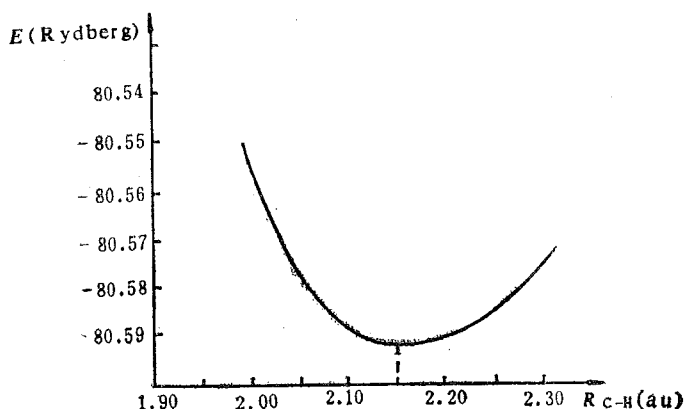


图 1  $\text{CH}_4$  的能量——键长优化曲线

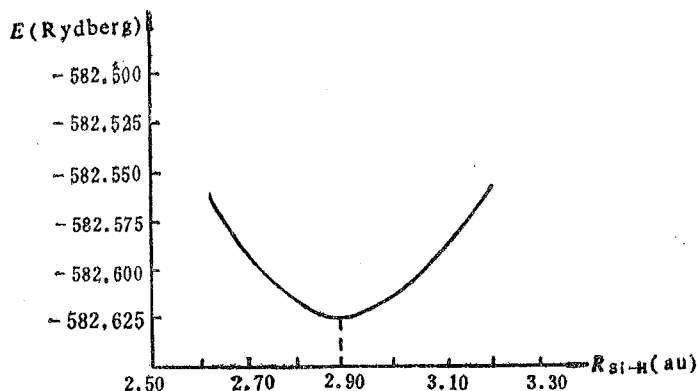


图 2  $\text{SiH}_4$  的能量——键长优化曲线

图中纵坐标为总能量,横坐标为键长。曲线的极小点为总能量的最低值,它对应着体系的最优键长。从图 1、图 2 和图 3,我们得到  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$  和  $\text{GeH}_4$  分子的最优键长值分别为  $R_{\text{C-H}} = 2.15$ ,  $R_{\text{Si-H}} = 2.88$ ,  $R_{\text{Ge-H}} = 3.00$ ,其数值比文献 [5]、[7] 给出的最优键长值更接近实验键长(见后表 4、表 5、表 6),但  $\text{CH}_4$  的最优键长数值比文献 [6] 给出的最优键长值稍差。究其原因,主要是  $\text{CH}_4$  分子采用的原子球重叠量偏小的缘故。据我

们以往的 $\chi_\alpha$ 法计算,对于较轻原子构成的分子,其重叠量选取应比含有较重原子的分子大一些。从 $\text{CH}_4$ 的数据表1看,各点的 $-E/T$ 一比值普遍小于1,也说明其重叠量选的不够,因为,随着重叠量增大过程, $-E/T$ 比从小于1向大于1方向增加, $-E/T$ 比等于1对应着重叠量的最佳值。故适当增加重叠量,我们确信其优化结果会得到改善。

从表1、表2和表3,我们还可以看出,三种分子体系最优键长对应的几何构型处的Virial比值非常接近于1,此事实反映了应用原子极化半径方法确定的平衡构型即满足能量最低要求,又符合Virial定理。从理论计算的角度考虑,这种计算结果是可靠的

另外,从能量—键长曲线反映出,优化曲线极小点邻近,斜率数值不大。如对 $\text{CH}_4$ 分子 $\frac{\Delta E}{\Delta R} \approx 0.04 \text{ Rydberg/au}$ ,对 $\text{SiH}$ 和 $\text{GeH}$  $\frac{\Delta E}{\Delta R} \approx 0.06 \text{ Rydberg/au}$ ,即在最优键长附近,0.05au范围内,总能量变化不超过0.06Rydberg。因而确定最优键长时的微小误差,不会给计算结果带来太大的误差。

### 3.2 电离能计算

为了进一步检验原子极化半径方法的有效性,我们还在得到的最优键长以及实验键长两处对电离能进行了计算。计算结果和实验数据及其它文献对相同体系的计算结果都列在表4、表5和表6中。(注:表中文献[6],[7]对应的数据,给出的键长是优化键长,而电离能值是在实验键长下的计算值)。

表4  $\text{CH}_4$ 的计算结果

		本文		$\chi_\alpha^{[5]}$	$\chi_\alpha^{[6]}$	实验 <sup>[5]</sup>
电 离 能	$1t_2$	1.064*	1.083**	1.062	1.140	1.03
	$2a_1$	1.629	1.658	1.645	1.729	1.70
	$1a_1$	21.85	21.84	21.89	21.97	21.40
总能量		-80.590	-80.580	-80.246	-80.238	-81.044
$R_{C-H}$		2.15	2.067	2.150	2.109	2.067

\* 本文最优键长处电离能计算值

\*\* 本文实验键长处电离能计算值

从表4、表5和表6看出本文最优键长处电离能计算值普遍小于实验键长处电离能计算值,但两者相差不大,差值在0.00~0.03Rydberg范围之内。两组电离能计算值都与实验电离能数据相符合,但实验键长处计算结果却好于优化键长处的计算结果,它反映了 $\chi_\alpha$ 方

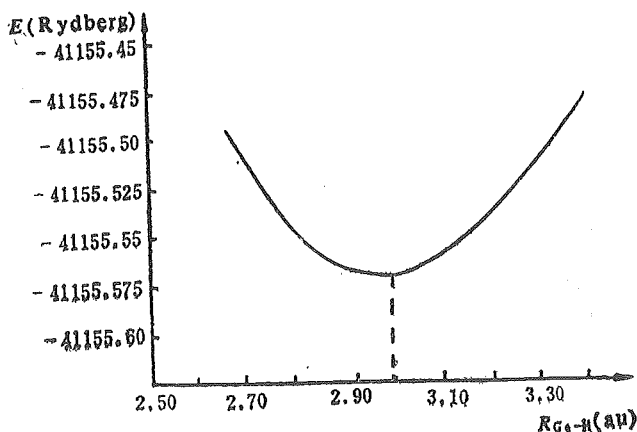


图3  $\text{GeH}_4$ 的能量—键长优化曲线

表 5 SiH<sub>4</sub> 的计算结果

		本文		$\chi_a^{[5]}$	$\chi_a^{[7]}$	实验 <sup>[5]</sup>
电 离 能	2t <sub>2</sub>	0.878*	0.913**	0.963	0.912	0.916
	3a <sub>1</sub>	1.271	1.286	1.360	1.302	1.336
	13t <sub>2</sub>	8.018	8.002	8.388	7.963	7.904
	2a <sub>1</sub>	11.076	11.053	11.444	11.000	10.956
总能量		-582.620	-582.616	-582.357	-581.792	
R <sub>C-H</sub>		2.88	2.80	3.160	2.88	2.80

表 6 GeH<sub>4</sub> 的计算结果

		本文		$\chi_a^{[5]}$	$\chi_a^{[9]}$	实验 <sup>[5]</sup>
电 离 能	4t <sub>2</sub>	0.878*	0.913**	0.962	0.912	0.916
	4a <sub>1</sub>	1.302	1.343	1.372	1.390	1.35
	3t <sub>2</sub>	2.846	2.895	3.113	2.787	
	2e	2.844	2.892	3.112	2.787	
	2t <sub>2</sub>	9.061	9.109	9.328	8.971	9.537
总能量		-4155.5694	-4155.5555	-4155.292	-4154.7989	
R <sub>Ge-H</sub>		3.00	2.834	3.380	3.195	2.834

\* 本文最优键长处电离能计算值。

\*\* 本文实验键长处电离能计算值。

法电离能计算中键长结构数据比起总能量数据来得重要。

与前人  $\chi_a$  方法计算结果比较, 实验键长处 CH<sub>4</sub>、GeH<sub>4</sub> 电离能计算值优于文献 [6] [7] 的实验键长处电离能计算值, 而 SiH<sub>4</sub> 比文献 [7] 的计算结果略差。优化键长处电离能计算值与文献 [5] 给出的优化键长处电离能计算值比较略好一些。

表中还给出了总能量的计算结果, 三种分子体系都比文献的总能量计算结果要好。

总之, 对于极化程度不高的 CH<sub>4</sub>、SiH<sub>4</sub> 和 GeH<sub>4</sub> 分子, 适当考虑了极化电荷的影响, 其计算结果有了较明显的改进, 对于极化程度较大的分子体系, 采用原子极化半径选择原子球半径, 相信会更有效的改进  $\chi_a$  计算结果。

## 参 考 文 献

- [1] 李俊清, 量子化学中的 $X_\alpha$ 方法及其应用, 安徽科学技术出版社, 1984, 第六章。
- [2] Norman J G Jr., *Mol. Phys.*, **31** (1976), 1191.
- [3] 李俊清、江平、王俭、刘卫、辛厚文, 中国科学技术大学学报. **18** (1988), 180
- [4] Schwarz K, *Phys. Rev.*, **B5** (1972), 2466.
- [5] 张明瑜、于微舟、江元生、唐敖庆, 中国科学, **B3** (1984), 203
- [6] Danese J B, *Int. J. Quant. Chem.*, **6S** (1972), 209.
- [7] Sink M L, Juras G E, *Chem. Phys. Lett.*, **20** (1973), 474.

## $X_\alpha$ Method Study on $\text{CH}_4$ , $\text{SiH}_4$ and $\text{GeH}_4$ With the Polarized Radii

Liu Wei Li Junqing Xin Houwen

(Department of Modern Chemistry)

### Abstract

The optimization of bond lengths and the ionization potentials of  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$  and  $\text{GeH}_4$  have been calculated by MS- $X_\alpha$  method with the polarized radii. The optimized bond lengths and the calculated ionization potentials at both optimized bond lengths and experimental bond lengths are in good agreement with the experimental data and are better than other authors' results so far reported.

**Key words:** multiple-scattering  $X_\alpha$  method, atomic polarized radii, Norman's criterion.

# 裂纹问题的一种边界元解

吕 品

(近代力学系)

## 摘 要

根据线弹性断裂力学分析中常用的叠加方法,把一个有限域内的裂纹问题分解成无裂纹部分和裂纹部分的叠加来求解。其法只需较少的离散单元就可达到理想的精度,是求解裂纹问题的一种简单有效的方法。

**关键词:** 线弹性断裂力学, 边界元法, 位移不连续方法。

**中图法分类号:** O39

## 1 引言

由于边界积分方程方法用于求解应力集中问题时,所需的单元比有限元少,精度较高,所以在断裂力学领域里的应用受到了越来越多的重视,并发展了多种处理手段。详细的讨论可见<sup>[1]</sup>。

本文根据线弹性断裂力学分析中常用的叠加方法,把一个有限域内的裂纹问题分解成无裂纹部分和裂纹部分的叠加来求解。对无裂纹部分用间接积分方程求解,可以提高计算速度<sup>[2]</sup>。对于裂纹部分则用位移不连续方法<sup>[4]</sup>,它是以不连续位移作为待求参数,可以很自然地用以描述裂纹单元。根据原问题的边界条件,可把两部分的方程耦合在一起,求解待定参量,进而可求得域内应力或裂纹尖端的应力强度因子。计算表明,用这种方法处理裂纹问题时,只需较少的离散单元就可达到理想的精度。是求解线弹性断裂力学问题的一条有效的途径。

## 2 求解途径

如图1(a)是一个二维线弹性裂纹问题,裂纹边界 $\Gamma$ 上作用着边界力 $p$ ,外边界 $C=C_0+C_1$ 上分别给定了应力和位移边界条件 $t$ 和 $u$ 。根据叠加原理,可把(a)分解成(b)和(c)两部分。(b)的外边界几何形状与实际问题的相同,但内部无裂纹。外边界相应于 $C_0$ 和 $C_1$ 作用着待定的边界条件 $t^1$ 和 $u^1$ ,因而在相应于原问题的裂纹位置上引起待求力

1989年11月9日收到。



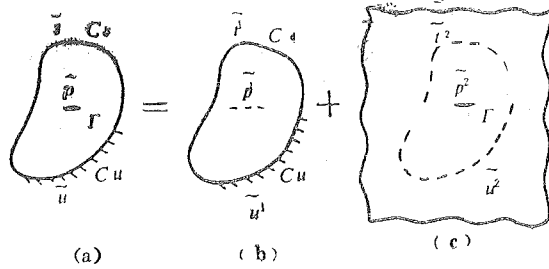


图 1

$p^1$ 。(c) 则是含有与实际问题同样裂纹的无限域问题。裂纹面上作用着未定的边界力  $p^2$ ，因而在相应于原问题的边界位置上引起待定的  $t^2$  和  $u^2$ 。因此，根据叠加原理有

$$t^1 + t^2 = t \quad \text{在 } C_s \text{ 上} \quad (2.1)$$

$$u^1 + u^2 = u \quad \text{在 } C_u \text{ 上} \quad (2.1)$$

$$p^1 + p^2 = p \quad \text{在 } \Gamma \text{ 上} \quad (2.1)$$

这样的处理简化了问题的求解。因为 (b) 是个无裂纹问题，求解的方法已很成熟，而 (c) 则是无限域的裂纹问题，这比有限域的情况要容易解决的多。

### 3 求解方法

#### 3.1 问题 (b) 的求解

我们用间接积分方程来解 (b)。取单层势<sup>[3]</sup>

$$u_l^1(X) = \int_{\sigma} U_{lm}(X, \zeta) v_m(\zeta) ds(\zeta) \quad (3.1)$$

式中  $u_l^1(X)$  表示  $X$  点的  $l$  方向位移，上标 1 表示相应于问题 (b)， $v_m(\zeta)$  是边界上的待求函数。利用应力应变关系，域内  $X$  点的应力可表示为

$$\sigma_{lm}^1(X) = \int_{\sigma} D_{klm}(X, \zeta) v_k(\zeta) ds(\zeta) \quad (3.2)$$

当  $X$  趋于光滑边界点  $X_0$  时，有

$$u_l^1(X_0) = \int_{\sigma} U_{lm}(X_0, \zeta) v_m(\zeta) ds(\zeta) \quad \text{当 } X_0 \in C_u \quad (3.3)$$

$$t_l^1(X_0) = \frac{1}{2} v_l(X_0) + \int_{\sigma} T_{\sigma m}^*(X_0, \zeta) v_m(\zeta) ds(\zeta) \quad \text{当 } X_0 \in C_s \quad (3.4)$$

在 (3.1) ~ (3.4) 中

$$\left\{ \begin{aligned} U_{lm}(X, \zeta) &= \frac{1}{8\pi\mu(1-\nu)} \left[ (3-4\nu) \ln \frac{1}{r} \cdot \delta_{lm} + r_{,s_l} \cdot r_{,sm} \right] \\ T_{lm}^*(X, \zeta) &= -\frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left[ \frac{\partial r}{\partial n_s} \{ (1-2\nu)\delta_{lm} + 2r_{,s_l} r_{,sm} \} \right. \\ &\quad \left. - (1-2\nu) \{ r_{,sm} n_l(X) - r_{,s_l} n_m(X) \} \right] \\ D_{klm}(X, \zeta) &= \frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left[ (1-2\nu) \{ \delta_{kl} r_{,sm} + \delta_{km} r_{,sl} - \delta_{lm} r_{,sk} \} \right. \\ &\quad \left. + 2r_{,s_l} r_{,sm} r_{,sk} \right] \quad k=1,2,3 \end{aligned} \right. \quad (3.5)$$

及

$$r^2 = (x_1 - \zeta_1)^2 + (x_2 - \zeta_2)^2$$

式中  $l$ 、 $m$  可分别取 1, 2,  $(x_1, x_2)$  和  $(\zeta_1, \zeta_2)$  分别是  $X$  和  $\zeta$  点的坐标。将边界  $C$  离散成  $M$  个常数单元, 其中  $C_u$  离散成  $M_1$  个,  $C_\sigma$  离散成  $M_2$  个,  $M = M_1 + M_2$ , 则 (3.2)~(3.4) 可离散成

$$u_l^1(X^i) = \sum_{i=1}^M \left[ \int_{C_i} U_{lm}(X^i, \zeta) ds(\zeta) \right] v_m(\zeta^i) = \sum_{i=1}^M G_{lm}^{ij} v_m(\zeta^i) \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} t_l^1(X_0^i) &= \frac{1}{2} v_l(X_0^i) + \sum_{i=1}^M \left[ \int_{C_i} T_{lm}^*(X_0^i, \zeta) ds(\zeta) \right] v_m(\zeta^i) \\ &= \frac{1}{2} v_l(X_0^i) + \sum_{i=1}^M H_{lm}^{ij} v_m(\zeta^i) \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\sigma_{lm}^1(X^i) = \sum_{i=1}^M \left[ \int_{C_i} D_{klm}(X^i, \zeta) ds(\zeta) \right] v_m(\zeta^i) = \sum_{i=1}^M H_{klm}^{*ij} v_m(\zeta^i) \quad (3.8)$$

式中系数  $G_{lm}^{ij}$ 、 $H_{lm}^{ij}$ 、 $H_{klm}^{*ij}$  见附录。

### 3.2 问题 (c) 的求解

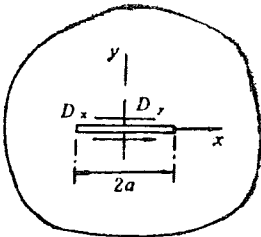


图 2

问题 (c) 可用位移不连续方法来求解。这一方法在 [4] 中有详细介绍。假设在一无限大域内存在一位错, 如图 2, 令

$$D_x = u_x(x, 0_-) - u_x(x, 0_+)$$

$$D_y = u_y(x, 0_-) - u_y(x, 0_+)$$

表示裂纹的张开位移。并且在裂纹单元上是常量。则对于一个单元, 域内任一点的位移和应力为

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(1-\nu)f_{,rr} - yf_{,xx} & -(1-2\nu)f_{,x} - yf_{,xy} \\ (1-2\nu)f_{,x} - yf_{,xy} & 2(1-\nu)f_{,r} - yf_{,ry} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_x \\ D_y \end{Bmatrix} \quad (3.9)$$

$$\begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = 2\mu \begin{bmatrix} 2f_{,xx} + yf_{,xyy} & f_{,yy} + yf_{,yyy} \\ -yf_{,xyy} & f_{,yy} - yf_{,yyy} \\ f_{,yy} + yf_{,yyy} & -yf_{,xyy} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_x \\ D_y \end{Bmatrix} \quad (3.10)$$

其中

$$\begin{aligned} f(x, y) &= -\frac{1}{4\pi(1-\nu)} \left[ y \left( \arctg \frac{y}{x-a} - \arctg \frac{y}{x+a} \right) \right. \\ &\quad \left. - (x-a) \ln \sqrt{(x-a)^2 + y^2} + (x+a) \ln \sqrt{(x+a)^2 + y^2} \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

式中  $\mu$  和  $\nu$  分别是剪切模量和泊松比。把图 1 (c) 中的裂纹离散成  $N$  个单元, 则任一点  $i$  的位移和应力为

$$u_i^z = \sum_{j=1}^N B^{ij} D_j \quad (3.12)$$

$$\sigma_i^z = \sum_{j=1}^N A^{ij} D_j \quad (3.13)$$

裂纹表面的力边界条件为

$$p_i^z = \sum_{j=1}^N A^{*ij} D_j \quad (3.14)$$

关于  $B^{ij}$ 、 $A^{ij}$ 、 $A^{*ij}$  的具体表达式可见<sup>[4]</sup>。

### 3.3 实际问题(a)的解

利用边界条件关系 (2.1), 可把 3.1 和 3.2 中的方程耦合在一起, 求解实际问题。

将离散后的方程 (3.6) ~ (3.8), (3.12) ~ (3.14) 代入 (2.1)。经整理后可写成如下的矩阵形式  
在外边界

$$\begin{matrix} t \\ 2M_2 \end{matrix} = \begin{matrix} H \\ 2M_2 \times 2M \end{matrix} \cdot \begin{matrix} v \\ 2M \end{matrix} + \begin{matrix} A \\ 2M_2 \times 2N \end{matrix} \cdot \begin{matrix} D \\ 2N \end{matrix} \quad (3.15)$$

$$\begin{matrix} u \\ 2M_1 \end{matrix} = \begin{matrix} G \\ 2M_1 \times 2M \end{matrix} \cdot \begin{matrix} v \\ 2M \end{matrix} + \begin{matrix} B \\ 2M_1 \times 2N \end{matrix} \cdot \begin{matrix} D \\ 2N \end{matrix} \quad (3.16)$$

在裂纹边界

$$\begin{matrix} P \\ 2N \end{matrix} = \begin{matrix} H^* \\ 2N \times 2M \end{matrix} \cdot \begin{matrix} v \\ 2M \end{matrix} + \begin{matrix} A^* \\ 2N \times 2N \end{matrix} \cdot \begin{matrix} D \\ 2N \end{matrix} \quad (3.17)$$

即

$$\begin{Bmatrix} t \\ u \\ P \end{Bmatrix}_{2(N+M)} = \begin{bmatrix} H & A \\ G & B \\ H^* & A^* \end{bmatrix}_{2(N+M) \times 2(N+M)} \begin{Bmatrix} v \\ D \end{Bmatrix}_{2(N+M)} \quad (3.18)$$

最后归结为求解  $2(N+M)$  阶线性代数的方程组, 定出参量  $v$  和  $D$ ,

求出  $v$  和  $D$  后, 域内的应力和位移场就可以得到。裂纹尖端的应力强度因子可用能量法求得。裂纹表面的应变能为<sup>[4]</sup>

$$W_L = \sum_{j=1}^N P_j a^j D_j^L \quad L = \text{I, II} \quad (3.19)$$

式中  $a^j$  表示第  $j$  个裂纹单元的长度,  $L = \text{I, II}$  分别表示是  $y$  方向和  $x$  方向的分量, 得到的相应于 I 型和 II 型裂纹的应变能。应变能与应力强度因子的关系为<sup>[7, 4]</sup>

$$\frac{\partial W_L}{\partial a} = \frac{1-\nu}{\mu} K_L^2 \quad L = \text{I, II} \quad (3.20)$$

具体做时, 可给裂纹一个微小增量  $\Delta a$ , 则有

$$\frac{\partial W_L}{\partial a} \doteq [W_L(a + \Delta a) - W_L(a - \Delta a)] / 2\Delta a \quad (3.21)$$

由此就可求得 I, II 型应力强度因子。

#### 4 数值结果

我们用上述方法计算了具有中心裂纹的矩形板，在两边受拉的算例。如图 3。

取  $a/b=0.1, h/b=1.5, \nu=0.1, p/u=10^{-3}$

外边界取 30 个单元，裂纹面上分别取 5、7、9 个裂纹单元，与无限大裂纹板受拉伸的结果比较如表 1

表 1

单元数	5	7	9	精确值
$K_I$	1.8393	1.8088	1.7917	1.781
误差%	3.2	1.56	0.6	

可以看出，随着裂纹单元的增加，精度明显提高。我们还增加了外边界单元，进行了计算，但发现精度提高不明显。这表明裂纹单元的数目对裂纹尖端应力场的计算精度影响甚大。

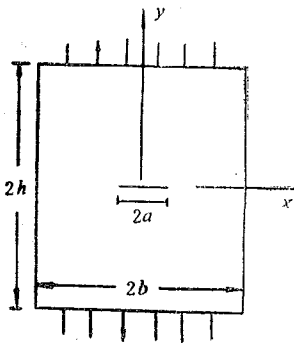


图 3

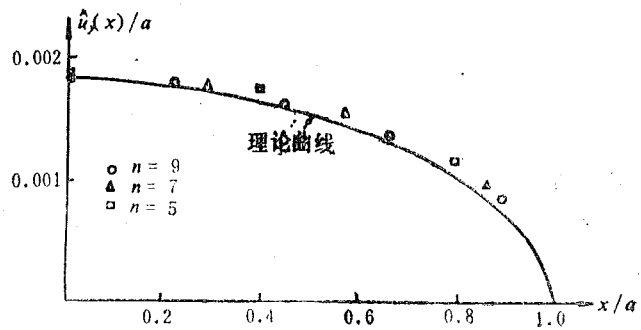


图 4 裂纹张开位移

表 2

$a/b$	$N$	$F(a/b) = K_I / \sigma_0 \sqrt{\pi a}$		误差 %
		BEM	[6]	
0.1	9	1.01085	1.0048	0.6
0.2	9	1.041	1.0246	1.6
0.3	9	1.091	1.058	3.1
	11	1.082		2.27
0.4	11	1.153	1.125	2.47
0.5	11	1.245	1.21	2.9
0.6	13	1.35	1.32	2.4

图4给出了在不同的裂纹离散单元数目下所计算的裂纹张开位移值与理论曲线的比较。可以看出,随着 $N$ 增大,计算值趋于理论值,但在靠近裂纹尖端处( $x/a=1$ )误差较大。这是因为我们采用的是常数单元,而在裂纹尖端附近的位移曲线的曲率很大。

另外,我们还计算了有限宽板的裂纹问题,其结果在表2中给出。可以看出,随着裂纹与板宽之比增加,单元的划分必须加密,才能保证精度。

## 5 讨论

本文根据线弹性断裂力学的特点,利用叠加原理,把较复杂的断裂力学问题化成较简单的问题处理。本文的方法简单,对边界积分方程不需作特别的处理,并且程序编制方便,是处理裂纹问题的较好方法。

本文的方法还可用于求解混合型断裂问题及推广到三维情形。

## 附 录

在(3.6)~(3.8)中要求积分

$$G_{im}^{ij} = \int_{c_j} U_{im}(X^i, \zeta) ds(\zeta)$$

$$H_{im}^{ij} = \int_{c_j} T_{im}^v(X^i, \zeta) ds(\zeta)$$

$$H_{im}^{*ij} = \int_{c_j} D_{kim}(X^i, \zeta) ds(\zeta)$$

它们可通过坐标变换积分得到显式<sup>[5]</sup>,如图A,12表示第 $j$ 个单元,局部坐标 $p-q$ ,整体坐标 $x-y$ , $c_j$ 垂直于局部坐标 $p$ ,因此有

$$G_{im}^{ij} = \frac{r \cos \theta}{8\pi\mu(1-\nu)} [(3-4\nu)\{\operatorname{tg}\theta(1-\ln r) - \theta\} \delta_{im} + \theta \beta_{pi} \beta_{pm} + (\operatorname{tg}\theta - \theta) \beta_{qi} \beta_{qm} + (\beta_{pi} \beta_{qm} + \beta_{qi} \beta_{pm}) \ln r] |_1^2$$

$$H_{im}^{ij} = -\frac{1}{4\pi(1-\nu)} [ \{-n_p(X^i) \cdot 2(1-\nu)\theta - n_q(X^i)(1-2\nu) \ln r\} \delta_{im} + \left\{ n_p(X^i) \frac{1}{2} \sin 2\theta + n_q(X^i) \sin^2 \theta \right\} (\beta_{qi} \beta_{qm} - \beta_{pi} \beta_{pm}) + \left\{ -n_p(X^i) \sin^2 \theta - n_q(X^i) \left( \theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) \right\} (\beta_{pi} \beta_{qm} + \beta_{qi} \beta_{pm}) + (1-2\nu) \{ n_p(X^i) \ln r - n_q(X^i) \cdot \theta \} (\beta_{pi} \beta_{qm} - \beta_{qi} \beta_{pm}) - n_q(X^i) \cdot 2 \ln r \beta_{qi} \beta_{qm} ] |_1^2$$

$$H_{kim}^{*ij} = S_1 [\beta_{pk} \beta_{pi} \beta_{pm} (S_2 \cdot \theta + \theta + \sin \theta \cdot \cos \theta) + \beta_{pk} (\beta_{pi} \beta_{qm} + \beta_{qi} \beta_{pm}) \cdot (S_2 \ln r + \sin^2 \theta) + \beta_{pk} \beta_{qi} \beta_{qm} (-S_2 \cdot \theta + \theta - \sin \theta \times \cos \theta) + \beta_{qk} \beta_{pi} \beta_{pm} (-S_2 \cdot \ln r + \sin^2 \theta) + \beta_{qk} (\beta_{pi} \beta_{qm} + \beta_{qi} \beta_{pm}) \cdot (S_2 \cdot \theta + \theta - \sin \theta \cdot \cos \theta) + \beta_{qk} \beta_{qi} \beta_{qm} (S_2 \cdot \ln r - \sin^2 \theta + 2 \ln r)] |_1^2$$

式中,  $l, m, k$  分别取  $x, y$ 。

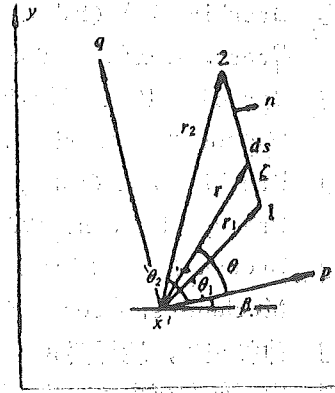


图 A

$$\begin{bmatrix} \beta_{p,x} & \beta_{p,y} \\ \beta_{q,x} & \beta_{q,y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}$$

$n_p(X^i), n_q(X^i)$  是  $X^i$  所在单元  $c_i$  在  $p-q$  坐标系下的方向余弦, 它与  $x-y$  坐标系下的关系为

$$\begin{Bmatrix} n_p(X^i) \\ n_q(X^i) \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} n_x(X^i) \\ n_y(X^i) \end{Bmatrix}$$

及

$$S_1 = \frac{1}{4\pi(1-2\nu)}, \quad S_2 = 1 - 2\nu$$

### 参 考 文 献

- [1] Brebbia C A (Ed.), Progress in Boundary Element Method, Pentech Press, London, 1983, Vol. 2,
- [2] Banerjee P K, Mukherjee S (Eds.), Development in Boundary Element Method-3, Elsevier Applied Science Publishers, London, 1984.
- [3] Brebbia C A (Ed.), Progress in Boundary Element Method, Pentech Press, London, 1981, Vol. 1.
- [4] Crouch S L, Starfield A M, Boundary Element Methods in Solid Mechanics, George Allen & Unwin Ltd. 1983.
- [5] 神谷纪生, 境界要素法の基础, 培风馆 1982.
- [6] 中国航空研究院, 应力强度因子手册, 科学出版社, 北京, 1981.
- [7] Parker A P, The Mechanics of Fracture and Fatigue E. & F N. Spon Ltd., London, 1981.

# A Boundary Element Solution for the Crack Problems

Lu Pin

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

Based on the properties of the linear elastic fracture mechanics, a crack problem of the finite region can be solved by superposition of an uncracked part of the finite region and a cracked part of infinite domain. Numerical examples show that good results could be obtained with relatively few elements when using the treatment. Therefore, it is a kind of effective method for solving the problems of linear elastic fracture mechanics.

**Key Words:** linear elastic fracture mechanics, boundary element method, method of displacement discontinuity.

# 谐振传输网络的递推分析法

葛云 全茂达

(电子技术基础部) (系统科学和管理科学系)

## 摘 要

依据状态方程导出计算一般谐振传输网络暂态响应和稳态响应的递推分析法, 此法不仅以封闭解的形式给出谐振传输网络的时变网络函数, 而且给出相应的傅氏级数, 从而得到响应的频谱。

**关键词:** 谐振传输网络, 递推分析法, 频谱, 网络函数。

**中图法分类号:** TN911.1

## 1 引言

常用的一般谐振传输网络如图1所示。这种网络广泛用于通讯系统的时分多路传输器、频分多路传输器和脉冲编码调制器中。有许多学者对此电路进行过研究<sup>[1-5]</sup>。他们对开关闭合时间 $\tau$ 都事先提出一些假设, 或者认为 $\tau$ 是回路 $C_1, L, C_2$ 的谐振周期 $T_{LC}$ 的一半, 或者认为 $\tau$ 相对于开关周期 $T$ 的比 $(\tau/T)$ 趋近于零。这些都是近似的假设, 目的在于简化对电路的分析或得到适当设计公式。文献[1]提出的近似假设比较成功, 得到的解收敛于谐振传输网络的精确解。至于暂态响应的分析一般都很粗糙。本文无须对 $\tau$ 事先提出假设而是根据网络的状态方程, 采用递推法计算出来, 从而得到输入信号 $e''$ 的精确的暂态响应和稳态

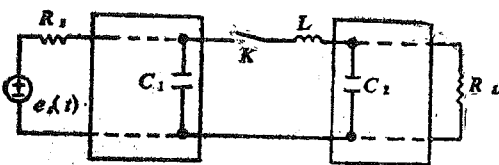


图1 一般谐振传输网络

响应。此法也给出了表征谐振传输网络的精确的时变网络函数, 因而可以给出响应的频谱。此法的另一优点是适合计算机仿真和实验。

## 2 分析方法

假设开关是瞬间完成闭合和开启动作的。开关动作的周期是 $T$ 。设在 $KT$ 和 $(K+1)T$

1989年8月28日收到。



这个周期内开关闭合期间的时间为  $T_{1K}$ , 开启期间的的时间是  $T_{2K}$ , 开关动作的时刻是  $KT + \tau_K$ , 即

$$T_{1K} = (t | KT \leq t < KT + \tau_K), \tau_K < T \quad (1)$$

$$T_{2K} = (t | KT + \tau_K \leq t < KT + T), \quad (2)$$

$\tau_K$  就是第  $K$  个周期后开关闭合的时间间隔。这里指明当串联臂  $L$  支路中电流  $i_L = 0$  的状态即开关断开或开启的状态。正如下面我们将看到的那样,  $\tau_K$  取决于于初始条件、输入信号、网络的拓扑结构及网络元件的数值。例如果说, 若在  $KT$  时刻电容  $C_1$  和  $C_2$  上的电压为零, 则  $\tau_K$  也为零。每一个  $\tau_K$  将用下面的递推法计算出来。

令网络  $N_1$  和  $N_2$  的连续状态向量分别是  $x_1$  和  $x_2$ , 电感  $L$  中的电流为  $i_L$ , 当输入电压  $u_s(t) = e^{st}$  时, 整个网络的状态方程有如下形式

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{i}_L \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{1L} & 0 \\ A_{L1} & 0 & A_{L2} \\ 0 & A_{2L} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ i_L \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{st} \quad t \in T_{1K} \quad (3)$$

和

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{i}_L \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ i_L \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{st} \quad t \in T_{2K} \quad (4)$$

这里  $A_{ij} (i, j = 1, 2, L), b_1$  均是常数矩阵, 由网络的拓扑结构及元件值决定。若令  $x(t) = \{x_1(t), i_L(t), x_2(t)\}^T$ ,  $T$  表示矩阵转置, 则可进一步写出密集形式的状态方程

$$\dot{x}(t) = A_1 x(t) + b e^{st} \quad t \in T_{1K} \quad (5)$$

和

$$\dot{x}(t) = A_2 x(t) + b e^{st} \quad t \in T_{2K} \quad (6)$$

解此状态方程, 得到

$$x(t) = \{\exp[A_1(t-KT)]\}x(KT) + \{e^{sKT} \exp[A_1(t-KT)] - e^{st}U\}(A_1 - SU)^{-1}b \quad t \in T_{1K} \quad (7)$$

和

$$x(t) = \{\exp[A_2(t-KT-\tau_K)]\}x(KT+\tau_K) + \{e^{s(KT+\tau_K)} \exp[A_2(t-KT-\tau_K)] - e^{st}U\}(A_2 - SU)^{-1}b \quad t \in T_{2K} \quad (8)$$

这里  $U$  表示单位矩阵。因此, 如果对所有的正整数  $K$  而言,  $x(KT)$  和  $x(KT + \tau_K)$  都知道了, 则表达式给出了所有  $t \geq 0$  的  $x(t)$ 。实际上, 所有的  $x(KT)$  和  $x(KT + \tau_K)$  均可由  $x(0)$  通过递推方法计算出来。

第一步我们由式 (7) 得到  $K=0$  时关于第一个  $\tau_0$  的方程如下

$$x(\tau_0) = e^{A_1 \tau_0} x(0) + \{e^{A_1 \tau_0} - U e^{s \tau_0}\} (A_1 - SU)^{-1} b$$

再由  $i_L(\tau_0) = 0$  的条件求出  $\tau_0$  的具体数值。

第二步, 知道了  $\tau_0$  以后我们可由式 (8) 求出  $x(T)$ , 其表达式如下

$$x(T) = e^{A_2 (T-\tau_0)} x(\tau_0) + \{e^{A_2 (T-\tau_0)} e^{s \tau_0} - U e^{s T}\} (A_2 - SU)^{-1} b$$

计算出  $x(T)$  后, 将它再作为 (7) 的初始状态值, 由  $i_L(\tau_1) = 0$  的条件和式 (7) 解出  $\tau_1$ , 然后再用式 (8) 计算出  $x(2T)$ 。如此循环递推就能解出全部需要的  $x(KT)$ 、 $\tau_K$  和  $x(KT + \tau_K)$ 。显然,  $\tau_K$  取决于初始状态、由网络拓扑结构及元件值决定的  $A_1, A_2, b$  和输

入信号  $e^{st}$ 。顺便指出这一方法的另一优点是适合计算机仿真和实验。只要给出  $x(0)$ 、具体的  $A_1$ 、 $A_2$ 、 $b$  配合输入信号  $e^{st}$  就可在计算机上计算出所有的  $x(KT)$  和  $x(KT + \tau_K)$ ，观察其是否与希望的响应一致，若不一致可适当调节  $A_1$ 、 $A_2$  与  $b$  使之计算的结果达到满意的程度。

### 参 考 文 献

- [1] Desber C A, *Bell Syst. Tech. J.*, **36**(1957), 1403-1428.
- [2] May P J and Stump T M, *Trans. Amer. Inst. Elec. Engrs.*, **79**(1960), 615-620.
- [3] Ozone K, *IEEE. Trans. On communication*, COM-15(1967), 163-168.
- [4] Fettwelss A, *Network and Switching Theory*, Academic Press, New York 1968:382-446.
- [5] Thrasher P M, *IEEE. Trans. On Communication*, COM-16(1968), 501-512.
- [6] Sun Y and Frisch I T, *Proc. the First Asilomar Conf. On Circuits and Systems 1967*:130-142.
- [7] Kailath T, *Linear Systems*, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, 1980.

## Iterative Analysis of Resonant Transmission Networks

Ge Yun

*(Department of Electronic Engineering)*

Tong Maqda

*(Department of System and Management Science)*

### Abstract

The iterative analysis for computing transient and steady response of a general resonant transmission network is presented by state equation in this paper. The analysis gives not only the time-varying network function of the resonant transmission network in closed form but also the corresponding Fourier series. So the frequency spectra of the response is provided too. Its other advantage is suitable for computer simulation and experiment.

**Key words:** resonant transmission network, iterative analysis, response, frequency spectra, network function.

# 生物分子和药物分子中基团电负性的研究

吴汉卿

(应用化学系)

## 摘 要

根据鲍林原子电负性标度和超原子近似,本文给出了另一计算基团电负性的方法,计算了一些生物分子和药物分子的基团电负性,同时与一些性质参数进行了相关性的研究。

**关键词:** 基团电负性, 超原子近似, 标度

## 1 引言

基团电负性的概念非常重要,它可用于研究分子稳定性能和反应性能,考察不同功能基团的诱导效应进而理解反应性能。不仅如此,基团电负性对于了解蛋白质、核酸等生物大分子的结构与功能,研究具有众多衍生物的药物分子构效关系(QSAR),也有着十分重要的意义,有关计算基团电负性的方法已有许多报道,本文提出的基团电负性的计算方法着重用于生物分子和药物分子中基团或母体的电负性的计算。

基团电负性可由实验和计算两种方法获得,Cillfod<sup>[1]</sup>,McDaniel-Yingst<sup>[2]</sup>和Wells<sup>[3]</sup>通过实验手段获得了基团电负性数据,Inamoto, Masude<sup>[4]</sup>,Sanderson<sup>[5-6]</sup>,Huheey<sup>[7-8]</sup>,Sterven G. Bratsch<sup>[9]</sup>以及陈颂真<sup>[10-11]</sup>,通过计算手段给出了基团电负性数据,但是各种方法标度并不统一,数据也不完全,且对于复杂的基团,采用以上文献的计算方法也难以求得基团电负性值。本文以Pauling的元素电负性标度为基础,将基团近似法看作“超原子”,提出了一种简便的计算基团电负性的方法。

B. P. Dailey<sup>[12]</sup>等人以 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{X}$  ( $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) 化合物为标准,从卤素的电负性与相应的 $\text{CH}_3\text{CH}_2$ 中氢原子的化学位移间的线性关系导出了一个测定 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{X}$ 系列化合物中X功能相对电负性的经验公式。蒋先明<sup>[13]</sup>导出了类似文献[12]的计算功能团相对电负性的公式。本文采用文献[13]中的化学位移( $\tau$ )数据与作者计算得到的相应系列中基团电负性值作了相关性的研究,针对73种不同基团,得出化学位移( $\tau$ )和基团电负性的计算值之间的相关系数为: $r=0.856$ , 11个共价氢酸的 $\text{PK}_a$ 值与基团电负性计算值以及基团中氢原子数目之间具有 $r=0.992$ 的相关性,并且各 $\sigma$ 值电性参数值与基团电负性之间也有一定的相关性。从而显示出本文得到的基团电负性计算值,在处理诸如诱导效应,亲

电、亲核反应时是有意义的。

## 2 计算原理

生物大分子和药物分子中主要由 C、H、N、O、S 等元素组成，还有少量的其它元素，如 Fe、Zn、Cu、Mo、I 等，本文以表 1 所列的元素电负性作为计算基础。

表 1 一些元素的电负性值

H	Be	B	C	N	O	F
2.20	1.57	2.04	2.55	3.04	3.44	3.98
Si	P	S	Cl	Br	Te	I
1.90	2.19	2.58	3.16	2.96	2.10	2.66
Se	As	Ge	Fe	Zn	Cu	Mo
2.55	2.18	2.01	1.8	1.6	1.9	1.8

利用原子的 Pauling 电负性标度，将基团看作“超原子”近似，按照公式可以计算出中性基团的电负性值  $X_c$

$$X_c = \frac{\sum V_i X_i}{\sum V_i}$$

其中

$X_i$  为基团中与基原子相连的第  $i$  类型原子或“超原子”的电负性， $X_0$  为基团原子的 Pauling 电负性值，

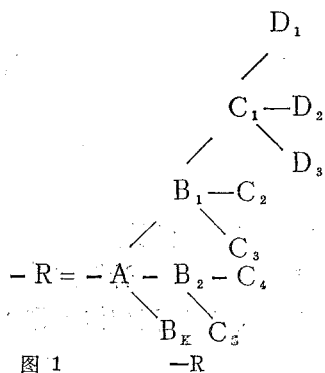


图 1

$V_i$  为基团中第  $i$  类型原子或“超原子”与基原子相连的价数，双键为 2，三键为 3， $V_0$  为基原子的价数。

所谓“超原子”近似，就是在计算过程中，将一些基团作为“原子”来处理，下图中所示 A 为公式中说明的基原子， $B_1$ 、 $B_2$ 、 $\dots$ 、 $B_k$  分别与基原子相连，如需计算 R 基团的电负性，需计算  $B_i$  ( $i=1, k$ ) 的基团电负性，如计算  $B_i$  的基团电负性，则需计算  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_5$  的基团电负性，如  $C_i$  ( $i=1-5$ ) 基团中基原子不再连有基团时，就直接根据表 1 中的原子电负性值，由公式来计算，一些基团电负性见表 2 至表 7。

## 3 结果与讨论

基团电负性计算值作为一种有效参数用于药物分子构效关系研究极有意义。从以下几个公式可以看出，作者将文献[13]中的  $\text{CH}_3-\text{R}$  系列的氢原子化学位移数据 ( $\tau$ ) (见表 4) 和基团 R 的电负性计算值作了相关性的研究，对 73 种  $\text{CH}_3-\text{R}$  系列物，得到的化学位移  $\tau$  和基团电负性  $X_R$  之间的相关性方程为：

表 2 基团电负性的比较 (Pauling 单位)

基 团 G	本文 工作	文献 [1]	文献 [2]	文献 [3]	文献 [4]	文献 [5—6]	文献 [7]	文献 [8—10]	
-CH <sub>3</sub>	2.40			2.30	2.47	2.63	2.33	2.27	2.28
-CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2.43				2.48	2.64	2.34	2.28	2.29
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	2.51			3.00	2.72	2.67	2.38	2.49	2.38
-CHO	2.75				2.87	2.96	2.68	3.14	2.64
-COCH <sub>3</sub>	2.78				2.86	2.80	2.51	2.69	2.46
-COOH	2.87			2.85	2.82	3.12	2.86	3.5±0.1	2.80
-CF <sub>3</sub>	3.16			3.35	2.98	3.64	3.47	3.46	3.49
-CCl <sub>3</sub>	2.81			3.0	2.67	3.28	3.03	2.84	2.98
-CN	2.76	2.6		3.3	3.21	2.96	2.68	3.84	2.77
-SiH <sub>3</sub>	2.03			2.2		2.47	2.18	2.21	2.12
-SiF <sub>3</sub>	2.79				2.30	3.42	3.20	3.35	3.12
-NNN	3.04	2.95	3.3			3.19	2.94	4.42	3.04
-NH <sub>2</sub>	2.70			3.35	2.99	2.78	2.49	2.61	2.42
-NO	3.20				3.57	3.42	3.19	4.4±0.2	3.23
-NO <sub>2</sub>	3.22			3.4	3.42	3.49	3.29	4.6±0.3	3.30
-NF <sub>3</sub>	3.42			3.25		3.71	3.55	3.64	3.61
-NCO	2.99	3.05			3.55	3.18	2.92	4.46	2.97
-NCS	2.85	2.9			3.50	2.96	2.68	4.17	2.71
-PH <sub>2</sub>	2.19			2.3	2.19	2.57	2.27	2.13	2.20
-OH	3.03	2.6±0.5	3.6	3.7	3.49	3.08	2.81	3.51	2.68
-OCl	3.35					3.56	3.37	4.4	3.29
-OCIO	3.41	3.0				3.59	3.41	4.6	3.34
-OCIO <sub>2</sub>	3.39	3.25				3.61	3.43	4.8	3.37
-OCIO <sub>3</sub>	3.39					3.62	3.44	4.9	3.38
-OBrO <sub>2</sub>	3.35	3.15				3.54	3.34		3.31
-OIO <sub>2</sub>	3.30	3.05				3.41	3.19		3.21
-ONO	3.36	3.2				3.49	3.29	4.43	3.30
-ONO <sub>2</sub>	3.37		3.7			3.53	3.33	4.58	3.33
-OCH <sub>3</sub>	3.09			3.70	3.54	2.81	2.52	2.68	2.44
-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	3.15	3.1	3.5		3.52	2.75	2.45	2.68	2.44
-OCHO	3.21	3.3			3.51	3.12	2.86	3.54	2.80
-OCOCH <sub>3</sub>	3.23	3.3	3.6		3.51	2.91	2.62	2.95	2.56
-OCN	3.21	2.9				3.18	2.92	4.66	2.97
-SH	2.45		3.2	2.8	2.62	2.77	2.48	2.32	2.37
-SCN	3.64		3.1			2.96	2.68	3.91	2.71

$$\bar{r} = (15.26 \pm 0.54) + (-2.75 \pm 0.20) X_R$$

$$n = 73, r = 0.856, s = 0.49, F = 194$$

$n$  为样本数,  $r$  为相关系数,  $s$  为标准偏差,  $F$  为可信度。

共价氢酸  $H-(YH_r)$  的  $PK_a$  值与基团电负性  $X_G$  ( $G = -YH_r$ ) 和基团中与基原子  $Y$  相连的氢原子数目  $K_H$  之间具有很好的相关性 (数据见表 5)。另外  $YCH_2COOH$  的  $PK_a$  与  $X$  一致 (见表 6)。


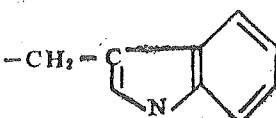
$$PK_a = 13.4(X_G - 3.67) + 23.7K_H$$

$$n = 11, r = 0.992, s = 2.87, F = 262$$

作者观察了  $\sigma_p$ 、 $\sigma_m$  与基团电负性值之间的关系, 表 7 列出了 25 个常见的基团, 作了它们与基团电负性之间的相关性研究, 得到

$$\sigma_p = -2.19 + 0.93X_G - 0.11K_H - 0.43K_a$$

表 3 氨基酸基团电负性和基团电荷

氨基酸名称	缩写符号 (三字)	氨基酸基团 (-R)	基团电负性 ( $X_H$ )	基团电荷 ( $\delta_H$ )
甘氨酸	Gly	-H	2.20	0.078
丙氨酸	Ala	-CH <sub>3</sub>	2.40	0.034
缬氨酸	Val	-CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2.46	0.022
亮氨酸	Leu	-CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2.44	0.026
异亮氨酸	Ile	-CH(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2.46	0.022
丝氨酸	Ser	-CH <sub>2</sub> OH	2.52	0.010
苏氨酸	Thr	-CH(OH)CH <sub>3</sub>	2.55	0.004
门冬氨酸	Asp	-CH <sub>2</sub> COOH	2.50	0.014
谷氨酸	Glu	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH	2.44	0.026
组氨酸	His	-CH <sub>2</sub> -C=CH	2.45	0.024
赖氨酸	Lys	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	2.43	0.028
精氨酸	Arg	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NHC(NH <sub>2</sub> )=NH	2.43	0.028
门冬酰胺	Asn	-CH <sub>2</sub> C(=O)-NH <sub>2</sub>	2.49	0.016
谷氨酰胺	Gln	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(=O)-NH <sub>2</sub>	2.44	0.026
半胱氨酸	Cys	-CH <sub>2</sub> -S-H	2.44	0.026
蛋氨酸	Met	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -S-CH <sub>3</sub>	2.44	0.026
苯丙氨酸	Phe	-CH <sub>2</sub> -Ph	2.45	0.024
酪氨酸	Tyr	-CH <sub>2</sub> -  -OH	2.45	0.024
色氨酸	Trp	-CH <sub>2</sub> - 		

$$n = 25, r = 0.912, s = 0.160, F = 34.66$$

$$\sigma_m = -0.90 + 0.46X_c - 0.21K_R - 0.17K_n$$

$$n = 25, r = 0.856, s = 0.176, F = 19.20$$

以上两式中,  $X_c$  为基团电负性计算值,  $K_R$ 、 $K_n$  分别为与基原子相连的氢原子数目和基原子所具有的孤对电子数, 两式表明基团电负性可作为一种电性质参数, 因此, 将基团电负性用于药物分子定量结构—活性关系 (QSAR) 的研究将具有实际意义, 作者在文献[14]中做了许多工作。

表 4 CH—R分子中氢原子的化学位移( $\tau$ )和基团电负性

R	$\tau_{CH_3}$ (ppm)	$X_R$ (计)	R	$\tau_{CH_3}$ (ppm)	$X_R$ (计)
—H	9.77	2.2	—NH(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> —CH <sub>3</sub>	7.58	2.75
—CH=CH <sub>2</sub>	8.31	2.46	—N(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	7.81	2.80
—C≡CH	8.2	2.50	—CH—N—R	8.0	2.58
—C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	7.65	2.51	—O—S—CH <sub>3</sub>	7.5	3.13
—F	5.73	3.98	—N=N—CH <sub>3</sub>	6.32	2.96
—Cl	6.94	3.16	—NH—Ph	7.34	2.57
—Br	7.31	2.96	—N(NH <sub>2</sub> )—Ph	6.94	2.87
—I	7.84	2.66	—CH <sub>2</sub> —CN	8.67	2.48
—OH	6.53	3.03	—CH <sub>2</sub> —OPh	8.63	2.56
—OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	6.27	3.15	—CH <sub>2</sub> —NO <sub>2</sub>	8.45	2.55
—OC(=O)CH <sub>3</sub>	6.33	3.22	—CH <sup>≡</sup> CH—CH=CH <sub>2</sub>	8.18	2.47
—OC(=O)Ph	6.12	3.23	—C(=CH <sub>2</sub> )—CH=CH <sub>2</sub>	8.03	2.50
—OSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	6.30	3.26	—CH <sub>2</sub> —ONO	8.61	2.55
—CHBr <sub>2</sub>	7.53	2.62	—C(=O)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	7.45	2.80
—OR	6.70	3.10	—COOH	7.92	2.87
—OC(=O)CF <sub>3</sub>	6.04	3.26	—C(=O)OCH <sub>3</sub>	7.99	2.90
—CCl <sub>3</sub>	7.28	2.81	—C(=O)—NH <sub>2</sub>	7.98	2.83
—C(=O)—SH	7.76	2.79	—NH <sub>2</sub>	7.53	2.70
—C(=O)—Br	7.19	2.86	—NH <sub>2</sub> C(=O)CH <sub>3</sub>	7.29	2.82
—CHO	7.8	2.75	—S—H	8.00	2.45
—C(=O)CH <sub>3</sub>	7.91	2.78	—CN	8.02	2.76
—CH <sub>2</sub> —C(=O)OR	8.9	2.50	—NO <sub>2</sub>	5.71	3.22
—CH <sub>2</sub> C(=O)NRR	8.87	2.49	—CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	9.21	2.43
—CH <sub>2</sub> —OR	8.83	2.53	—CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	9.11	2.46
—CH <sub>2</sub> —Ph	8.75	2.44	—C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	9.03	2.49
—CH <sub>2</sub> OC(=O)—R	8.73	2.55	—CH <sub>2</sub> I	8.84	2.47
—CH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	9.0	2.44	—CH <sub>2</sub> Br	8.15	2.51
—CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	8.69	2.47	—CH <sub>2</sub> Cl	8.5	2.54

续表


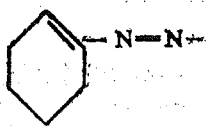
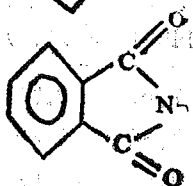
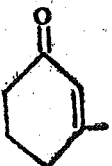

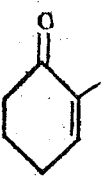

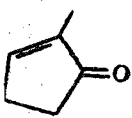
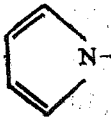
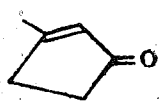
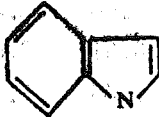
R	$\tau_{\text{CH}_3}$ (ppm)	$X_R$ (计)	R	$\tau_{\text{CH}_3}$ (ppm)	$X_R$ (计)
-C(=O)Cl	7.34	2.89	-NCS	6.63	2.85
-SCN	7.39	2.64	-CH <sub>3</sub>	9.23	2.40
-C(=O)SCH <sub>3</sub>	7.70	2.80	-PH <sub>2</sub>	9.20	2.19
	7.56	2.56		6.30	2.97
	6.85	2.94		8.27	2.52
	6.50	2.80		8.04	2.70
	7.79	2.80		8.26	2.70
	7.77	2.81		7.85	2.52
	6.4	2.82			

表 5 共价氢酸PK<sub>a</sub>值与基团电负性之间的关系

氢酸YH <sub>n</sub>	PK <sub>a</sub> *	X <sub>e</sub>	K = n - 1	PK <sub>a</sub> (计)
HF	3.3	3.98	0	4.1
HCl	-7	3.16	0	-6.8
HBr	-9	2.96	0	-9.5
HI	-9.5	2.66	0	-13.5
H <sub>2</sub> O	15.7	3.03	1	14.9
H <sub>2</sub> S	7.0	2.45	1	7.4
H <sub>2</sub> Se	3.9	2.43	1	7.08
H <sub>2</sub> Te	2.6	2.13	1	3.05
H <sub>2</sub> N	35	2.70	2	34.4
H <sub>3</sub> P	27	2.50	2	31.7
H <sub>4</sub> C	58	2.40	3	54.1

注: PK<sub>a</sub>值引自《离子极化导论》,温元凯,邵俊编著,安徽教育出版社,



表 6 在  $YCH_2COOH$  中 Y 的电负性与相应的  $PK_a$  值间关系

Y	$-NO_2$	$-Cl$	$-C_6H_5$	$-CH=CH_2$	$-CH_3$
$PK_a$ 值	1.68	2.86	4.31	4.35	4.87
$X_Y$	3.22	3.16	2.51	2.43	2.40
$\delta_H$	+0.190	+0.190	+0.190	+0.190	+0.190
$\delta_Y$	-0.126	-0.117	-0.002	+0.014	+0.020

表 7 Hammett sigma para 和 meta 值与基团电负性

No.	取代基 G	$\sigma_p$ (obsd)	$\sigma_m$ (obsd)	$X_G$	$K_p$	$K_m$
1	$CH_3$	-0.16	-0.95	2.40	3	0
2	$C_2H_5$	-0.15	-0.07	2.43	2	0
3	$CH_2OH$	0.01	0.01	2.52	2	0
4	$CH_2C_6H_5$	-0.06	-0.05	2.44	2	0
5	$CF_3$	0.54	0.43	3.16	0	0
6	$CH=CH_2$	-0.08	0.08	2.46	1	0
7	$CHO$	0.43	0.36	2.75	1	0
8	$COOH$	0.44	0.35	2.87	0	0
9	$CONH_2$	0.31	0.28	2.83	0	0
10	$COCH_3$	0.47	0.36	2.78	0	0
11	$COOCH_3$	0.46	0.35	2.90	0	0
12	$COC_6H_5$	0.46	0.36	2.80	0	0
13	$CONHCH_3$	0.36	0.35	2.83	0	0
14	$C_6H_5$	-0.01	0.06	2.51	0	0
15	$C\equiv CH$	0.23	0.20	2.50	0	0
16	$CN$	0.65	0.61	2.76	0	0
17	$NH_2$	-0.66	-0.09	2.70	2	1
18	$NHCOCH_3$	-0.09	0.14	2.82	1	1
19	$CHCONH_2$	-0.24	-0.03	2.83	1	1
20	$NO_2$	0.78	0.74	3.22	0	0
21	$OH$	-0.38	0.02	3.03	1	2
22	$OCH_3$	-0.28	0.10	3.09	0	2
23	$OC_2H_5$	-0.24	0.10	3.10	0	2
24	$OCOCH_3$	0.31	0.39	3.22	0	2
25	$F$	0.15	0.34	3.98	0	3

## 参 考 文 献

- [1] Clifford A F, *J. Phys. Chem.*, **63** (1959) , 1227.  
[2] Mc Daniel D H, and Yingst A, *J. Amer. Chem. Soc.*, **86** (1969) , 1334.  
[3] Wells P R, *Progress in Physical organic Chemistry*, Vol.6, Interscience  
New York, 1968, 111-145.  
[4] Inamoto N, and Masuda S, *Chem. lett.*, (1982) , 1003.  
[5] Sanderson R T, *J. Chem. Phys.*, **23** (1955) , 2467.  
[6] Sanderson R T, *Polar Covalence*, Academic Press, New York, 1983.  
[7] Huheey J E, *J. Phys. Chem.*, **69** (1965) , 3284.  
[8] Huheey J E, *J. Phys. Chem.*, **70** (1966) , 2086.  
[9] Staven G Bratsch, *J. Chem. Educ.*, **62** (1985) , No.2.  
[10] 陈颂真, 上海科技大学学报, **2** (1987) .  
[11] 陈颂真, 上海科技大学学, **3** (1987) .  
[12] Cavanaugh J R, and Dailey B P, *J. Chem. Phys.*, **34** (1963) , 1099,  
Dailey B P, *J. Am. Chem. Soc.*, **77** (1955) , 3977.  
[13] 蒋先明, 分子科学与化学研究, **3** (1984) , 421.  
[14] 吴汉卿, 《计算机辅助蒽醌类等药物分子设计》, 硕士论文, 中国科学技术大学,  
(1989) .

## The Study of Group Electronegativities in Biologic and Drug Molecules

Wu Hanqing

(Department of Applied Chemistry)

### Abstract

Based on Pauling electronegativity scale and "super-atom" approximation, it was given another method to calculate group electronegativity, Which is simple method in calculation and suitable comparing with other authors' group electronegativities. Using this method, we calculated the electronegativity of decades groups and 19 amino acids groups. It was proved here that the method is effective by several experimental evidences.

**Key words:** group electronegativity, super-atom approximation, scale,

# $^{60}\text{Co}-\gamma$ 辐射制备载体型多孔聚合物气相色谱固定相

查刘生\* 吴宁生 陈文明

(应用化学系)

## 摘 要

用 $^{60}\text{Co}-\gamma$ 辐射法制备载体型多孔芳类聚合物气相色谱固定相,考察了影响其色谱性能的主要因素。它与目前常用的多孔高分子小球固定相相比,柱效高,热稳定性好,未觉察到静电效应,对烷烃分离速度快,分离度高,色谱峰形对称。

**关键词:**  $^{60}\text{Co}-\gamma$ 辐射聚合,载体型多孔聚合物固定相,气相色谱。

**中图法分类号:** O615.42

## 1 引言

高分子多孔小球是一种广泛应用的气相色谱固定相,具有许多优点。不足的是柱效不高,色谱峰形拖尾,装柱困难。为此,Fuller<sup>[1]</sup>最先把多孔聚合物包覆在多孔载体表面上,制得的载体型聚合物固定相柱效较高,分离速度快。最近吴采樱等人<sup>[2]</sup>用高纯度(>95%)二乙烯基苯为单体在 Chromosorb W-AW-DMCS 表面上直接聚合,柱效又有进一步提高。但由于都采用化学引发聚合,引发剂分解产物通过自由基反应连接到大分子链上,致使固定相极性增加,吸附性加强,色谱峰形拖尾严重。如文献[1]分离烷烃色谱峰的不对称度  $F_{0.1}$  在 1.4~1.6 范围内。另外象苯酰过氧化物类引发剂的分解产物在长期高温使用过程中会对固定相产生破坏作用,影响柱子寿命。

载体型多孔聚合物固定相确具有一定的优越性,我们采用 $^{60}\text{Co}-\gamma$ 辐射引发法代替化学引发法,以减小拖尾,用国产原料摸索 $\gamma$ 辐射法制备载体型多孔聚合物固定相的主要影响因素,进行有关性能试验和探讨其结构特征,下面就报告这些结果。

1989年9月2日收到。

\* 现在安徽大学高分子材料研究所工作。

## 2 实验部分

### 2.1 仪器设备及试剂

$^{60}\text{Co}-\gamma$  辐射源：我系辐化教研室钴源实验室的 6 万居里钴源，其吸收剂量用硫酸亚铁剂量计测定。

102G 型气相层析仪，CQ-250 型超声波清洗器，240C 型元素分析仪，ESCALAB MK II 型电子能谱仪，Rigaku 标准型热分析仪。

载体：102 硅烷化白色担体（40~60 目）。单体：苯乙烯，化学纯，用前用 20% NaOH 溶液洗去其中阻聚剂，然后干燥。交联剂：二乙烯基苯，实验试剂（标签上含量  $\geq 45\%$ ），用 20% NaOH 溶液洗去其中阻聚剂，经过干燥后，按文献 [3] 所述方法测定其中主要组分含量为：二乙烯基苯 51.75%，乙基乙烯基苯 37.94%，二乙基苯 8.72%，其它杂质 1.59%，其中乙基乙烯基苯也作为单体参与聚合反应。稀释剂：甲苯，分析纯，用前需干燥。其余试剂均为分析纯。

### 2.2 固定相的制备

将按一定比例配好的单体（包括苯乙烯和乙基乙烯基苯）、交联剂和稀释剂溶液倒入干燥过的载体中，使其刚好浸润，然后放在超声波浴中脱气，使溶液充分涂覆在载体的孔隙和表面上，通入氮气赶走辐照瓶内空气，置于钴源室内辐照。辐照过程中体系无需翻动或转动。制得的载体型多孔聚合物小球（简称 S-PPB）用乙醇抽提以除去其中稀释剂及未反应的单体、交联剂，低聚物等。

S-PPB 用热风干燥后，以热式分段装柱法<sup>[4]</sup>装柱，在 130℃ 温度下通  $\text{N}_2$  气老化 8 小时。

### 2.3 条件试验、稳定性试验

保持载体用量和单体的摩尔数不变，分别改变稀释剂用量和交联剂用量，剂量率不变改变辐照时间，或辐照总剂量不变改变剂量率，分别考察稀释剂用量、交联剂用量、辐照剂量和剂量率对 S-PPB 固定相的聚合物被覆量（以元素分析结果来衡量）、柱效和分离性能的影响。以其中较好的原料配比和辐照条件进行 3 次重复试验，考察反应条件和原料配比对制备 S-PPB 的稳定性。

### 2.4 热稳定性试验

以 10℃/min 的升温速率，通 Ar 气氛，流量为 70ml/min，对 S-PPB 作热分析试验，观察其中聚合物开始分解的温度。

### 2.5 结构分析

同时测定 S-PPB 和空白样（载体）中硅原子的 2p 电子能谱，通过两者的比较，判断 S-PPB 中聚合物与载体之间是否存在化学键合。

## 3 结果与讨论

有关苯乙烯-乙基乙烯基苯-二乙烯基苯的辐射聚合反应情况，早在六十年代 Chapiro<sup>[5]</sup> 就已经详细报告过。本文制备的特点是使它们在载体的表面和孔隙内原位交联聚合，形成的交联网状聚合物包覆在载体上，达到类似固定化固定相的目的，下面用简单图式表示这一过



..... 单体、交联剂、稀释剂

—— 多孔聚合物

在反应体系中加入稀释剂的作用是使聚合物形成孔穴，增加固定相的比表面。我们曾试过的稀释剂有四氢萘、苯、正庚烷和甲苯，结果以甲苯最好。

### 3.1 制备 S-PPB 的主要影响因素

稀释剂用量、交联剂用量、辐照剂量率和总剂量对 S-PPB 中聚合物被覆量、柱效和分离性能的影响见表 1。表中各批载体用量均为 10g，单体的摩尔数均为  $2.79 \times 10^{-3}$  mol。

#### 3.1.1 稀释剂用量

表 1 稀释剂、交联剂用量、辐照条件对 S-PPB 性能的影响

序号	稀释剂 用量 (g)	交联剂 用量 (g)	辐照条件		含* 碳 量	色 谱 性 能				
			剂量率 (Gy/s)	总剂量 ( $\times 10^{-3}$ Gy)		柱温 ( $^{\circ}$ C)	柱效** (n/m)	分离性能***		
								烷烃	醇类	苯系列
1	0.96	0.10	0.115	3.31	2.12	100	1688	良好	较好	较好
2	0.38	0.32	0.115	3.31	3.17	100	840	较好	不佳	不佳
3	0.45	0.24	0.115	3.31	1.65	100	1541	良好	较好	较好
4	0.37	0.15	0.115	3.31	2.30	101	1208	较好	不佳	不佳
5	0.35	0	0.115	3.31	0.38	100	242	—	—	—
6	0.98	0.10	0.115	2.07	0.79	100	1340	较好	不佳	不佳
7	0.98	0.10	0.115	4.14	1.47	100	1432	较好	不佳	不佳
8	0.98	0.10	0.115	5.38	1.14	100	993	不佳	不佳	不佳
9	0.98	0.10	0.058	3.31	2.91	100	1371	较好	不佳	较好
10	0.98	0.10	1.874	3.31	0.81	100	825	不佳	不佳	不佳
11	1.53	0.32	0.115	3.31	1.84	100	1360	良好	不佳	较好
12	0.89	0.32	0.115	3.31	2.55	100	937	较好	不佳	不佳
13	0.26	0.32	0.115	3.31	3.42	100	720	不佳	不佳	不佳

\*元素分析结果,102 硅烷化白色担体含碳量为 0.16%

\*\*以正庚烷为测试物

\*\*\*分离度  $R < 1.0$  为不佳,  $1.0 \leq R \leq 1.4$  为较好,  $R > 1.4$  为良好。

稀释剂用量大小影响聚合物的孔穴多少和大小,最终影响固定相的柱效和分离性能。从表中可以看出,柱效随着甲苯用量的增加而增加,用量过低,制得的载体型聚合物固定相基本上没有分离效果,这可能是由于载体表面上聚合物基本上没有孔穴,用作气相色谱固定相比表面积太小。相反地,稀释剂用量太大,柱效又有下降的趋势。稀释剂的最佳用量取决于交联剂的用量和稀释剂的性质。

### 3.1.2 交联剂用量

当交联剂用量处在占反应物总摩尔数 10%~50% 范围内,随着交联剂用量的增加,柱效基本上呈下降趋势。这是由于交联度越高,本体聚合物的网孔越致密,保留作用越小。但不用交联剂,制得的 S-PPB 基本上无分离效果,这是由于线型聚苯乙烯未能包覆在载体上。由于交联剂的纯度影响固定相的柱效,本文制得的固定相不及文献 [2] 中用高纯度二乙烯基苯制得的柱效高。

### 3.1.3 辐照剂量率和总剂量的影响

在改变辐照剂量率但保持总剂量相同条件下,从表中可以看出,剂量率太大,含碳量较小,柱效和分离性能都较差。这是由于随着剂量率的增加,聚合物分子量下降,载体表面未能完全被聚合物所覆盖。

保持剂量率相同,改变辐照总剂量,随着总剂量的增加,含碳量呈增加的趋势,也就是说,在一定的辐照剂量率下,生成的聚合物量随着辐照时间的增加而增加,但更高的剂量可能会使薄层聚合物产生裂解,导致柱效和分离性能下降。

### 3.1.4 制备条件的稳定性

载体 10g, 苯乙烯 0.26g, 二乙烯基苯 (L.R.) 0.10g, 甲苯 0.96g, 在 0.115Gy/s 剂量率下辐照 8 小时, 制得 3 批 S-PPB, 以正庚烷为测试物, 测得它们柱效的平均值为  $n=1645/m$ , 相对平均偏差为 1.76%, 对烷烃分离的重现性较好。

### 3.2 S-PPB 的主要性能

(1) 由热分析结果表明, S-PPB 在 300°C 温度下无分解现象, 完全满足了用作气相色谱固定相的热稳定性要求。

(2) 在对 S-PPB 进行处理和装柱过程中发现, 它不易破碎, 不象本体高分子多孔小球那样存在明显的静电

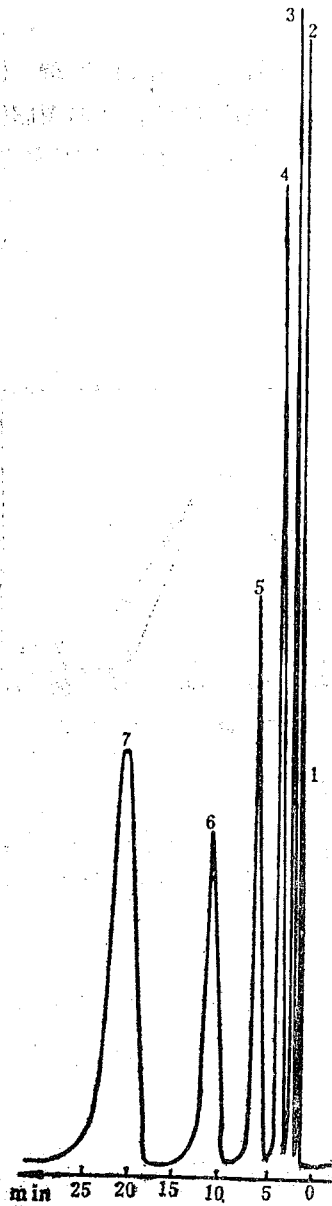


图 1 S-PPB 分离正构烷烃的气相色谱图  
 不锈钢色谱柱 [1m × 3mm (I.D.)],  
 使用 FID, 柱温: 100°C. 载气 N<sub>2</sub>:  
 43ml/min, 汽化温度: 220°C.  
 1 n-C<sub>7</sub>, 2 n-C<sub>8</sub>, 3 n-C<sub>9</sub>,  
 4 n-C<sub>10</sub>, 5 n-C<sub>11</sub>, 6 n-C<sub>12</sub>,  
 7 n-C<sub>13</sub>

效应。

(3) 用 S-PPB 固定相对烷烃进行气相色谱分离, 谱图和最佳色谱条件见图 1. 图中

峰形较对称, 不对称度  $F_{0.1} = 1.3 \sim 1.6$ , 保留时间短。

(4) Van Deemeter 方程, 简称范氏方程

$$H = A + B/u + Cu \quad (1)$$

是评价色谱柱的重要公式, 其中参数  $A, B, C$  可由实验来测得, 过去报道的方法有多种, 但大都不是繁杂就是误差太大。最近有人<sup>[6]</sup>提出用线性化—优化法保证结果最佳。我们编制线性化—优化法的 Basic 语言程序, 在 IBM—PC 微机上获得通过。以此求得 S-PPB 柱的范氏方程为

$$H = 0.1745 + 3.6842/F + 8.2752 \times 10^{-3} F \quad (2)$$

相应描绘的  $H-F$  曲线如图2所示。

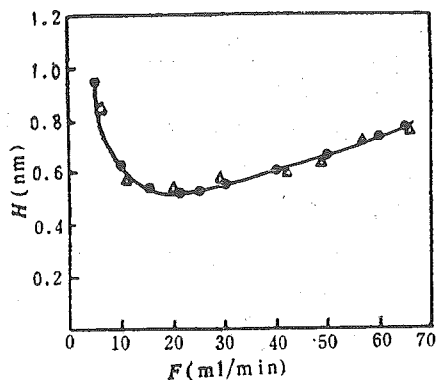


图 2 S-PPB的H-F曲线  
N<sub>2</sub>, 100°C, 样品: 正庚烷 · 方程计算  
Δ实验数据点

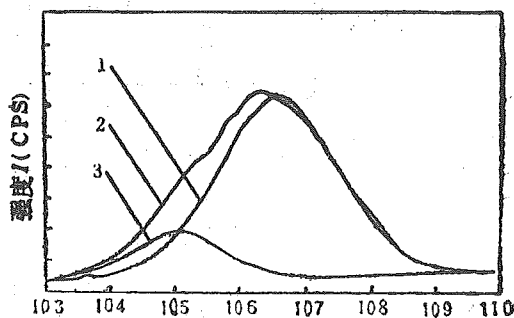


图 3 S-PPB 中硅原子 2p 电子能谱  
1 102 硅烷化酸洗白色担体, 2 S-PPB,  
3 1 与 2 的差谱

范氏方程中参数  $C$  值较小,  $H-F$  图上高速区部分比较平坦, 有利于快速分析。这是由于聚合物包覆在载体上, 其中网孔较浅, 且分布均匀。另外由于装柱紧密, S-PPB 颗粒之间空隙度小, 因此溶质分子的传质阻力减小。

### 3.3 S-PPB 的结构特征

从图 3 可以看出, 同空白样相比, S-PPB 中有一部分硅原子的  $2p$  电子产生化学位移, 可说明载体和聚合物分子链之间存在化学键合, 从而使得部分硅原子的  $2p$  电子结合能降低。这种结构有利于提高 S-PPB 的热稳定性。

本工作得到中国科技大学结构中心开放实验室的资助。我系钴源实验室全裕才师傅给予大力支持和帮助, 结构中心陈顺喜老师为本工作做了元素分析实验, 季明荣老师做了电子能谱实验, 无机教研室刘双怀老师做了热分析实验, 在此一并致谢。

## 参 考 文 献

- [1] Fuller E N, *Anal. Chem.*, 44 (1972), 1747.
- [2] 吴采樱, A.A.Walter, 化学通报, No. 6, (1988), 38.
- [3] 吴宁生、查刘生, 色谱, 待发表 (已录用);
- [4] 陈泉, 第五次全国色谱学术报告会文集 (上册), 1987: 95.
- [5] Chapiro A, *Radiation Chemistry of Polymeric Systems* 1962: 159.
- [6] 陈尊庆, 色谱, 6 (1988), 123.

# The Preparation of Support-Porous Polymer as Gas Chromatography Stationary Phase by $^{60}\text{Co}$ - $\gamma$ Radiation

Zha Liusheng    Wu Ningsheng    Chen Wenming

(*Department of Applied Chemistry*)

### Abstract

The investigation for preparation of a new type of GC stationary phase, porous polyaromatic copolymer which is polymerized in situ on the surface of solid support material by cobalt-60 gamma radiation, was made. The major factors of influence on its chromatographic performances were examined. Compared with the conventional porous polymer bead, it has greater column efficiency, higher thermal stability and has not obviously electrical effect. It gives more rapid separation, higher resolution and more symmetrical peaks for alkanes.

**Key words:** polymerization by cobalt-60 gamma radiation, the stationary phase of support-porous polymer, gas chromatography.



# 中国科学技术大学学报

第20卷

1990年

## 总 目 录

S <sup>7</sup> 无任何 Lie 群构造 .....	周 坚	徐森林 (1)
用原子的 X <sub>r</sub> 电荷密度计算 Van der Waals 半径 .....	张庆伟	李俊清 (8)
一类非线性方程的函数级数解法 .....	兰慧彬	汪克林 (15)
片状BGO闪烁体 $\gamma$ 能谱的 Monte Carlo 模拟和实验测量 .....	林趾荣	李 艳 宫竹芳 (27)
计算机作费曼图 .....	戴青海	马文淦 刘耀阳 (32)
用于阿尔芬波研究的 AWH-2 射频发射机的研制 .....	朱士尧 韩中生	邓必河 许 琰 (38)
基于知识的语音识别与理解 .....	陆洋海	戴蓓倩 (43)
十二烷基硫酸钠和辛基酚聚氧乙烯醚混合表面活性剂水溶液体相及界面层相互作用 研究 .....	赵叔晞	赵剑曦 (49)
活性氧-过氧化氢氧化光泽精发光的研究 .....	吕小虎	陆明刚 (56)
APDC-MIBK 萃取流动注射-原子吸收法测定肥料中微量镉 .....	赵化章, Lars-Cöran Danielsson, Folke Ingman	(61)
单室火灾中浮力修正的雷诺应力模型 .....	张 辉	范维澄 (67)
有机液体导热系数的新推算式 ——通用相关式的醇、烷、芳香族的具体推算式 .....	陈则韶	葛新石 (75)
光波导高灵敏度硫酸亚铁剂量计的研究 .....	刘占军	吴 欣 (83)
关于能量正交板元的形函数空间 .....	石钟慈	(127)
关于指数为 $(h+1)$ 的临界 $h$ 棱连通图的最大棱数 .....	徐俊明	(132)
Pd/c-Si 界面反应研究 .....	沈 波 施一生 赵特秀	许振嘉 (143)
BPGR 积木块自动布局和总体布线系统 .....	陈洪亮	王东生 庄镇泉 (149)
锌-钒酸酐固态蓄电池 .....	林枫凉 薛立新	朱 斌 俞文海 (159)
H <sub>2</sub> 在 Ni 和 Ni-Mn 催化剂表面吸附的 MS-X <sub>a</sub> 研究 .....	李俊清	王其武 徐立微 王 俭 (165)
矢量量化中的非二元树搜索算法 .....	黄胜华	贝昌达 (171)
睡眠脑电波的计算机分析 .....	蔡文英	钟龙云 张作生 (177)
岩石层底部切向应力场及地球大地水准面异常 .....	傅容珊	(184)

可能最大降水估算中气象因子放大的数值实验 .....	汪钟兴 (191)
等离子体彗尾中的扰动波特性 .....	李中元 童 彝 (197)
用可靠性因子 $R$ 确定表面结构 .....	胡兹莆 (203)
清洁 Nb(100) 面的结构 .....	潘必才 胡兹莆 (208)
聚乙烯的光敏交联 .....	徐文英 严 庆 Bengt Rånby (213)
聚对苯二甲酸丁二醇酯-聚 $\epsilon$ -己内酯嵌段共聚物链化学结构研究 .....	罗筱烈 马德柱 蒋文博 (220)
任意阶调和算子的离散谱估计 .....	陈祖墀 钱椿林 (259)
主手征场方程的对称及其构成的李代数 .....	张友金 (267)
自动限温加热带电—热性能的研究 .....	苏洪钊等 (274)
O( $^3p$ )原子和丙稀醇化学反应动力学研究 .....	陈从香等 (279)
La-Ca-O 催化剂的结构和形貌 .....	陈 勇 林培琰 俞寿明 (285)
带电粒子在电磁波驻波中的随机运动 .....	汪秉宏 (291)
冲击下 $c$ 轴硫化镉单晶的相变特性 .....	唐志平, Y.M.Gupta (298)
省长途传输设备监控系统的研究 .....	沈兰荪 李志群 (307)
萃取浮选光度法测定 Br-Bi-Ca-Cu-O 超导薄膜中的铋 .....	朱玉瑞 袁惠敏 金 谷 (315)
受浮力影响的湍流模型 .....	范维澄 张 辉 郑丽丽 (321)
添加剂和杂质对四方相 $CeO_2-ZrO_2$ 基陶瓷显微结构及性能的影响 .....	刘杏芹 中田孝夫 (328)
表面边界模型智能生成的研究 .....	郭 立 (336)
微机控制功能性电刺激实验系统 .....	周炳和等 (343)
一类随机线性方程组的一个极限性质 .....	缪柏其 (387)
具 Hirota 形式的 $U_{,t} - U_{,xx} + V(u) = 0$ 型方程 .....	曾云波 (398)
群环的代数结构 .....	杨同海 (405)
与 Schrödinger 系统相关联的 lax 代数 .....	张作顺 程 艺 (412)
最大值原理在地块价格评价中的应用 .....	杨孝先 (417)
载流等离子体中的静磁 Vortex .....	陈银华 (423)
因子分析—光度法测定芳香类化合物 .....	夏四清等 (428)
一种多输入多输出时间域模态分析方法的参数研究 .....	张培强 高进民 (437)
内孔挤压强化板的弹塑性分析 .....	王朝蜀 (448)
VQGIS——一种用于 KGIS 的图示查询语言 .....	吴健康 陈学俭 (454)
找 $K$ 个最小生成树的并行算法 .....	唐策善 梁维发 (464)
铯钠铷和其它金属与固体氦功函数的测量与研究 .....	徐彭寿 S. L. Qiu, M. Strongin (472)
草鱼和团头鲂的核型及其 $C$ 带带型的研究 .....	杨慧一 (478)

### 研 究 简 报

磁致伸缩仪 .....	何正明等 (89)
关于 M. J. D. Brand 和 G. A. Rechnitz 离子选择电极标准加入迭代法的研究	

.....	王基镛	(94)
一种新的莫尔条纹法.....	谢建平 明海 徐继泽 吴云霞	(99)
白眉蝮蛇蛇毒降压组份及其性质的初步研究.....	王淳 黄婉治 何思谦 覃公平	(104)
我校实验废水水质情况调查和评价方法研究.....	李龙泉等	(110)
机械串联系统的可靠性.....	熊会民 卢玉明	(116)
茶树体内游离氨基酸对儿茶素代谢的影响.....	王传友 黄雨初	(122)
一台慢正电子束实验装置.....	韩荣典 翁慧民 郭学哲 谢力	(227)
含氢单晶硅的ESR面效应.....	苏昉 金嗣焰	(232)
$\Sigma$ 树结构与更新最小生成树的并行算法.....	江正	(239)
有机表面活性剂DPE-Ⅲ和KR-7对锌电沉积作用机理的研究 .....	倪光明 吴华强 严怡芹	(249)
一种新型光纤温度传感器.....	徐育 金泰义 章海鹰	(254)
非定常激波在多重矩形障碍物中传播的数值模拟.....	王如云 刘儒勋	(349)
可数生成代数上的Hilbert零点定理.....	王井岚 肖才群	(356)
压缩相干态的振幅平方压缩.....	夏云杰 郭光灿	(361)
复变量Spence函数的数值计算.....	叶竞波等	(366)
KT-5C装置工程和实验参数.....	闻一之等	(376)
非接触精密角位移测量的研究.....	孙葆根 沈兰荪 陈岭丽	(374)
Apple II 微机控制的核探测系统.....	霍剑青 梁伟圣	(380)
Marchenko 方程的递推算法.....	薛兴恒 张韵华	(486)
非晶合金在电流退火下的感生各向异性.....	何正明 姜永君	(491)
$[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 晶体的电子吸收谱的测定和理论诠释 .....	李健民 潘国强 王力军	(496)
应用原子极化半径法对 $\text{CH}_4 \cdot \text{SiH}_4 \cdot \text{GeH}_4$ 的 $\chi_s$ 方法研究 .....	刘卫 李俊清 辛厚文	(500)
裂纹问题的一种边界元解.....	吕品	(506)
谐振传输网络的迭代分析法.....	葛云 仝茂达	(514)
生物分子和药物分子中基团电负性的研究.....	吴汉卿	(517)
$^{60}\text{Co}-\gamma$ 辐射制备载体型多孔聚合物气相色谱固定相.....	查刘生 陈文明 吴守生	(525)

# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol.20 No.4 (SnmNo.70)

## CONTENTS

- $S^7$  Without Any Construction of Lie Group.....Zhou Jian, Xu Senlin (1)  
The Calculation of van der Waals Radii With the Atomic  $\chi_a$  Densities  
.....Zhang Qingwei, Li Junqing (8)  
The Method of Function Series for Solving a Kind of Nonlinear Equations  
.....Lan Huibin, Wang Kelin (15)  
Monte Carlo Simulation for Spectrum at BGO Scintillator  
.....Lin Zhirong, Li Yian, Gong Zhufang (27)  
Drawing Feynman Diagrams by Computer  
.....Dai Qinghai, Ma Wengan, Liu Yiaoyang (32)  
Development of AWH-2 Radiofrequency Generator for Alfvén Wave Studies  
.....Zhu Shiyao, Han Shensheng, Deng Bihe, Xu Yan (38)  
Speech Recognition and Understanding Based on Knowledge  
.....Lu Yanghai, Dai Beiqian (43)  
Bulk and Surface Interaction of Mixed Ionic and Nonionic Surfactant Aqueous  
Solution of Sodium Dodecyl Sulfate and Octylphenol Polyoxyethylene  
Ether.....Zhao Shuxi, Zhao Jianxi (94)  
Study of Chemiluminescence of Lucigenin With Active Chlorine and Hydrogen  
Peroxide.....Lu Xiaohu, Lu Minggang (56)  
Determination of Cadmium in Fertilizer by Atomic Absorption Spectrometry  
After APDC-MIBK Extraction in Continuous Flow  
.....Zhao Huazhang, Lars-Göran Danielsson, Folke Ingman (61)  
RSM With Modifications of Buoyancy Applied to a Room Fire  
.....Zhang Hui, Fan Weicheng (67)  
A New Formula for Predicting the Thermal Conductivity of Organic Liquid

—A Common Correlation Formula and a Calculation Formula for Alcohol, Alkane and Aromatic	Chen Zeshao, Ge Xinshi (75)
Study on Enhancing the Measuring Sensitivity of Ferrous Sulfate Dosimeter by OWG Technique	Liu Zhanjun, Wu Xin (83)
On the Space of Shape Functions of an Energy-orthogonal Plate Element	Shi Zhongci (127)
On the Maximum Size of Critically h-Edge-Connected Graphs with Index Number $h+1$	Xu Junming (132)
A Study of the Interfacial Reaction of Pd/c-si	Shen Bo, Shi Yisheng, Zhao Texiu, C.C. Hsu (143)
BPGR An Automatic Design System for Building-block Placement and Global Routing	Chen Hongliang, Wang dongsheng, Zhuang Zhenquan (149)
Zn-V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> Solid State Storage battery	Lin Fengliang, Xue lixin Zhu Bin, Yu Wenhai (159)
An MS-X <sub>2</sub> Study of H <sub>2</sub> Adsorbed on Ni and Ni-Mn Catalyst Surfaces	Li Junqing, Wang Qiwu, Xu Liwei, Wang Jian (165)
The Non-binary Tree Searching Algorithm for Vector Quantization	Huang Shenghua, Bei Changda (171)
Automatic Analysis of Human Sleep Electroencephalogram (EEG) with Microcomputer	Cai Wenyong, Zhang Longyun, Zhong Zuosheng (177)
Earth's Geoid Anomalies, Mantle Convection and Stress Field Under Lithosphere	Fu Rongshan (184)
A Numerical Experiment on the Enlargements of Meteorological Factors for Probable Maximum Precipitation	Wang Zhongxing (191)
A Discussion on Some Non-linear Effects as well as Their Stability in the Plasma Comets	Li Zhongyuan, Tong Yi (197)
The Surface Structure Determination by Reliability Factor	Hu Zipu (203)
The Structure of Clean Nb (100) Surface	Pan Bicao, Hu Zipu (208)
Photoinitiated Crosslinking of Polyethylene	Xu Wenyong, Yan Qing, Bengt Rånby (213)
Chemical Structure on PBT-PCL Segmented Copolymer Chain	Luo Xiaolie, Ma Dezhu, Jiang Wenbo (220)

Estimates for Discrete Spectrum of Laplacial Operator With Any Order .....	Chen Zuchi, Qian Chunlin (259)
Symmetries and the Related Lie Algebraic Astructure of the Principal Chiral Field Equation.....	Zhang Youjin (267)
On the Electrothermic Behaviour of Self-Temperature-Limiting Heating Strip.....	Su Hongyu <i>et al.</i> (274)
The Kinetics Study on Reaction of $O(^3p)$ With Allyl Alcohol .....	Chen Cnogxiang <i>et al.</i> (279)
Structure and Morphology of La-Cu-O Catalysts .....	Chen Yong, Lin Peiyan, Yu Shoumin (285)
Stochastic Motion of Charged Particles in Electro-magnetic Standing Waves .....	Wang Binghong (291)
Phase Transition Behavior of <i>c</i> -Axis Cadmium Sulfide Single Crystal Under Shock Loading.....	Tang Zhiping, Y. M. Gupta (298)
Provincial Long Distance Transmission Equipment Surveillance System in China.....	Shen Lansun, Li Zhiqun (307)
Extraction Flotation Spectroaotometric Determination of Bismuth in Bi-Sr-Ca-Cu-O Superconducting Film .....	Zhu Yurui, Yuan Huimin, Jin Gu (315)
On Buoyancy-Influenced Turbulence Models .....	Fan Weicheng, Zhang Hui, Zheng Lili (321)
Influences of Dopant and Impurity Upon the Micro-structure and Mechanical Properties of $CeO_2$ - $ZrO_2$ -Based Ceramics .....	Liu Xingqin, Takao Nakada (328)
The Development of the Artificial Production of the Surface Boundary Models.....	Cuo Li (336)
A Microcomputer-Controlled Functional Neuromuscular Stimulation Experiment System.....	Zhou Binghe <i>et al.</i> (343)
A Limiting Property on a Kind of Large System of Radow Linear Equations.....	Miao Baiqi (387)
The Equations $u_{,t} - u_{,xx} + V(u) = 0$ With Hirota Form.....	Zeng Yunbo (398)
On the Algebraic Structure of Group Rings.....	Yang Tonghai (405)
Lax Algebra Related to the KDV System.....	Zhang Zuoshun, Cheng Yi (412)
Maximum Principle Application in Evaluation of Land Value .....	Yang Xiaoxian (417)
The Magnetostatic Vortex in Current-Curring Plasmas.....	Chen Yinhua (423)
Simultaneous Determination of Mixture System of Aromatic Compounds by Target Factor Analysis-Spectrophotometry.....	Xia Siqing <i>et al.</i> (428)

- A Parametric Study on Modal Analysis Algorithm With Multiple-Single  
Input and Multi-Output Spece-Time Regression Method  
.....Zhang Peiqiang, Gao Jinmin (437)
- An Elasto-Plastic Analysis of Cold Expansion at Fastener Holes  
.....Wang Chaozhu (448)
- VQGIS-a Visual Query Language For KGIS  
.....Wu Jiankang, Chen Xueqian (454)
- A Parallel Algorithm for Finding  $K$  Minimum Spanning Trees  
.....Tang Ceshan, Liang Weifa (464)
- Work Function Measurement and Studies of Cs, Na, Yb and Other  
Metals With Solid Ammonia  
.....Xu Pengshou, S. L. Qiu, M. Strongin (472)
- Studies on the Karyotypes and C-banding Patterns of Grass Carp  
(*Ctenopharyngodon idellas*) and Blunt Snout Bream (*Megalobrama  
Amblycephala*) .....Yang Huiyi (478)

#### Research Notes

- Two Magnetostriction Apparatuses.....He Zhengming et al. (89)
- Study on M. J. D. Brans and G. A. Rechnitz's Iterative Method of  
Double Standard Method in ISE Analysis.....Wang Jirong (94)
- A New Method of Moire.....Xie Jianping, Ming Hai, Xu Jize, Wu Yunxia (99)
- Purification and Properties of the Hypotesive Component of Agkistrodon  
Halys Ussuriensis Venom  
.....Wang Chun, Huang Wanzhi, He Sigian, Qin Gongping (104)
- Investigation on Laboratory Waste Water at our University and Methods  
for Evaluation.....Li Longpuan, et al (110)
- A Reliability of Mechanical Series Sestem  
..... Xiong Huimin, Lu Yuming (116)
- The Effects of Free Amino Acids on the Metabolism of Catechins in  
the Tea Plant.....Wang Chuanyou, Huang Yuchu (122)
- An Apparatus for Producing A Slow-positrons Beam  
.....Han Rongdian, Weng Huimin, Guo Xuezhe, Xie Li (227)
- The Surface Effect of FZ Single Crystal Silicon Grown in Hydrogen  
Atmosphere on ESR.....Su Fang, Jin Sizhao (232)
- Sum-tree Structure and Parallel Algorithm for Updating Minimum  
Spanning Tree.....Jiang Zheng (239)
- Study of Organic Sufactants DPE-III and KR-7 on the Action Mechanism  
of Electrodeposition of Zinc

- .....Ni Guangming, Wu Huaqiang Yan Yiqin (249)  
A New Type of Optic-fiber Temperature Sensor
- .....Xu Yu, Jin Taiyi, Zhang Haiying (254)  
The Numerical Simulation for an Unsteady Shock Wave Sweeping Over  
Multiple Obstacles.....Wang Ruyun, Liu Ruxun (349)
- Hilbert Nullstellensatz of Countably Generated Algebras  
.....Wang Lan, Xiao Caiqun (356)  
Amplitude-Squared Squeezing of Squeezed Coherent State  
.....Xia Yunjie, Guo Guangcan (361)  
Calculation of the Spence Function for a Complex Variable  
.....Ye Jingbo *et al* (366)  
Engineering Parameters for KT-5C Tokamak Experiments  
.....Wen Yizhi *et al.* (370)  
Research of Noncontact Precision of Angle Shifting  
.....Sun Baogen, Shen Lansun, Chen Lingli (374)  
The Nuclear Detector System With the Microcomputer Apple-II  
.....Huo Jianguo, Liang Weisheng (380)  
The Inversion Algorithm of Marchenko Equation  
.....Xue Xingheng, Zhang Yunhua (486)  
A New Annealing Method of Amorphous Alloys  
.....He Zhengming, Jiang Yongjun (491)  
Experimental Study and Theoretical Interpretation of Electronic Absorption  
Spectrum of  $[\text{Ni}(\text{OH}_2)_4(\text{en})][\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  Crystal  
.....Li Jianmin, Pan Guoqiang, Wang Lijun (496)  
 $\chi_a$  Method Study on  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$  and  $\text{GeH}_4$  With the Polarized Radial  
.....Liu Wei, Li Junqing, Xin Houwen (500)  
A Boundary Element Solution for the Crack Problems.....Lu Pin (506)  
Iterative Analysis of Resonant Transmission Networks  
.....Ge Yun, Tong Maoda (514)  
The Study of Group Electronegativities in Biologic and Drug Molecules  
.....Wu Hanqing (517)  
The Preparation of Support-Porous Polymer as Gas Chromatography  
Stationary Phase by  $^{60}\text{Co}$ - $\gamma$  Radiation  
.....Zha Liusheng, Chen Wenming, Wu Ningsheng (525)





# 中国科学技术大学学报编委会

**主 编:** 龚 昇  
**编 委:** (按姓氏笔划排序)  
冯克勤 伍小平 刘耀阳  
汪克林 张懋森 钱景仁  
杨延龄  
**责任编辑:** 杨延龄 袁克林  
**英文编辑:** 王 琳

## 中 国 科 学 技 术 大 学 学 报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(季刊)

(Quarterly)

第 20 卷 第 4 期 (总第 70 期)

Vol.20 No.4 1990

**编辑出版:** 《中国科学技术大学学报》编辑部  
(安徽省合肥市金寨路96号)

**印 刷:** 中国科学技术大学印刷厂

**国内总发行:** 合 肥 市 邮 局

**订 购 处:** 全 国 各 地 邮 局

**国外总发行:** 中国 国际 图书 贸易 总 公 司

(中国国际书店,北京399信箱)

**Edited and Published by:**

The Editorial Board of

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

96 Jinzhai Road of

Hefei, Anhui, China 230026

**Distributed by:**

China International Bookstore

P.O. Box 399 Beijing, China

国内统一刊号: CN34—1054

邮 政 编 码: 230026

邮 政 代 号: 26—31

国 外 代 号: Q527

1990年12月出版

ISSN 0253-2778

# 中国科学技术大学学报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

第20卷

Vol.20

爆炸力学专辑

Expl. Mech. Issue

1990

# 中国科学技术大学学报

第20卷 (总第71期)

## 爆炸力学专辑

### 目 录

用于二维波传播计算的一种编码程序及其在撞击问题中的应用

.....	周光泉	林绳缤 (1)
粘弹性变截面杆中冲击波的演化.....	李永池 魏勇	胡秀章 (10)
绝热剪切的一种应变局部化分析.....	包合胜	王礼立 (18)
EPIC—2 对高速撞击的数值模拟.....	王肖钧 胡秀章 李永池	张晓武 (25)
冲击波加载下剪力对固体相变压力的影响.....		唐志平 (33)
超高速撞击的数值模拟.....	胡秀章 王肖钧	李永池 (42)
材料动态性能研究中的拉格朗日分析方法.....	柴华友	唐志平 (48)
应力波放大器的优化设计.....	李欣增 周光泉	奉孝中 (57)
空爆等温冲击波的传播.....		糜仲春 (64)
变角度扩张管中爆轰临界直径的实验研究.....	陈成光 李剑	戴伟氏 (72)
H <sub>2</sub> —Air 系统的爆轰稳定性分析.....	李剑	陈成光 (78)
爆破破岩过程及破碎判据.....		陈保基 (84)
岩体破碎机理的探讨.....		胡时胜 (89)
大型容器水压爆破解体的药包布置参数.....	周听清	奉孝中 (95)
城市建筑群对球面冲击波传播影响的实验研究.....	郭长铭 张寒虹	周听清 (101)
间隔装药深孔爆破的数值分析.....	胡秀章	虞吉林 (106)
创伤过程中空腔成腔机理初探.....	周光泉	邢立平 (112)
应力波铆接器系统分析和应用.....	奉孝中 周光泉	李欣增 (121)
应力波杆中传播质点速度的磁电测量方法.....	奉孝中	杨继跃 (126)

# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 20 (Sum No.71)

Expl. Mech. Issue

## CONTENTS

- A Computer Code for Two-dimensional Wave Propagation and It's Application  
in Impact Problem..... Zhou Guangquan, Lin Shengbin ( 1 )
- The Evolution of Shocks in a Viscoelastic Bar With Varying Cross-Section  
Area..... Li Yongchi, Wei Yong, Hu Xiuzhang ( 10 )
- An Analysis of Strain Localization for Adiabatic Shearing  
..... Bao Hesheng, Wang Lili ( 18 )
- Numerical Simulation of High Velocity Impact by EPIC-2 Code  
..... Wang Xiaojun, Zhang Xiaowu, Hu Xiuzhang, Li Yongchi ( 25 )
- Effects of Shear Stress on the Phase Transition Pressures of Solids  
Under Shock Loading.....Tang Zhiping ( 33 )
- Numerical Simulation of Superhigh Velocity Impact  
..... Hu Xiuzhang, Wang Xiaojun, Li Yongchi ( 42 )
- Lagrangian Analysis for Study of Dynamic Material Behaviors  
..... Chai Huayou, Tang Zhiping ( 48 )
- Optimization of Stress Wave Amplifier  
..... Li Xinzen, Zhou Guangqun, Feng Xiaozhong ( 57 )
- Propagation of Homothermal Shock Vaves for Explosion in Air  
..... Mi Zhongchun ( 64 )
- Experiment Test of Detonation Critical Diameter in Divergent Tube  
..... Chen Chengguang, Li Jian, Dai Weimin ( 72 )
- A Stability Analysis of Detonation of the  $H_2$ -Air  
.....Li Jian, Chen Chengguang ( 78 )
- The Process of Rock Fragmentation by Blasting and the Breaking Criterion  
..... Chen Baoji ( 84 )
- The Discussion on Rock Breakage Mechanism..... Hu Shisheng ( 89 )

The Position Parameters of Multiple-Charges in Water-Pressure Blasting in the Construction of Big Container .....	Zhou Tingqing, Feng Xiaozhong (95)
An Experimental Study on the Effects of Buildings on Characteristics of Spherical Shock Wave .....	Guo Changming, Zhang Hanhong, Zhou Tingqing (101)
Numerical Analysis for Deep Hole Blasting of Spaced Power Charge .....	Hu Xiuzhang, Yu Jilin (106)
Study of Formation of Cavity Produced by the Traumatic Process .....	Zhou Guangquan, Xing Liping (112)
Principle of Stress Wave Riveting and Its Application .....	Feng Xiaozhong, Zhou Guangquan, Li Xinzen (121)
The Electromagnetic Method for Measurement of Particle Velocity With Stress Wave Propagating Along Bar .....	Feng Xiaozhong Yang Jiyao (126)

# 用于二维波传播计算的一种编码程序 及其在撞击问题中的应用

周光泉 林绳缤

(近代力学系)

## 摘 要

通过一个锥体撞击圆柱块靶体的问题,说明ARTOO程序的基本理论、滑移面处理方法、输入和输出方式以及程序的其它一些性能。利用REGIS软件包在VAX8700计算机上将这些输出数据结果绘成各种曲线图、二维图、点密度图及三维图等。对这些图形的分析得到了一些关于ARTOO程序的结论。

**关键词:** 应力波, 撞击, 编码程序。

## 1 引言

固体的撞击、侵彻和贯穿研究在军事方面一直有着十分重要的意义,近十年来在我国的工业上也得到了重视。从第二次世界大战开始以来人们对这一研究的分析方法就进行了认真的探讨,但当前尤为关心的则是求出高速撞击问题的二维及三维数值解。

高速撞击,特别是超高速撞击问题的研究,主要有实验和数值分析两种方法。由于撞击速度高、现象复杂、对实验设备的要求也比较高,物理量的测量手段复杂。目前较为普及的研究撞击问题的设备,如Hopkins压杆、电爆炸或炸药驱动飞片等,不能满足要求。因此,在一般的研究单位,数值分析所占的比重远远大于实验方法。我们发展的ARTOO编码是一个功能齐全的二维有限差分程序。采用拉格朗日方法,具有节省机时的优点。同时也是同类编码中计算精度较高的一个处理程序,适用于从低速(500m/s)到超高速(700m/s)的撞击问题研究。本文将介绍这个程序的基本理论和功能,结合算例说明使用方法,并对计算结果进行初步的分析。

## 2 程序简介

ARTOO是我们在TOODY IV基础上引进和发展的一个功能齐全的程序。

ARTOO的一个突出优点是程序模块化,使用人员容易读懂文本,容易改变或增加某些

功能,这是许多老程序所不具备的。在有些程序中甚至简单地改变一下本构方程都是一项繁重的工作。而在ARTOO中如果想改变输入方式,只须修改几个input和setup子程序的某些语句;如果想改变输出方式,则只要修改output和print子程序中的一些语句;更为重要的是在更换本构关系或状态方程时,使用者只须简单修改或自己编入一个本构方程子程序。

计算中经常会碰到这样的问题:两个撞击体间部分接触界面时分时合。过去的程序往往需要人工调整或特为空隙开闭状态作专门规定,因为在那些程序中如果未人为地规定分离或出现新的接触面,那么两物体间始终保持接触。在ARTOO计算中只要使用者在两物体间安置一个弥合分离滑移线(26号线),程序就能自动处理接触面的弥合和分离。

为描述物体的形状和材料的性质,ARTOO提供了材料定义、几何定义和形状定义。它们的结合使用增加了描述物体时的灵活性,同时也方便了对某些形状复杂、多种材料共存的物体的描述。

作为一个拉格朗日程序,ARTOO在处理大变形问题时也必须求助于重新划分网格,这种重新分格法在一维编码中的运用已取得了很好的结果。但对二维情况除ARTOO程序外,即使是最复杂最精细的分格程序也得不到理想的结果。究竟什么时候需要重新布网,有人工和程序自动判断两种方法。人工方法就是由有经验的使用者在检查了部分计算结果后决定在哪个循环进行重新布网,而自动完成的办法则是程序根据某些量及其积累值来判断何时重新布网。在ARTOO中,如果相对能量误差超过使用者规定的容许值或者某一格点上压力超过规定的最大值,或者某一循环的时间步长小于规定的最小值,计算将终止,同时将一些必要的信息记录在磁带或磁盘上。当一个循环中时间步长降低两倍或更多时,计算也自动停止。使用者可以认为这些情况的发生是由于网格严重畸变或网格本身重叠造成负质量所致。从终止的这一循环开始必须利用TOOREZ程序进行重新布网。

不论是重新布网还是问题太大无法一次完成都有一个重新启动计算的问题。比如一个持续几小时甚至几天机时的问题,我们可以(有时是必须)分数次运行以达到最终结果。为此ARTOO提供了重新启动功能,以机时或问题时间来决定何时记录重新启动文件。

最后必须提到的是,ARTOO计算的问题可按使用者的需要安置于一个任意方向的引力场中。

### 3. 基本理论

#### 3.1 基本微分方程

ARTOO是一个二维有限差分程序,可处理二维平面问题和轴对称问题。对轴对称问题以X为径向坐标,Z或Y为轴向坐标和轴对称问题。在这一部分中假定X为径向坐标。下面是程序中所用到的一些基本微分方程。

1) 拉格朗日形式的运动方程:

$$\rho a^x = \frac{\partial t^{xx}}{\partial X} + \frac{\partial t^{xz}}{\partial Z} + (\alpha - 1) \frac{t^{xx} - t^{yy}}{X} \quad (1)$$

$$\rho a^z = \frac{\partial t^{xz}}{\partial X} + \frac{\partial t^{zz}}{\partial Z} + (\alpha - 1) \frac{t^{zz}}{X}$$



2) 加速度定义:  $a^x = \frac{\partial u^x}{\partial t}$ ,  $a^z = \frac{\partial u^z}{\partial t}$  (2)

3) 速度定义:  $u^x = \frac{\partial X}{\partial t}$ ,  $u^z = \frac{\partial Z}{\partial t}$  (3)

4) 拉伸张量:

$$\left. \begin{aligned} d^{xx} &= \frac{\partial u^x}{\partial X} \\ d^{zz} &= d^{xz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^x}{\partial Z} + \frac{\partial u^z}{\partial X} \right) \\ d^{yy} &= (c-1) \frac{\partial u^x}{\partial X} \\ d^{zz} &= \frac{\partial u^z}{\partial Z} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

5) 连续方程:  $d^{xx} + d^{yy} + d^{zz} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t}$  (5)

6) 能量方程:  $\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} = P_s + P_d + Q_s + Q_d + Q$  (6)

其中  $a=1$  为二维平面情况,  $a=2$  为轴对称情况。  $\rho$  为物质密度,  $t^{xx}$ 、 $t^{zz}$ 、 $t^{xz}$  和  $t^{yy}$  为等效应力分量, 即应力各分量与人工粘性力之和,  $\epsilon$  为比内能,  $P_s$  和  $Q_s$  分别为偏量部分的功率,  $Q$  为外热源输入热量的增加率, 其它量的含义同一般规定。

人工粘性力包括张量粘性和沙漏粘性 (keystone viscosity)。张量粘性即二次粘性和一次粘性的线性组合。

程序提供了五种较为常用的材料本构关系。分别是: 弹塑性一流体动力材料、高爆炸药、理想气体、岩土和多孔介质材料的本构关系。弹塑性本构关系中采用了 Von Mises 屈服准则并将屈服强度看做应变率、应变硬化和功硬化等的函数。引入断裂机制, 提供了两种断裂模型: 常极限拉应力准则和双轴断裂模型。岩土地质材料中使用了帽盖模型 (cap model)。

程序中考虑自由面、力边界、对称面、固定边界、25号滑移面和 26号滑移面 (即弥合分离面) 等 6 种边界条件。后两种边界将在下面更为详细地讨论。

### 3.2 滑移面

ARTOO 中处理滑移面的方法是准确而且多用途的。该方法提供两种滑移面选择。第一种在程序中记为 25, 假设面两边的所有材料始终保持接触, 但两边材料可以相对滑移。第二种记为 26, 即前面已提到的弥合分离面。26 号线在处理方法上唯一必须增加的就是不断检查滑移面两端边界是否延伸或缩短。

滑移面上可以是绝对光滑的, 也可以是有摩擦力的, 甚至可以不容许有任何滑动。对于一般情形采用库仑摩擦力公式

$$F_t = f \times N_t \quad (7)$$

这里  $f$  为摩擦系数,  $N_i$  为正应力,  $F_i$  为沿面的摩擦力。如果在 SLIDE 子程序中作微小修改, 还可引入粘性摩擦。

滑移面的处理基于这样一个基本方法: 加速度、速度和位移矢量可以由沿  $X$ 、 $Z$  轴的独立分量或沿法向  $n$ 、切向  $t$  的独立分量描述。轴的变换和逆变换公式如下

$$\left. \begin{aligned} a^t &= a^x \cos\theta - a^z \sin\theta \\ a^n &= a^z \cos\theta + a^x \sin\theta \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$\left. \begin{aligned} a^x &= a^t \cos\theta + a^n \sin\theta \\ a^z &= a^n \cos\theta - a^t \sin\theta \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

这里  $\theta$  是  $t$  和  $n$  分别相对于  $X$  和  $Z$  的转角, 逆时针为正。

借助于这两组关系式, 再依次把滑移线变成自由面、对称面/自由面、自由面/对称面, 即可求得滑移面上各网格点的加速度、速度和位置等量。

处理 26 号线时, 如果滑移线上点的速度预示出原来分离的点在下一时间循环中将弥合, 那么滑移线两端边界向两边延伸。如果线上的法向应力超过了最大的拉应力值, 滑移线两端边界接触区域将缩小。

ARTOO 所提供的这两种滑移面在很多问题中是必要的或能带来方便的, 当两个毗邻材料性能极为不同时, 如果再不容许滑移, 将导致网格的严重扭曲, 从而引起误差, 同时滑移面还可以用于研究一个面上的摩擦。此外, 当设置了一个不容许有任何滑移的滑移面后, 划分网格时  $j = \text{常数}$  的线无须在面两边保持共线, 这一点将给求解一些特殊或形体复杂的问题带来方便。

## 4 问题与结果

### 4.1 问题的提出

这里要讨论的一个问题是模拟带有战斗部的弹丸在起爆后的侵彻过程。

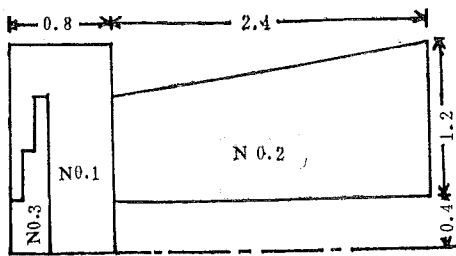


图 1 空间构形 (单位 cm)

一个空心铝质锥体以  $0.05 \text{ cm}/\mu\text{s}$  ( $500 \text{ m/s}$ ) 的速度从右边撞击铁钨圆柱靶。由于问题是轴对称的, 图 1 只画出任一剖面的一半。图中材料 1 是铁, 2 是铝, 3 是钨。三种材料都用弹性—理想塑性固体本构方程描述。

其中 Grüneisen 系数为

$$\left. \begin{aligned} \Gamma &= \Gamma_0 (1 - \eta) \\ \eta &= 1 - \rho_0 / \rho \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

$\Gamma_0$  为材料常数,  $\rho_0$  为材料的初始密度。击波速度-质点速度的 Hugoniot 关系由下式给定:

$$U = c_0 + S \times u \quad (11)$$

这里  $U$  为击波速度,  $u$  为质点速度,  $c_0$  为初始声速,  $S$  是一材料常数。表 1 列出了有关材料常数。

前几十年的工作大部分集中在超高速撞击范围内, 在这种情况下, 材料强度所起的作用微乎其微, 状态方程成了表征材料性质的主要因素。因此前几十年的工作已取得了精确的状

表 1

	Fe	Al	Wu
$\rho$ (g/cm)	7.846	2.7	19.194
$c_0$ (cm/ $\mu$ s)	0.461	0.538	0.4
S	1.74	1.337	1.268
$\nu$	0.279	0.333	0.284
$\Gamma_0$	1.75	2.0	1.54
$Y_0^*$ (Mbar)	0.0043	0.0002	0.0229

\*  $Y_0$ 为单轴屈服强度

态方程数据。但在火炮(枪)速度范围内(500~1300m/s),情况就不一样了,弹靶相互作用产生的压力与材料强度属于同一量级,而且压力在传播过程中急剧衰减。大多数在超高速冲击研究的全盛期发展起来的计算程序,由于某些原因<sup>[1-3]</sup>常常不能很好的运行下去。为此本问题中空心锥体的撞击速度选在500m/s,介于亚武器与普通火炮之间,并计算到5 $\mu$ s问题时间,以检验程序在低速冲击下的有效性。

计算在VAX8700上进行。这个问题的计算大约需要13.34秒机时,加上CPU与磁盘间数据传递将需2分24秒。

#### 4.2 程序的输入和输出方式

利用图1所示的空间构形,我们可以给出图2的逻辑构形,包括边界条件的膺网格在内共划分178个网格,显然不管实际形状怎么样,在*i-j*拉格朗日坐标中都只能是一个矩形,只不过每个网格的实际尺寸不同而已。

两撞击体间安置了一个25号滑移面,因为这个面在计算过程中不可能继续生长或缩小。

作为一个通用程序,ARTOO提供了多种输出方式:记录重新启动文件,打印输出,历史文件和二进制文件<sup>[4]</sup>。其中历史文件就是为绘制各种曲线图、二维图点密度图和三维图等产生的。另外,简单地增改H PLOT等子程序的内容,使用者可以得到自己需要的其它量的输出。

#### 4.3 计算结果与分析

计算中我们给出了第1,37和56次循环中第9,10和11列各网格的位置、速度、密度、面积应力等物理量的值,这些都是使用者可以按需要预先选定的。如在本问题中,最为关心

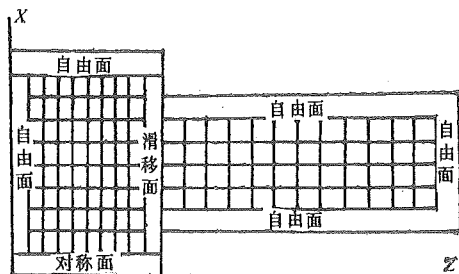


图2 逻辑构形

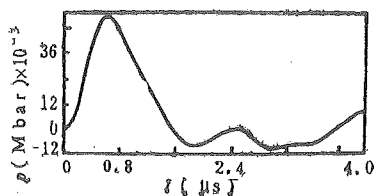


图3 网格点(9,5)的静水压-时间曲线

的是滑移面附近网格的运动情况，于是选择打印 9,10 和 11 列的物理量。同时程序打印出被选择的循环的时间步长，这些量可以帮助我们分析结果的有效性。在输入卡中适当选择这些打印输出方式，在程序调试中也将带来方便。

图 3、图 4 和图 5 是滑移线左边紧靠滑移线的网格 (9,5) 的静水压、材料 1 和材料 2 中沿水平方向动量的历史曲线。两个动量图在  $0.6 \sim 0.7 \mu s$  之后都变得平缓，(9,5) 网格中静水压在此时达到峰值后下降，这说明撞击体间剧烈的相互作用到这时已经结束。由于材料 3 吸收了进入靶体的大部分动量，材料 1 向左的动量在  $4.0 \mu s$  后增加缓慢，曲线平缓，或者说材料 3 以其大的密度抑制了侵彻体对靶体的侵彻。图 5 显示从  $2.0 \sim 4.0 \mu s$  时间内锥体动量变化很小，曲线图上近似平台。如果我们能设法缩小这段平台时间，对抑制侵彻体侵彻极有意义。这可以求助于材料 3，如在一铁靶内插入数层钨材料，将平台分割成数段小平台，而每一小平台的速度越来越低。

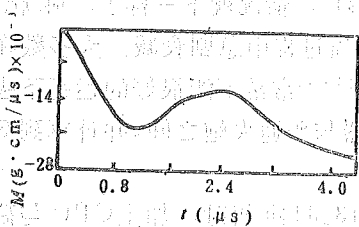


图 4 材料 1 沿 Z 方向动量—时间曲线

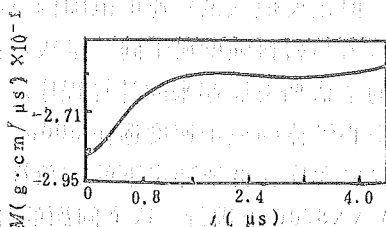


图 5 材料 2 沿 Z 方向动量—时间曲线

形变场是数值计算中能够较准确得到的与真实现象相距不远的结果。图 6 和图 7 分别是  $2.5 \mu s$  和  $5.0 \mu s$  时撞击体的形变图。由于铁钨硬于铝，相互作用的结果是铝质锥体的头部发生了很大的变形，按计算，到  $5.0 \mu s$  时，变形最大的网格的面积增加了近一倍，侵彻的结果只是在铁钨靶产生了一个凹坑。由于计算时间不够长，到  $5.0 \mu s$  时锥体尾部和靶体左端面都没有明显变形。

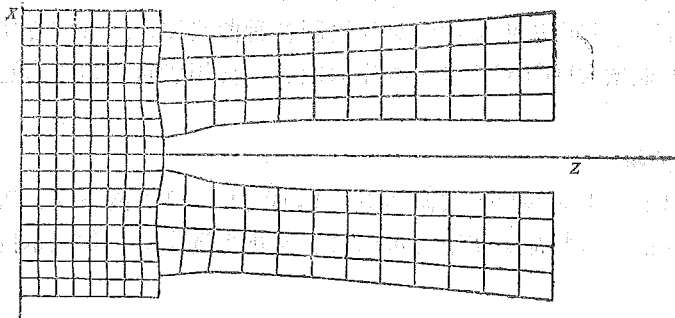


图 6  $2.5162 \mu s$  时刻形变图

力的点密度图显示了撞击体内应力分布的情况，图 8 和图 9 是  $2.5 \mu s$  和  $5.0 \mu s$  时静水压的点密度图，其中“·”和“○”分别表示材料受压和受拉。“·”和“○”的密疏显示出材料受压和受拉程度的大小。

图 10 和图 11，特别是图 11，清楚地显示了  $2.5 \mu s$  和  $5.0 \mu s$  时刻的波形。二维问题中物体内应力场分布的更直观表示是这种三维图与前述的密度图的配合使用。在研究二维波传

播问题中,这两种图形更是必不可少的。Swift 曾指出,绘制超速碰撞所造成的应力场为评价和指导现代碰撞理论的发展,以及具体分析这种碰撞的破坏潜力提供了一种很有成效的途径。

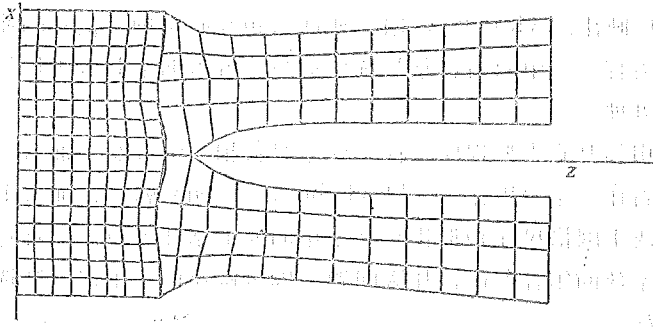


图 7 5.0235us 时刻形变图

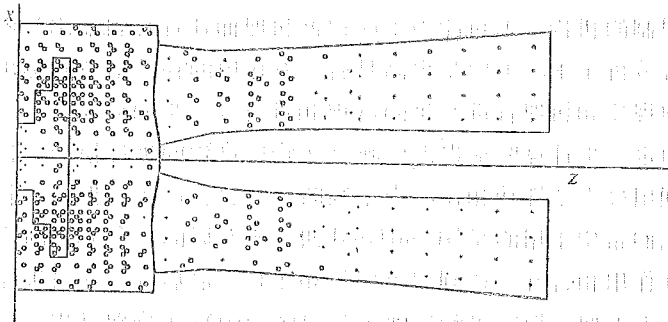


图 8 2.5162us 时刻点密度图

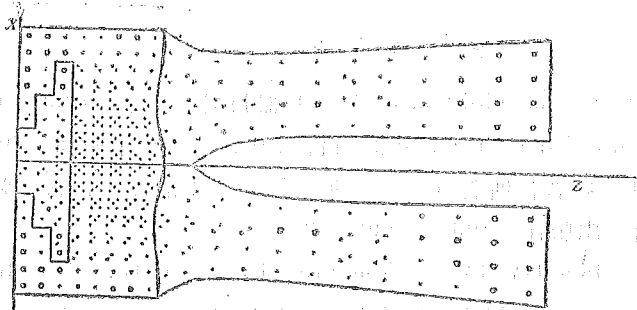


图 9 5.0235us 时刻点密度图

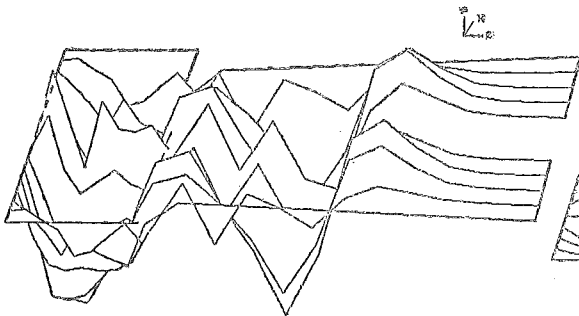


图 10 2.5162us 时刻压力波形图

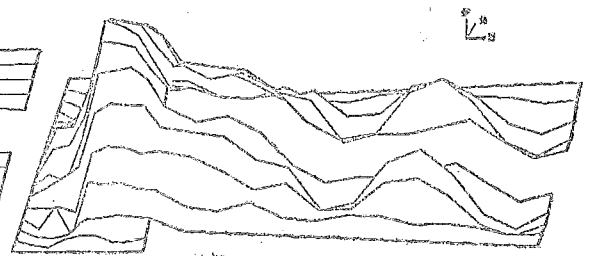


图 11 5.0235us 时刻压力波形图

## 5 结论

(1) 从以上的结果反映出, ARTOO 适用于亚武器和普通火炮(枪)的速度范围。可以进一步推断, 只要状态方程及其中的材料常数选择适当, 再借助于 TOOREZ 程序, 超高速撞击情况更能够很好地处理。

(2) ARTOO 的使用与其它大型程序一样, 要求具备相当的经验, 而且经常需要人工介入, 不能简单地把它看作一个“黑盒”(black box)。正如文献 4 在前言中指出的, 有限差分方法的近似程度取决于网格尺寸和形状及其采用的人工粘性系数, 在计算中用连续减小的网格尺寸和各种粘性系数的组合多运行几次问题, 则可避免由于上述参数选择不当导致的结果完全错误或杂乱无章。

(3) 形变图能够最直观地增加我们对于侵彻现象细节的认识。但是, 除非一些在时间和资金方面不存在一定限制的机构, 不可能为了解侵彻机理而让计算机输出足够多的形变图。只有提高对数据的综合分析水平, 主要是提高具有交互作用的输入信息和输出图像的大范围图示能力, 才能对侵彻现象和机理有进一步的认识和进行进一步的研究。

(4) 本问题的进一步计算要求提供反映真实物理过程的破坏模型。目前 ARTOO 中的双轴断裂模式只是利用最大塑性功和拉应力来判断裂纹是否产生。但是, 材料的破坏是一与时间有关的过程。我们希望采用的是 Stanford 研究所发展的 NAG 脆断模型, 这个模型认为, 通过裂纹的相互作用和合并, 达到裂纹成核和生长, 最后导致材料破坏。尽管这个模型考虑因素多, 使用不太方便, 但它可能反映了材料断裂的真实物理过程。

## 参 考 文 献

- [1] Backman M E and Goldsmith W, 兵器材料与力学, 1980年增刊, 1~106.
- [2] Jones G H and Zukas J A, 兵器材料与力学, 1980年增刊, 107~135.
- [3] 周培基, A. K. 霍普肯斯著(美), 张宝钲、李永池译, 材料在强冲击载荷下的动态响应, 科学出版社, 1985, p508-528.
- [4] Swegle J W, TOODY IV-A Computer Program for Two-dimensional Wave Propagation, SAND-78-0552, USA, 1978, p5-12.

# A Computer Code for Two-dimensional Wave Propagation and Its Application in Impact Problem

Zhou Guangquan      Lin Shengbin

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

In this paper the basic theory, the treatments of slide interface, the methods for input and output as well as other functions of the computer code ARTOO are illustrated by an example in which the problem of a hollow truncated right circular cone impacting on a cylinder made up of two materials is treated. The calculated results are plotted as different figures, through which some conclusions from ARTOO have been obtained.

**Key words:** stress wave, impact, computer code.

# 粘弹性变截面杆中冲击波的演化

李永池 魏 勇 胡秀章

(近代力学系)

## 摘 要

讨论了标准线性粘弹性变截面杆中波传播的特征关系、冲击波阵面上的突跃条件, 导出了冲击波的演化规律, 并以指数锥杆为例计算和讨论了杆中应力波传播规律的特点。本文结果对应力波铆接技术、波形控制和粘弹性材料的参数测量都有指导意义。

关键词: 粘弹性, 变截面杆, 冲击波的演化, 特征关系。

## 1 引言

应力波理论已经在越来越多的工程实际问题中得到应用。而在一切与此应用有关的问题中, 人们都必须研究冲击波强度及整个应力波波形的演化规律, 以便可以预测并根据需要来控制冲击波强度及应力波波形的变化。影响冲击波及整个应力波波形演化规律的因素主要是两个, 其一是工程构件的几何形状效应, 另一个是构件材料性质的本构效应。在与应力波铆接及加工技术相关联的基础理论研究中, 王礼立和胡时胜<sup>[1]</sup>在一维变截面弹性杆的理论框架内, 对应力波放大器原理进行了研究, 指出了美国有关专家提出的应力波放大系数公式的错误, 并对影响应力波放大系数及输出波形的因素进行了有启发性的分析。周光泉和刘孝敏<sup>[2]</sup>完成了弹性变截面杆应力波放大器的二维数值分析, 总结了放大器的二维几何效应, 并正确指出了一维理论的适用范围和方面。这些工作对其它一些类似的工程问题当然也是有用的, 但都未涉及材料粘性等本构因素的影响。考虑到高分子材料及复合材料日益广泛的应用, 而粘弹性本构关系可以较好地模拟大多数这类材料的性质, 本文对由标准线性粘弹性材料制成的变截面杆中冲击波及应力波波形的演化规律进行了理论研究和数值计算, 从而引出了对工程应用有启发意义的一些结论。文章顺便给出了一个实验测量粘弹性材料参数的方法。由于本构特性的某些类似性, 文中给出的分析和计算方法的某些方面对满足 Bodner 无屈服面粘塑性本构关系的变截面杆也是可以应用的。

国家自然科学基金资助的课题。



## 2 问题和基本方程

设有轴对称变截面杆如图 1 所示, 取  $X$  轴沿杆轴向右, 原点  $X=0$  取为左端面, 截面积变化规律为  $A(X)$ ,  $A(0) = A_0$ . 设杆是细长的, 杆在轴向纵撞击的作用下处于一维应力状态并传播一维应力平面波。以  $v, \sigma$  和  $\varepsilon$  分别表示杆中的轴向质点速度、轴向应力和轴向应变,  $\rho$  和  $t$  分别表示介质密度和时间, 则杆中的轴向运动方程和轴向位移连续方程分别是:

$$\rho v_t - \sigma_x = \sigma(\ln A)_x \quad (1)$$

$$\varepsilon_t - v_x = 0 \quad (2)$$

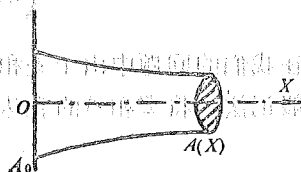


图 1 变截面杆

其中下标表示对  $t$  和  $X$  的偏导数。设杆材为标准线性粘弹性材料, 则其本构方程可写为

$$\sigma_t - b_1 \varepsilon_t = -a_0 \sigma + b_0 \varepsilon \quad (3)$$

其中  $a_0, b_0, b_1$  为材料常数, 若以  $E_t, E_s, t_s$  分别表示材料的瞬态弹性模量、平衡态弹性模量和松弛时间, 则有

$$b_1 = E_t, \quad a_0 = \frac{E_t - E_s}{t_s}, \quad b_0 = \frac{E_s}{t_s} \quad (4)$$

方程 (1)、(2)、(3) 即组成问题的基本方程, 可以将之写为如下的一阶拟线性偏微分方程组的规范形式:

$$AW_t + BW_x = b \quad (5)$$

其中

$$W = \begin{bmatrix} v \\ \sigma \\ \varepsilon \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} \sigma(\ln A)_x \\ 0 \\ -a_0 \sigma + b_0 \varepsilon \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -b_1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

## 3 特征关系和冲击波关系

根据一维波传播的特征理论, 特征波速  $\lambda$  由矩阵  $B$  相对于矩阵  $A$  的特征值给出, 故得特征方程

$$\|B - \lambda A\| = \begin{vmatrix} -\rho\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -\lambda \\ 0 & -\lambda & \lambda b_1 \end{vmatrix} = \lambda(\rho\lambda^2 - b_1) = 0 \quad (7)$$

我们有

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = \sqrt{\frac{b_1}{\rho}} \equiv c > 0, \quad \lambda_3 = -\sqrt{\frac{b_1}{\rho}} = -c < 0, \quad (8)$$

这说明标准线性粘弹性体中应力扰动引起的连续波波速  $c = \sqrt{b_1/\rho}$  是由其瞬态弹性模量  $b_1 = E_t$  所决定的, 其传播速度应对应于稳态波相速度的高频极限。以  $L$  表示  $B$  相对于  $A$  的左特征矢量, 即

$$L^T(B - \lambda A) = 0^T \quad (9)$$

其中“ $T$ ”表示转置, 则波传播的特征关系可写为

$$L^T \left( b - A \frac{dW}{dt} \right) = 0 \quad (\text{对任意的 } \lambda) \quad (10)$$

或

$$L^T \left( \lambda b - B \frac{dW}{dt} \right) = 0 \quad (\text{对 } \lambda \neq 0) \quad (10)'$$

注意, 在我们的问题中由于  $B$  和  $A$  都是对称的, 所以左、右特征矢量是相同的, 但我们仍将保留一般记法。将  $B$  和  $A$  的表达式 (6) 代入 (9) 中, 不难求得, 对于  $\lambda = \lambda_1 = 0$ , 有

$$L = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (\lambda = \lambda_1 = 0) \quad (11)$$

故相应的特征关系 (10) 可写为

$$\frac{d\sigma}{dt} - b_1 \frac{d\varepsilon}{dt} = -a_0 \sigma + b_0 \varepsilon \quad (\text{当 } dX = 0) \quad (12)$$

这即是本构方程 (3)。将  $B$  和  $A$  的表达式 (6) 代入 (9), 求出对应于  $\lambda = \lambda_2$  和  $\lambda = \lambda_3$  的左特征矢量为

$$L = \begin{bmatrix} -\lambda \\ \rho \lambda^2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mp c \\ \rho c^2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \left( \begin{array}{l} \lambda = \lambda_2 \\ \lambda = \lambda_3 \end{array} \right) \quad (11)'$$

将 (11)' 代入 (10)', 得二组特征关系 (13)<sub>1</sub> 和 (13)<sub>2</sub>, 连同 (12) 可写为

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\sigma}{dt} - \rho c \frac{dv}{dt} &= -c\sigma \frac{\partial}{\partial x} \ln A + b_0 \varepsilon - a_0 \sigma & (\text{当 } \frac{dX}{dt} = c) \\ \frac{d\sigma}{dt} + \rho c \frac{dv}{dt} &= c\sigma \frac{\partial}{\partial x} \ln A + b_0 \varepsilon - a_0 \sigma & (\text{当 } \frac{dX}{dt} = -c) \\ \frac{d\sigma}{dt} - b_1 \frac{d\varepsilon}{dt} &= -a_0 \sigma + b_0 \varepsilon & (\text{当 } \frac{dX}{dt} = 0) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

当边界载荷出现突加的强冲击载荷时, 变截面粘弹性杆中可以有强间断的冲击波出现。容易证明, 冲击波阵面上的动量守恒条件和位移连续条件为

$$\begin{aligned} [\sigma] &= -\rho D[v] \\ [v] &= -D[\varepsilon] \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $D$  是冲击波的速度, 而  $[f] = f^- - f^+$  表示量  $f$  的值在跨过冲击波阵面时的跳跃量。由于在冲击波阵面上有  $\dot{\sigma} = \dot{\varepsilon} = \infty$ , 只有瞬态响应起作用, 本构方程 (3) 成为  $\frac{d\sigma}{dt} = b_1 \frac{d\varepsilon}{dt}$ ,

$[\sigma] = b_1 [\varepsilon]$ 。而由 (14) 消去  $[v]$  可得

$$\rho D^2 = \frac{[\sigma]}{[\varepsilon]} \quad (15)$$

故将瞬态本构响应  $[\sigma] = b_1 [\varepsilon]$  代入可得

$$D = \sqrt{\frac{b_1}{\rho}} = C \quad (16)$$

即标准线性粘弹性体中的冲击波速度和连续波小扰动波的波速相同, 这从一个侧面揭示了连续波速  $c$  对应于稳态波相速度高频极限的物理实质。

#### 4 冲击波的演化规律和波的传播特征

工程上最常遇到的载荷是突加至某一最大应力  $\sigma_0$ , 然后逐渐衰减的载荷, 如图 2 所示。此时在变截面杆中将出现如图 2 所示的波动图案, 其中  $OA$  表示冲击波的迹线, 而在冲击波  $OA$  的后方和  $t$  轴之间的区域所画的三组直线则表示三族特征线  $\frac{dX}{dt} = 0$ ,  $\frac{dX}{dt} = \pm c$ 。

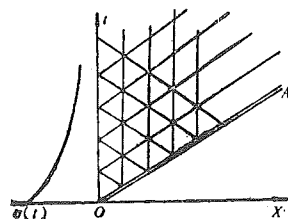


图 2 特征网格

如以  $\sigma_s$ ,  $\epsilon_s$ ,  $v_s$  分别表示冲击波阵面紧后方的应力、应变和质点速度, 则由于冲击波前方是自然静止状态, 故 (14)、(15) 和 (16) 给出:

$$\sigma_s = -\rho c v_s, \quad v_s = -c \epsilon_s, \quad \epsilon_s = \frac{\sigma_s}{\rho c^2} \quad (17)$$

但  $OA$  紧后方又是一条右行特征线  $\frac{dX}{dt} = c$ , 所以 (13), 给出

$$d\sigma_s - \rho c dv_s = -\sigma_s c dt \frac{\partial}{\partial t} \ln A + b_0 \epsilon_s dt - a_0 \sigma_s dt \quad (18)$$

利用 (17) 将  $v_s$  和  $\epsilon_s$  由  $\sigma_s$  表达代入 (18), 并注意  $dX = c dt$  有

$$2 \frac{d\sigma_s}{\sigma_s} = -\frac{\partial}{\partial X} \left[ \ln A + \frac{a_0}{c} X - \frac{b_0}{\rho c^2} X \right] dX = -d \left[ \ln A + \frac{a_0}{c} X - \frac{b_0}{\rho c^2} X \right] \quad (19)$$

积分, 并利用边条件  $\sigma_s(0) = \sigma_0$ , 得

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_0} = \sqrt{\frac{A_0}{A(X)}} e^{-\frac{1}{2c} \left( a_0 - \frac{b_0}{\rho c^2} \right) X} \quad (20)$$

(20) 便是冲击波紧后方的应力随传播距离  $X$  的演化规律。利用 (17) 立即可得冲击波紧后方质速  $v_s$  和应变  $\epsilon_s$  的演化规律, 它们的特征是和 (20) 类似的:

$$\frac{v_s}{v_0} = \sqrt{\frac{A_0}{A(X)}} e^{-\frac{1}{2c} \left( a_0 - \frac{b_0}{\rho c^2} \right) X}, \quad \left( v_0 \equiv -\frac{\sigma_0}{\rho c} \right) \quad (21)$$

$$\frac{\epsilon_s}{\epsilon_0} = \sqrt{\frac{A_0}{A(X)}} e^{-\frac{1}{2c} \left( a_0 - \frac{b_0}{\rho c^2} \right) X}, \quad \left( \epsilon_0 = \frac{\sigma_0}{\rho c^2} \right) \quad (22)$$

其中  $v_0 = -\frac{\sigma_0}{\rho c}$  和  $\epsilon_0 = \frac{\sigma_0}{\rho c^2}$  是以质速和应变表征的冲击波的初始强度。

观察公式 (20) (或 (21)、(22)), 可以得出关于变截面粘弹性杆中冲击波演化规律的如下特性:

第一, 冲击波阵面紧后方的应力  $\sigma_s$  (质速、应变) 只与边界突加载荷  $\sigma_0$  成正比, 而它随传播距离的演化规律  $\sigma_s(X)$  却与边界上所加载荷的具体形式  $\sigma(t)$  完全无关, 后者将只是对冲击波后区域内的应力分布特性产生影响。这一点是和变截面弹性杆中的情况完全相同

的<sup>[1]</sup>。

第二,对特定的材料 ( $a_0, b_0, b_1 = \rho c^2$ ),任一距端部距离为  $X_1$  的截面上的冲击波阵面紧后方应力  $\sigma_s(X_1)$  完全由面积比的平方根  $\sqrt{\frac{A_0}{A(X_1)}}$  所决定,而与由端部面积  $A_0$  过渡到面积  $A(X_1)$  的具体形式,即决定这段杆形状的函数  $A(X)$  的具体形式无关。更一般地说,任二杆截面  $X_1$  和  $X_2$  处冲击波阵面紧后方的应力之比  $\frac{\sigma_s(X_2)}{\sigma_s(X_1)}$  与二截面的面积比的平方根  $\sqrt{\frac{A(X_2)}{A(X_1)}}$  成反比,而与由  $X_1$  过渡到  $X_2$  的具体杆形无关。

$$\frac{\sigma_s(X_2)}{\sigma_s(X_1)} = \sqrt{\frac{A(X_1)}{A(X_2)}} e^{-\frac{1}{2c} \left( a_0 - \frac{b_0}{\rho c^2} \right) (X_2 - X_1)} \quad (23)$$

这是和变截面弹性杆中的情况相类似的<sup>[1]</sup>,区别仅在于此处多出一个与材料性质有关的指数函数因子。将 (19) 写为

$$\frac{d\sigma_s}{dX} = -\frac{1}{2} \sigma_s \left[ \frac{A'(X)}{A(X)} + \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2} \right] \quad (24)$$

可见在任一截面  $X$  处,冲击波阵面紧后方的应力是增长抑或是衰减完全取决于量

$$G(X) = \left[ \frac{A'(X)}{A(X)} + \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2} \right] \quad (25)$$

是负抑或是正。 $\frac{A'(X)}{A(X)}$  代表几何因素对冲击波演化的贡献; $A'(X) < 0$  (递减变截面杆)

时,此项将力图使冲击波增强,而  $A'(X) > 0$  (递增变截面杆) 时,此项将力图使冲击波衰减。 $\frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2} = \frac{1}{ct_i} \left( 1 - \frac{E_0}{E_i} \right)$  代表材料参数即本构因素对冲击波演化的贡献,由于粘弹性材料存在着应力松弛行为,即恒有  $E_i \geq E_0$ ,所以该项的效应总是使冲击波强度减弱,这正是材料粘性效应的反映。这一本构因素引起的衰减系数与  $ct_i$  成反比,与  $\left( 1 - \frac{E_0}{E_i} \right)$  成

正比。冲击波在一截面处的演化趋势则取决于几何因素和本构因素的共同作用,因此我们可以称  $G(X)$  为变截面杆中冲击波的演化因子。特别对指数锥形的变截面杆,即当

$$A(X) = A_0 e^{-kX} \quad (26)$$

( $k > 0, k < 0, k = 0$  分别代表收缩杆、扩充杆、等截面杆),有

$$G(X) = \frac{1}{2} \left[ \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2} - k \right] = G \quad (25)'$$

为常数。故对于  $k > \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2}, k < \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2}, k = \frac{a_0}{c} - \frac{b_0}{\rho c^2}$  的情况,将分别有冲击波增长、衰减和保持不变。我们顺便指出,公式 (25)' 暗示:通过对指数锥变截面杆中冲击波演化规律的实验测量可以得出标准线性粘弹性材料参数间相互联系的一个关系。如果对三个不同  $k$  值的指数锥变截面杆,测出冲击波演化规律并用指数函数进行拟合求出各自的演化

因子  $G$ , 则便可由 (25)' 给出的三个关系求出材料的三个材料常数  $a_0, b_0, b_1$ 。如果考虑到波速  $c = \sqrt{\frac{b_1}{\rho}}$  很易单独测量, 则可用两种不同  $k$  值的实验求出  $a_0$  和  $b_0$ 。特别, 对 Maxwell 材料  $b_0 = 0, a_0 = E_1/\eta = \rho c^2/\eta$ , 便有

$$\rho c/\eta - k = G \quad (27)$$

这给出了由一种指数锥杆即可求出材料粘性系数的方法。

在杆的左端边界上即  $t$  轴上, 物理上通常给出的是应力边条件、质点速度边条件或者耦合形边条件 (比如应力和质速间的一个耦合关系)。因此一旦在由 (20) — (22) 求出冲击波阵面紧后方的应力  $\sigma_1$ 、质速  $v_1$  和应变  $\epsilon_1$  之后, 在冲击波迹线  $OA$  和  $t$  轴之间的区域中只要解一个混合边值问题即可得出杆中应力波传播的完整解答, 从而得出杆中各物理量在任一时刻的定时场剖面 and 它们在任一截面  $X$  处的定点时程曲线。这可以通过将特征关系 (13) (或者边条件) 化为沿三条特征线的差分方程并进行数值积分来完成。显然相应的计算程序并不复杂, 故不再多述; 我们将通过一个给定应力边条件的算例来说明计算结果和某些有启发性的结论。

## 5 算例

考虑一种典型的标准线性粘弹性材料, 其材料参数为

$$\rho = 1.224 \text{ g/cm}^3, \quad c = \sqrt{\frac{E_1}{\rho}} = 1790 \text{ m/s}, \quad \eta = \frac{E_1}{a_0} = 3 \times 10^5 \text{ Ns/m}^2, \quad \frac{E_0}{E_1} = 0.1,$$

边界应力时程曲线为

$$\sigma = \sigma_0 e^{-t/300}, \quad \sigma_0 = 5.0 \times 10^7 \text{ N/m}^2 \quad (t \text{ 的单位为 } \mu\text{s})$$

杆的截面积变化规律为

$$A(X) = A_0 e^{-kX} \quad (X \text{ 和 } k \text{ 的单位分别为 } \text{m}, \text{m}^{-1}).$$

对  $k = 4.0, 6.0, 6.57, 7.0$  四种收缩杆的情况进行了计算。对每一种  $k$  值情况的应力剖面的演化规律分别示于图 3、4、5、6 中, 每一图中的三条实线 1、2、3 分别对应时刻  $t = 200 \mu\text{s}, 350 \mu\text{s}$  和  $500 \mu\text{s}$ , 而图中的虚线则是杆中冲击波阵面上应力的演化规律。由图可见, 对  $k = 4.0$  和  $6.0$  二种情况, 由于杆截面收缩较慢, 几何因素对冲击波的放大作用不足以弥补材料粘性对冲击波的衰减效应, 因此冲击波是衰减的; 对  $k = 7.0$  的情况, 截面收缩这一几何因素所引起的冲击波放大作用超过了材料粘性效应对冲击波的衰减作用, 因此冲击波在传播过程中表现出强度不断增大, 这正是应力波铆接器所基于的应力波放大原理; 图 5 所表示的  $k = 6.57$  的情况, 恰是一个临界情况, 截面收缩的应力放大作用和材料粘性的应力衰减作用相互均衡, 冲击波象在等截面弹性杆中传播时一样保持其强度不变。

由图 3 — 图 6 的应力剖面的演化情况还可看到, 截面的收缩规律不同时, 即对应不同形状的变截面杆, 应力剖面的特点也是不同的。随着  $k$  值的增大, 即截面收缩速度的提高, 杆中的应力剖面由全凸形变为只在冲击波阵面附近凸形以至最后整个应力剖面成为凹形, 这也为工程上的波形控制提供了一个启发性线索。当然边界上的载荷变化规律和变截面杆的二维效应也将对杆中应力波形的演化有重要影响。关于这二方面的问题, 文献 [1] 和 [2] 分别就弹

性直锥杆的情况进行了初步讨论。对于更一般的情况和更普遍的结论，作者正在进行系统的研究。

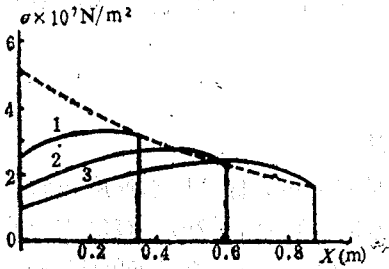


图 3 各时刻应力剖面 ( $k=4.0$ )

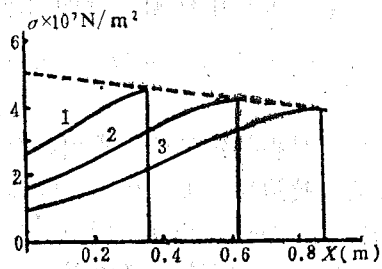


图 4 各时刻应力剖面 ( $k=6.0$ )

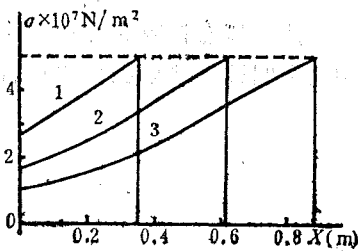


图 5 各时刻应力剖面 ( $k=6.57$ )

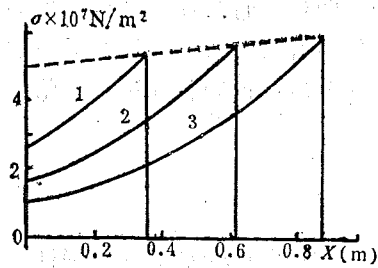


图 6 各时刻应力剖面 ( $k=7.0$ )

### 参 考 文 献

- [1] 王礼立、胡时胜, 宁波大学学报, 1 (1988), 70—78.
- [2] 周光泉、刘孝敏, 应用数学和力学, 6 (1985), 797—806.
- [3] 王礼立, 应力波基础, 国防工业出版社, 北京, 1985, 9—18.
- [4] Jeffery A, Quasilinear Hyperbolic Systems and Waves, Pitman, London, 1978, 42—56.

# The Evolution of Shocks in a Viscoelastic Bar With Varying Cross-Section Area

Li Yongchi   Wei Yong   Hu Huzhang

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

This Paper discusses the characteristics of stress wave propagation and the jump conditions for a shock in a bar, which is made of standard linear viscoelastic material and with varying cross-section area, and obtains the evolution rule for the shock in the bar. As an illustration, we calculate the wave propagation rules and show some characteristics of the stress wave evolution. The results of the paper have significance to problems such as stress-wave riveting, wave-shape-control and the parameter measurement of viscoelastic materials.

**Key words:** viscoelasticity, bar with varying cross-section area, shock evolution, characteristic relation.

# 绝热剪切的一种应变局部化分析

包含胜

王礼立

(中国科学技术大学)

(宁波大学)

## 摘 要

对绝热剪切变形,提出了一种考虑变形过程中热产生和热散失影响的非均匀材料的应变局部化模型。以 $\beta$ -钛合金为例的计算结果表明,该模型可用于描述整个变形局部化过程。在一定环境温度下,变形剧烈局部化时的平均应变明显依赖于加载速度,这与基于均匀化模型的绝热剪切的热粘塑性失稳准则相一致。

**关键词:** 绝热剪切, 热粘塑性失稳, 应变局部化。

## 1 引言

绝热剪切是材料在高速大变形下普遍存在的现象,它往往是材料破坏的先兆,有必要进行更深入地研究。

迄今为止,绝热剪切的失稳分析理论大致可分为两大类。一类为基于将变形材料表观地作为一个均匀整体来进行失稳分析,它始于 Zener and Hollomon<sup>[1]</sup>提出的以最大应力临界条件出发的热塑失稳分析。在此基础上,Recht<sup>[2]</sup>和 Culver<sup>[3]</sup>先后提出了绝热剪切的临界应变率准则和临界应变准则。与最大应力临界条件相平行,Clifton<sup>[4]</sup>和白以龙<sup>[5]</sup>采用线性摄动分析方法以及 Molinari 和 Clifton<sup>[6]</sup>等采用非线性摄动分析方法先后对剪切带的热塑失稳现象作了分析。但这些分析最终仍归结为寻求绝热剪切产生的某个临界应变,即仍属于单控制变量临界准则。王礼立等<sup>[7-9]</sup>则在热粘塑性失稳的理论和实验的基础上指出应变、应变率和环境温度都是决定绝热剪切是否发生和发展的重要因素,并提出了多变量控制的热粘塑性失稳准则。

另一类理论基于非均匀变形的局部化分析,即具体考虑到材料的初始不均匀性的存在,并认为在一定条件下导致局部化的发生和发展,如 Semiatin 等人<sup>[10]</sup>所作的分析。从这样的思路出发,本文提出了一个基于非均匀热粘塑性变形的分区的非线性应变局部化分析模型。其中考虑了变形功生成热和由热传递作用的热散失效应。这一模型可以模拟缺陷区域(剪切带)内外应变、应变率和温度的发展与变化,并且可由此说明热粘塑性材料在一定的环境温度下应变、应变率都是影响应变局部化的重要因素,与基于表观均匀变形模型的热粘



塑性失稳准则<sup>[7-9]</sup>相一致。

## 2 分析模型

本分析模型的基本出发点是：

①假设材料的应变局部化是材料中已存在的某种不均匀性在一定条件下进一步发展演化的结果。这种不均匀性可以是材料的、几何的、变形的或温度的某种初始不均匀。

②设这种具有初始不均匀性的变形体总可以分为缺陷区和完整区两部分，两个区域内的变形分别都是均匀的。且设缺陷区域所占体积一般远小于完整区域。

现考虑一个简单剪切变形状态，对于热粘塑性材料，一般地有本构方程

$$\tau = \tau(\gamma, \dot{\gamma}, T) \quad (1)$$

其中 $\tau$ 为剪切应力， $\gamma$ 为剪切应变， $\dot{\gamma}$ 为剪切应变率， $T$ 为材料在变形过程中的瞬时温度。

材料在非弹性变形过程中部分变形功转化为热量引起温升，可表达为

$$\rho c dT = \beta \tau d\gamma \quad (2)$$

其中 $\rho$ 为材料密度， $c$ 为比热， $\beta$ 为变形功转化为热量的百分数。

对于一种特定材料，考虑两种极端情形：当变形速度接近零或低得足以看作准静态时，对应的变形应看作等温过程，即 $\beta = 0$ ，也就是非弹性变形功生成的热量全部散失，无温升出现；反之，当变形速度趋于无穷大或高得足以忽略热散失时，对应的变形可看作绝热过程，即 $\beta = 1$ ，非弹性变形功全部转化为热量引起温升。由此看来， $\beta$ 在此意义上应是和变形速率相关的。为了便于问题的分析，假设 $\beta$ 和应变率 $\dot{\gamma}$ 之间存在着反映上述关系的某个一一对应的单值函数：

$$\beta = \beta(\dot{\gamma}) \quad (3)$$

当以式(3)代入式(2)后，就得到在任意应变率 $\dot{\gamma}$ 下同时考虑了热产生和热散失的下列方程

$$\rho c dT = \beta(\dot{\gamma}) \tau(\gamma, \dot{\gamma}, T) d\gamma \quad (4)$$

方程(4)的解一般可以表示为

$$T = T(\gamma, \dot{\gamma}) \quad (5)$$

这表示材料在变形过程中的瞬时温度由应变和应变率共同确定。

上述结果对缺陷区和完整区都成立，且在两区域的交界面上，应满足位移连续条件和应力连续条件。对简单剪切状态，即有

$$\tau_u = \tau_d \quad (6)$$

其中下标为 $u$ 的量表示完整区的量，下标为 $d$ 的量代表缺陷区的量（以下同）。进一步假设两区有相同形式的热粘塑性本构方程，但表征材料强度、应变硬化、应变率硬化和热软化等特性的某个或某些具体材料参数存在着微小差异，则(6)式可写为

$$\tau(\gamma_u, \dot{\gamma}_u, T_u; k_u) = \tau(\gamma_d, \dot{\gamma}_d, T_d; k_d) \quad (7)$$

其中 $k$ 表示某个材料参数。

将方程(5)代入方程(7)，可得

$$\tau_u(\gamma_u, \dot{\gamma}_u, T(\gamma_u, \dot{\gamma}_u; k_u); k_u) = \tau_d(\gamma_d, \dot{\gamma}_d, T(\gamma_d, \dot{\gamma}_d; k_d); k_d) \quad (8)$$

任意时刻整个变形体的平均应变率 $\dot{\gamma}_{av}$ 应是两区域应变率的几何平均值：

$$\dot{\gamma}_{a,v} = v_u \cdot \dot{\gamma}_u + v_d \dot{\gamma}_d \quad (9)$$

其中  $v_u$  和  $v_d$  分别为完整区和缺陷区材料所占的体积百分比, 且满足

$$v_u + v_d = 1 \quad (10)$$

方程 (8)、(9) 和 (10) 在整个加载过程的任意时刻都成立。

另外, 设初始条件

$$t = 0 \text{ 时, } \gamma_u = \gamma_d = 0, T_u = T_d = T. \quad (11)$$

其中  $T_0$  为环境温度。

恒应变率条件:

$$\dot{\gamma}_{a,v}(\epsilon) = \text{常数} \quad (12)$$

再利用应变率的定义  $\frac{d\gamma}{dt} = \dot{\gamma}$ , 一般可用有限差分数值计算得出任意时刻完整区和缺陷区的应变、应变率和温度, 从而可以模拟变形局部化发展的全过程, 并讨论其临界条件。

一般说来, 只要初始不均匀存在, 任意时刻两区内的应变、应变率和温度一般不相等, 也就是说两区出现了某些状态参量的间断。当然这种间断并不破坏两区边界处的位移连续条件和应力连续条件。

### 3 算例

现以  $\beta$ -钛合金试件受轴向压缩为例进行计算。

#### 3.1 基本方程

由文献 (5) 可知  $\beta$ -钛合金  $TB_2$  具有形如

$$\sigma = (\sigma_0 + E_1 \epsilon) \left( 1 + g \ln \frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0} \right) \left( 1 - \alpha \frac{T}{T_0} \right) \quad (13)$$

的热粘塑性本构方程。与方程 (4) 相应的能量守恒方程可写为

$$\rho c dT = \beta(\dot{\epsilon}) (\sigma_0 + E_1 \epsilon) \left( 1 + g \ln \frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0} \right) \left( 1 - \alpha \frac{T}{T_0} \right) d\epsilon \quad (14)$$

取  $\beta(\dot{\epsilon})$  为

$$\beta(\dot{\epsilon}) = \frac{1}{\pi} \arctg \left( \frac{1}{3} \operatorname{tg} \frac{2\pi}{5} \cdot \lg \dot{\epsilon} \right) + \frac{1}{2} \quad (15)$$

它满足  $\lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow \infty} \beta(\dot{\epsilon}) = 1$  和  $\lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow 0} \beta(\dot{\epsilon}) = 0$ , 又满足通常认为的在高应变率  $\dot{\epsilon} = 10^3 \text{ s}^{-1}$  时  $\beta = 0.9$ ,

以及在准静态应变率  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  时  $\beta = 0.1$ 。

由两区域边界应力连续条件, 方程 (8) 所给的联系两区域的状态变量之间的关系可以具体化为

$$\begin{aligned} & (\sigma_{0,u} + E_{1,u} \epsilon_u) \left( 1 + g_u \ln \frac{\dot{\epsilon}_u}{\dot{\epsilon}_{0,u}} \right) \left( 1 - \alpha_u \frac{T_u}{T_0} \right) \\ & = (\sigma_{0,d} + E_{1,d} \epsilon_d) \left( 1 + g_d \ln \frac{\dot{\epsilon}_d}{\dot{\epsilon}_{0,d}} \right) \left( 1 - \alpha_d \frac{T_d}{T_0} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

#### 3.2 数值计算方法

与 (11) 式相应的初始条件:  $t = 0$  时,  $(\epsilon_u)_0 = (\epsilon_d)_0 = 0$ ,  $(T_u)_0 = (T_d)_0 = T_0$ ; 与

(12) 式相应的恒应变率条件为  $\dot{\epsilon}_{u,v}(t) = \dot{\epsilon}_{u,v}$ , 而初始时刻的应变率  $(\dot{\epsilon}_u)_0$  和  $(\dot{\epsilon}_d)_0$  则可通过上述条件及 (9)、(16) 式联立求得。

经历微小时间后, 即在  $t_1 = (\Delta t)_1$  时刻, 两区的应变和温度为

$$\text{应变} \begin{cases} (\epsilon_u)_1 = (\dot{\epsilon}_u)_0 (\Delta t)_1 \\ (\epsilon_d)_1 = (\dot{\epsilon}_d)_0 (\Delta t)_1 \end{cases}$$

$$\text{温度} \begin{cases} (T_u)_1 = (T_u)_0 + (\Delta T_u)_1 = T_0 + (\Delta T_u)_1 \\ (T_d)_1 = (T_d)_0 + (\Delta T_d)_1 = T_0 + (\Delta T_d)_1 \end{cases}$$

其中

$$(\Delta T_u)_1 = \frac{\beta [(\dot{\epsilon}_u)_0]}{\rho c} [\sigma_{0,u} + E_{1,u}(\epsilon_u)_0] \left[ 1 + g_u \ln \frac{(\dot{\epsilon}_u)_0}{\dot{\epsilon}_0} \right] \left[ 1 - \alpha_u \frac{(T_u)_0}{T_0} \right] (\Delta \epsilon_u)_1$$

$$(\Delta T_d)_1 = \frac{\beta [(\dot{\epsilon}_d)_0]}{\rho c} [\sigma_{0,d} + E_{1,d}(\epsilon_d)_0] \left[ 1 + g_d \ln \frac{(\dot{\epsilon}_d)_0}{\dot{\epsilon}_0} \right] \left[ 1 - \alpha_d \frac{(T_d)_0}{T_0} \right] (\Delta \epsilon_d)_1$$

$$(\Delta \epsilon_u)_1 = (\epsilon_u)_1 - (\epsilon_u)_0$$

$$(\Delta \epsilon_d)_1 = (\epsilon_d)_1 - (\epsilon_d)_0$$

同样由式 (9) 和式 (16) 可计算出该时刻  $(\dot{\epsilon}_u)_1$  和  $(\dot{\epsilon}_d)_1$ 。

依次类推可计算出任意时刻缺陷区和完整区的应变、应变率和温度。

### 3.3 计算结果和讨论

卢维娴等<sup>[11, 12]</sup>在对应力波铆接中出现的绝热剪切带进行显微观察时曾略估剪切带所占体积为总体积的 0.1% 左右。据此, 在本算例中, 设缺陷区所占材料总体积百分比  $v_d = 0.1\%$ 。计算中所用的表观材料常量参照文献<sup>[5]</sup>, 缺陷区与完整区之间材料常量相对偏差均控制在 5% 左右。

算例中仅考察了表征强度水平的材料参数值  $\sigma_0$  在两区不同时, 即由初始条件不均匀  $\Delta\sigma_0$  所导致的应变局部化发展的情况。取平均应变率为  $\dot{\epsilon}_{u,v} = 1.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$ 。当分别取  $\Delta\sigma_0 = 0, 20, 30, 40 \text{ MPa}$  时, 计算得出的缺陷区应变  $\epsilon_d$  相对于完整区应变  $\epsilon_u$  的变化情况如图 1 所示。注意,  $\Delta\sigma_0 = 0$  实际对应于均匀材料, 因此两区内应变当然在任意时刻总是相等的, 也就是说不存在应变局部化的可能, 在图 1 上对应于

对角线; 对于其中的  $\Delta\sigma_0 \neq 0$  的情况, 在变形初始阶段, 由于缺陷区是弱区 ( $\sigma_{0,d} < \sigma_{0,u}$ ), 应变增长相对地较快, 变形不久, 应变硬化和应变率硬化起着主导作用, 从而阻止了变形在缺陷区的快速增长, 反而使变形又趋于均匀化。但随着外载的继续作用, 平均应变不断增加, 热软化的作用就越来越显著, 其作用一旦大于应变硬化和应变率硬化时, 缺陷区应变激烈增加, 而完整区应变的增加相对变缓, 意味着进入了变形局部化过程, 并且由于正反馈作用愈演愈烈, 对  $\Delta\sigma_0 = 20, 30, 40 \text{ MPa}$ , 变形剧烈局部化开始时所对应的完整区应变值  $\epsilon_{u,c}$ , 分别为 24.2%, 19.8% 和 16.0%。可见  $\Delta\sigma_0$  越大,  $\epsilon_{u,c}$  越小。

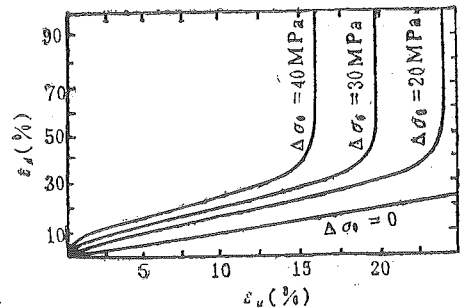


图 1 材料参数之差  $\Delta\sigma_0$  不同引起局部化过程的差异

当缺陷区和完整区间存在其它材料参量的差异时，计算表明可以得到类似的结果。两区材料参量的差异无疑是引起变形局部化的可能原因之一。

在任给的初值条件（式（11）和（12））下，不仅可以计算缺陷区应变  $\epsilon_d$  和完整区应变  $\epsilon_u$  的变化发展情况，也可以计算缺陷区应变率  $\dot{\epsilon}_d$ ，完整区应变率  $\dot{\epsilon}_u$ ，缺陷区温度  $T_d$  和完整区温度  $T_u$  随变形的发展情况。图 2 给出了平均应变率  $\dot{\epsilon}_{av}$  为  $10^3 \text{ s}^{-1}$  的计算结果。由

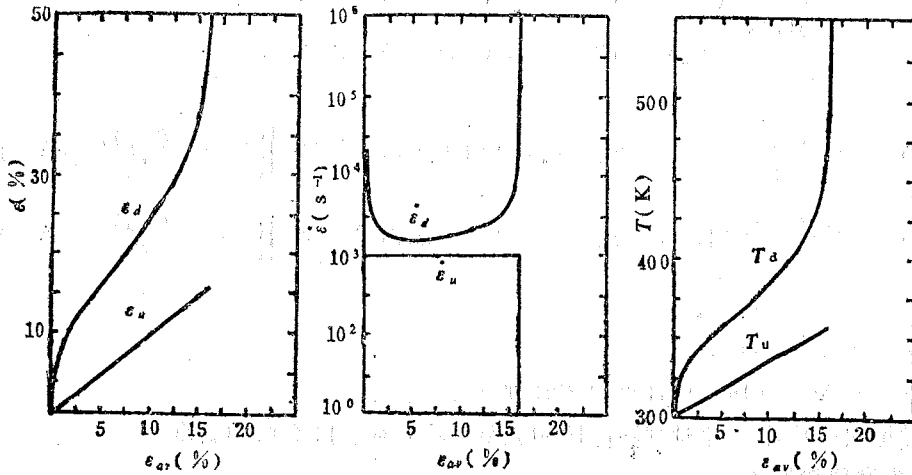


图 2 缺陷区和完整区应变、应变率和温度的局部化过程

图可知，对于一定的速度边界条件（恒应变率）下，当平均应变达到某一临界值  $\epsilon_c$  时，缺陷区内的应变  $\epsilon_d$ 、应变率  $\dot{\epsilon}_d$  和温度  $T_d$  均会剧烈增加。这对应于应变局部化的产生。

对于不同的速度边界条件即不同恒应变率条件下的计算结果表明：应变局部化的发生条件也依赖于应变率。当平均应变率分别为  $\dot{\epsilon}_{av} = 2.5 \times 10^2 \text{ s}^{-1}$ ， $1.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  和  $4.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  时，计算结果如图 3 所示。可见剧烈变形局部化起始时对应的临界应变  $\epsilon_c$  分别为 14.5%，16.0% 和 17.8%。这说明  $\dot{\epsilon}_{av}$  不同，剧烈地变形局部化起始时对应的  $\epsilon_c$  亦不相同。随  $\dot{\epsilon}_{av}$  增加， $\epsilon_c$  值减小。这和我们的实验观察研究结果<sup>[7]</sup>和基于材料表观均匀化模型所建议的热

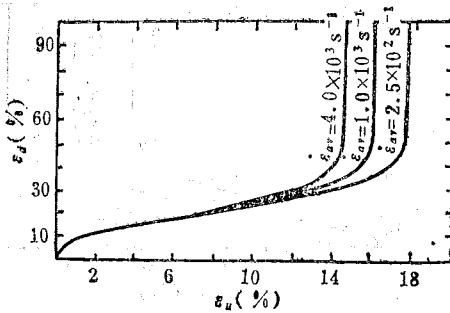


图 3 平均应变率的不同引起应变局部化过程的差异

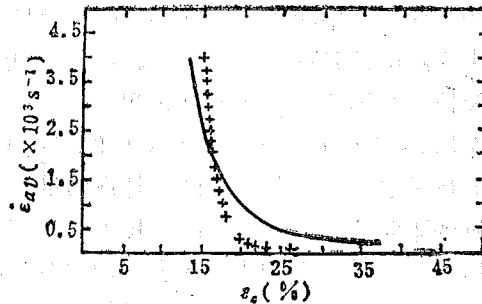


图 4 应变局部化分析计算结果与 [8] 热粘塑失稳准则比较  
+++ 计算结果  
—— 文献 [8]

粘塑失稳准则理论分析<sup>[6]</sup>，至少在定性上，是相一致的。金相观察结果还表明<sup>[11,12]</sup>：形变带出现时带内应变至少比带外大一个数量级。为了作定量描述，定义  $\epsilon_d/\epsilon_u = 10$  时的平均应变  $\epsilon_{av}$  为形变带出现的临界失稳应变  $\epsilon_c$ 。分别给定不同的加载速度边界条件来计算相应的临界失稳应变  $\epsilon_c$ ，则当平均应变率  $\dot{\epsilon}_{av}$  在  $2.5 \times 10^2 \text{ s}^{-1} \sim 4.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  之间得出的  $\dot{\epsilon}_{av} \sim \epsilon_c$  关系如图 4 所示。可见应变率和应变对应变局部化过程都具有不可忽略的影响。总的变化规律与基于材料表观均匀化模型的热粘塑失稳准则<sup>[9]</sup>是相似的。

#### 4 结论

本文对绝热剪切提出了一个基于材料初始不均匀的分区的应变局部化非线性分析模型，该模型考虑了变形过程中的热产生和热散失效应，适用于较宽的应变率范围。

以热粘塑性材料  $\beta$ -钛合金 TB2 为例的计算结果表明：该分析模型可以方便地计算出每一瞬时两个区域内变形的发展，因而可以描述整个应变局部化的全过程；在一定的环境温度下，变形剧烈局部化时的平均应变明显依赖于加载速度，这和基于材料表观均匀化模型的绝热剪切粘塑失稳准则相一致。

#### 参 考 文 献

- [1] Zener C and Hollomon J H, *Appl. Phys.*, **15** (1944), 22.
- [2] Recht R F, *J. Appl. Mech. Trans.*, ASME, **31** (1964), 198.
- [3] Culver R S, Metallurgical Effects at High Strain Rates, Rchde R W, Buther B M, Holland J R, and Karnes C H eds., New York, 1973, 519—530.
- [4] Clifton R J, Report NMAB-356 of the NRC Committee on Mater. Response to Ultrasonic Loading Rates, 1978.
- [5] Bai Y L, *J. Mech. Phys. Solids*, **30** (1982), 195.
- [6] Moliner A and Clifton R J, Tech. Report DAAG-29-85-k0003, Brown University, 1986.
- [7] Wang L L, Lu W X, Hu S S and Tang Z P, IUTAM, MMMHVDF, Aug. 12-15, 1985, Tokyo, Japan, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1978.
- [8] Wang L L, On Proc. Inter. Symp. on Intense Dynamic Loading and It Effects, 1986, Beijing, 787.
- [9] Wang L L, Bao H S and Lu W X, *Journal of Physics (French)*, **49** (1988), Supplement, 207.
- [10] Semiatin S L, Staker M R, Jonss J J, *Acta Metall.*, **33** (1984), 1347.
- [11] 卢维娴、陆在庆、爆炸与冲击, **5** (1985), 9.
- [12] 卢维娴、王礼立、陆在庆, 金属学报, **22** (1986), 317.

# An Analysis of Strain Localization for Adiabatic Shearing

Bao Hesheng

Wang Lili

(Univ. of Sci. & Tech. of China) (Ningbo University)

For adiabatic shearing, a strain localization model is presented which takes into consideration the effects of heat generation and transfer. The numerical analysis for a titanium alloy TB-2 shows that such a model can be used to describe the whole process of strain localization. It also shows that the average strain corresponding to catastrophic strain localization is obviously dependent on loading strain rates. Such result is in agreement with the thermal-viscoplastic instability criterion for adiabatic shearing based on the uniform strain model.

**Key words:** adiabatic shearing, thermal-viscoplastic instability, strain localization.

# EPIC-2对高速撞击的数值模拟

王肖钧 胡秀章 李永池 张晓武

(近代力学系)

## 摘 要

介绍了二维有限元动力学数值计算程序EPIC-2的基本思想和特点,对球头弹和平头弹的高速撞击现象(撞击速度在700m/s~1800m/s)进行了数值模拟计算。结果表明EPIC-2程序具有较强的计算大变形问题的能力,是高速撞击领域内较有效的计算方法之一。

**关键词:** 数值模拟, 流体弹塑性, 有限元, 高速撞击。

## 1 引言

EPIC-2程序<sup>[1]</sup> (Elastic-Plastic Impact Computations in 2 Dimension) 是G.R. Johnson于1978年提出并主要用来模拟高速撞击现象的二维显式Lagrange有限元程序。该程序以流体弹塑性模型为基础。在强度效应方面考虑了静水压、应变率和热软化等因素的影响。在材料界面上引入滑移面思想,用来模拟撞击过程中开坑侵彻冲塞等物理现象。程序可描述爆轰波作用、弹体自旋并具有多种几何生成功能。程序因采用线性三角形单元,所以便于模拟高速撞击时坑缘附近剧烈畸变的物理过程。但是三角形单元也有单元划分较多从而增加计算量的缺点。

为了提高程序的计算效率,我们通过引入抗沙漏节点力的方法<sup>[2]</sup>将双线性四边形单元用于EPIC-2程序。此外,由于在高速撞击问题中大变形常常集中在某个局部范围内,因此我们采用群组单元划分技术(或称 $E-E^m$ 法<sup>[3]</sup>)来提高程序的效率。本文将集中介绍G. R. Johnson原先提出的以线性三角形单元为基础的EPIC方法。

以球头弹和平头弹高速撞击中厚靶板为例进行了数值模拟计算。尽管这些计算依然是初步的,但是我们大致可以看到EPIC-2程序的功能。

## 2 EPIC-2方法简介

图1表示EPIC方法中采用的典型的轴对称三角形单元。图中 $i$ 、 $j$ 、 $m$ 表示单元节点号。 $R$ 和 $Z$ 为Lagrange坐标。

采用线性插值函数后三角形单元的径向位移场  $u$  可以表示成

$$u = \frac{1}{2A} [(a_i + b_i r + c_i z) u_i + (a_j + b_j r + c_j z) u_j + (a_m + b_m r + c_m z) u_m] \quad (1)$$

式中  $u_i, u_j, u_m$  表示节点  $i, j, m$  上的径向位移。  $A$  为三角形单元面积。系数  $a_i, b_i, c_i, \dots$  是由节点几何位置决定的常数。对于轴向位移场  $v$  也有完全类似的表达式，

$$v = \frac{1}{2A} [(a_i + b_i r + c_i z) v_i + (a_j + b_j r + c_j z) v_j + (a_m + b_m r + c_m z) v_m] \quad (2)$$

单元的变形通过应变率描述，

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_r &= \frac{\partial \dot{u}}{\partial r} & \dot{\gamma}_{r,z} &= \frac{\partial \dot{u}}{\partial z} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial r} \\ \dot{\epsilon}_z &= \frac{\partial \dot{v}}{\partial z} & \dot{\gamma}_{r,\theta} &= \frac{\partial \dot{w}}{\partial r} - \frac{\dot{w}}{r} \\ \dot{\epsilon}_\theta &= \frac{\dot{w}}{r} & \dot{\gamma}_{z,\theta} &= \frac{\partial \dot{w}}{\partial z} \end{aligned} \quad (3)$$

式中“ $\cdot$ ”表示对时间的导数，“ $-$ ”表示单元中心点上的物理量。 $\dot{w}$  表示周向速度，它是由入射弹体自身旋转所引起的速度场。当旋转角速度为  $\dot{\theta}$  时， $\dot{w} = r\dot{\theta}$ 。

在流体弹塑性模型中，应力张量  $\sigma_{ij}$  被分解为应力偏量  $s_{ij}$  和静水压力  $p$ ，

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + s_{ij} \quad (4)$$

静水压力  $p$  服从流体型的状态方程。在 EPIC-2 程序里，采用了如下形式的 Grüneisen 方程，

$$p = (k_1 \mu + k_2 \mu^2 + k_3 \mu^3) \left( 1 - \frac{\Gamma \mu}{2} \right) + \Gamma E (1 + \mu) \quad (5)$$

式中  $k_1, k_2, k_3$  系材料常数， $\mu = V_0/V - 1$ ， $V$  表示比容， $E$  为单位体积的内能。

设材料为理想塑性体，采用 Mises 屈服条件，弹塑性变形时的应力偏量  $s_{ij}$  可以统一地用下式处理<sup>[4]</sup>，

$$s_{ij} = \begin{cases} s_{ij} & \bar{\sigma} \leq \bar{s} \\ \frac{\bar{s}}{\bar{\sigma}} s_{ij} & \bar{\sigma} > \bar{s} \end{cases} \quad (6)$$

式中等号右边的  $s_{ij}$  表示按增量型的弹性畸变律给出的

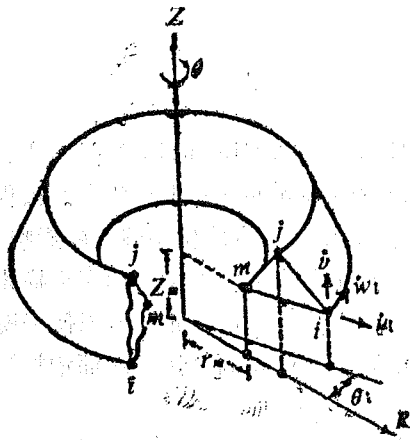


图 1 轴对称三角形单元

应力偏量，

$$\begin{aligned} \dot{s}_r &= 2G\dot{\epsilon}_r - 2\tau_{r,z}\omega_{r,z} \\ \dot{s}_z &= 2G\dot{\epsilon}_z + 2\tau_{r,z}\omega_{r,z} \\ \dot{s}_\theta &= 2G\dot{\epsilon}_\theta \\ \dot{\tau}_{r,z} &= G\dot{\gamma}_{r,z} + (\sigma_r - \sigma_z)\omega_{r,z} \\ \dot{\tau}_{r,\theta} &= G\dot{\gamma}_{r,\theta} \\ \dot{\tau}_{z,\theta} &= G\dot{\gamma}_{z,\theta} \end{aligned} \quad (7)$$

式中  $\dot{\epsilon}_r, \dot{\epsilon}_z, \dot{\epsilon}_\theta$  表示偏应变率分量。第二项表示二维速度场中的旋转修正<sup>[5]</sup>。旋度



$$\omega_{r,z} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

(6) 式中的  $\bar{\sigma}$  表示等效应力,

$$\bar{\sigma} = \left[ \frac{3}{2} (s_r^2 + s_z^2 + s_\theta^2) + 3 (\tau_{r,z}^2 + \tau_{r,\theta}^2 + \tau_{z,\theta}^2) \right]^{1/2}$$

$\bar{s}$  表示等效屈服强度, 在EPIC程序中它考虑了静水压  $p$ , 应变率  $\bar{\epsilon}$  和温度  $T$  等因素的影响,

$$\bar{s} = s_{\bar{\epsilon},p} [1 + c_1 \log(\bar{\epsilon})] [1 + c_2 p + c_3 p^2] [c_4 + c_5 T] \quad (8)$$

式中  $s_{\bar{\epsilon},p}$  是与等效塑性应变  $\bar{\epsilon}_p$  有关的静态等效屈服强度。

计算中为了消除局部振荡和数值噪音, 我们引入混合型人工粘性力  $Q$ ,

$$Q = \begin{cases} c_0 \rho_0 c_0 h |\dot{\epsilon}_v| + c_1^2 \rho_0 h^2 (\dot{\epsilon}_v)^2 & \text{当 } \dot{\epsilon}_v < 0 \\ 0 & \text{当 } \dot{\epsilon}_v \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

式中  $c_0$  为材料初始声速,  $\rho_0$  为初始密度,  $h$  表示单元平均尺度。  $c_1, c_2$  是两个无量纲参量, 计算中通常取  $c_1 = 0.5$ ,  $c_2 = 2.0$ 。  $\dot{\epsilon}_v = \frac{1}{3} (\dot{\epsilon}_r + \dot{\epsilon}_\theta + \dot{\epsilon}_z)$  表示体积应变率。

由虚功原理可以求出节点  $i$  上的节点力,

$$\begin{aligned} F_r^i &= -\pi \bar{r} [(z_i - z_m) \sigma_r + (r_m - r_i) \tau_{r,z}] - \frac{2}{3} \pi A \sigma_\theta \\ F_z^i &= -\pi \bar{r} [(r_m - r_i) \sigma_z + (z_i - z_m) \tau_{r,z}] \\ F_\theta^i &= -\pi \bar{r} \left[ (z_i - z_m) \frac{\bar{r}}{r_i} \tau_{r,\theta} + (r_m - r_i) \tau_{z,\theta} \right] \end{aligned} \quad (10)$$

节点质量采用平均分配法, 即  $m_i = m/3$ 。这里  $m$  表示单元质量。单元组合后, 节点  $i$  上的总集中力和总质量应等于包含该节点的所有单元的贡献, 即  $\bar{F}_i^i = \sum^n F_i^i, \bar{M}_i = \sum^n m_i, n$  表示包含节点  $i$  的单元数。

积分节点运动方程可以得到节点的速度和位移。例如对于节点  $i$ , 我们有径向加速度公式,

$$\ddot{u}_i^n = \frac{(\bar{F}_i^i)^n}{\bar{M}_i} + r_i^n (\dot{\theta}_i^n)^2 \quad (11)$$

积分上式则可以得到节点  $i$  的径向速度和径向位移,

$$\begin{aligned} u_i^{n+1/2} &= (u_i^{n-1/2} + \dot{u}_i^n \Delta t) (1 - c_b \bar{\Delta t} / r_i^n) \\ u_i^{n+1} &= u_i^n + u_i^{n+1/2} \Delta t \end{aligned} \quad (12)$$

式中  $\bar{\Delta t}$  表示  $n$  时间层次前后两个时间步长的平均值。  $c_b \bar{\Delta t} / r_i^n$  是一种数值技术, 用来消除弹体具有自旋角速度  $\dot{\theta}$  时所引起的径向速度振荡,

同理, 对于轴向运动有

$$\begin{aligned} \ddot{v}_i^n &= (\bar{F}_z^i)^n / \bar{M}_i \\ \dot{v}_i^{n+1/2} &= \dot{v}_i^{n-1/2} + \ddot{v}_i^n \bar{\Delta t} \\ v_i^{n+1} &= v_i^n + \dot{v}_i^{n+1/2} \Delta t \end{aligned} \quad (13)$$

对于周向运动, 应该考虑节点集中质量的角动量  $H$  的影响,

$$H_i^{n+1/2} = H_i^{n-1/2} + r_i^n (\bar{F}_i^n) \Delta t \quad (14)$$

将关系式  $H_i = \dot{\theta}_i r_i^2 \bar{M}_i$  代入上式, 得到

$$\dot{\theta}_i^{n+1/2} = \dot{\theta}_i^{n-1/2} \left( \frac{r_i^n}{r_i^{n+1}} \right)^2 + \frac{r_i^n \Delta t}{(r_i^{n+1})^2} \frac{(\bar{F}_i^n)^n}{\bar{M}_i} \quad (15)$$

可见即使  $\bar{F}_i = 0$ , 角速度仍有可能发生变化。

由 (11) ~ (15) 式可以看到, 显式有限元方法的时间积分是很方便的, 在已知节点集中质量和集中力后, 我们立即可以求出节点速度与位移。籍 (1) ~ (3) 可得单元位移场和应变场。再由流体弹塑性本构关系式 (5) ~ (7) 不难求出压力  $p$  和应力偏量  $s_{ij}$ 。最后籍 (15) 式得到新时间层次上的节点力, 从而完成一个时间循环的积分过程。

时间步长  $\Delta t$  由 Courant 稳定性条件给出,

$$\Delta t = c_i \left[ \frac{h_{\min}}{\sqrt{g^2 + \sqrt{g^2 + c_0^2}}} \right] \quad (16)$$

式中  $c_0$  表示声速,  $g$  是与粘性力  $Q$  有关的参数,  $g^2 = c_0^2 Q / \rho$ 。这里  $c_0$  见 (14) 式;  $h_{\min}$  表示三角形单元三条边上的最小高度;  $c_i$  为小于 1 的稳定性系数。

为了描述高速撞击中开坑侵入冲塞等物理现象, 我们必须引入能模拟不同物质界面相对运动的滑移面。其基本思想是, 在物质界面上预先设定称之谓主节点的主滑移面和从节点的从滑移面, 并假定从节点只能沿主滑移面滑动。对于每一时间步长, 由运动方程分别求出主节点和从节点新的几何位置。倘若  $n+1$  时刻从节点“进入”主节点所在的介质, 如图 2 所示从节点由  $S$  进入  $S'$ 。则适当调整相关的主节点与从节点的速度, 使从节点沿与主滑移面相垂直的方向回到主滑移面上 (如图 2 中的  $C$  点)。调整的原则是动量和动量矩守恒以及  $C$  点的速度应当等于主节点  $i, j$  速度的线性插值, 用公式表示则有

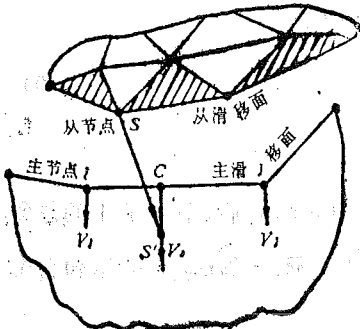


图 2 滑移线示意图

$$\begin{aligned} \bar{M}_i V_i^{n+1} + \bar{M}_j V_j^{n+1} + \bar{M}_s V_s^{n+1} &= \bar{M}_i V_i^n + \bar{M}_j V_j^n + \bar{M}_s V_s^n \\ \bar{M}_i V_i^{n+1} r_i' + \bar{M}_j V_j^{n+1} r_j' + \bar{M}_s V_s^{n+1} r_s' &= \bar{M}_i V_i^n r_i' + \bar{M}_j V_j^n r_j' + \bar{M}_s V_s^n r_s' \end{aligned} \quad (16)$$

$$V_s^{n+1} = V_i^{n+1} + (V_j^{n+1} - V_i^{n+1}) \left( \frac{r_j' - r_i'}{r_j' - r_i'} \right)$$

式中  $V_i^n, V_j^n, V_s^n$  表示改算前的主节点  $i, j$  和从节点  $S$  的法向速度,  $V_i^{n+1}, V_j^{n+1}, V_s^{n+1}$  则是改算后的法向速度。

在下面的数值模拟算例里我们采用了双线性四边形单元, 四边形单元较之三角形单元具有减少存储提高计算效率的优点。但是四边形单元在大畸变问题里会发生因网格翻转而导致的计算中断现象。在有限差分方法里这一困难常用重布网格法来克服, 但是重布网格又有计算量大和计算误差增加等缺陷。本文采用沙漏控制技术, 即在四边形单元的四个节点上引入人工抗沙漏节点力  $f_{i1}$ ,

$$f_{i1} = \frac{1}{2} Q_i \gamma_i \quad (17)$$

式中脚标  $i$  表示坐标轴方向,  $I$  表示单元节点号,  $\gamma_i$  是由节点几何位置决定的量,  $Q_i$  称为人工抗沙漏阻尼力。此外算例中还用到了群组单元划分技术。这些方法的引入使得 EPIC-2 程序效率得到提高, 功能获得扩充。但在基本物理图象的描述上它们与三角形单元仍然是一致的。

### 3 模拟计算和结果分析

#### 3.1 球头弹对均质靶板的高速撞击

弹体为钢质半球头圆柱杆, 长 25.4cm, 半径 0.4cm; 靶板为均质钢板, 厚 2.54cm, 半径 5.08cm; 初始时刻  $t=0$ , 弹体分别以 1000m/s, 1800m/s 正撞击在静止靶板上, 如图 3 所示。弹体和靶板均视为各向同性的流体弹塑性介质。计算中用到的主要材料参数如表 1 所示

表 1 材料主要常数

	$E$ (GPa)	$\nu$	$\rho_0$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\sigma_s$ (GPa)	$\sigma_u$ (GPa)	$k_1$ (GPa)	$k_2$ (GPa)	$k_3$ (GPa)	$\Gamma$
弹 体	207	0.3	7.8	1.43	2.82	162	300	509	1.2
靶 板	207	0.3	7.8	0.97	1.16	162	300	509	1.2

表中  $E$  为弹性模量,  $\nu$  为泊松比,  $\sigma_s$  为屈服应力,  $\sigma_u$  为极限强度。为计算方便, 强度效应 (8) 式中我们取了  $c_1 = c_2 = c_3 = c_5 = 0$ , 而  $c_4 = 1$ 。

模拟计算中我们采用了抗沙漏变形的四边形网格和群组单元划分技术以提高计算效率。整个计算域划分成四个群组单元, 如图 3 所示, 对于弹体头部以及与弹体相接触的靶板区域, 单元划分得较细, 这样可以较好地刻划开坑和侵彻过程中大变形区域的一些物理细节, 其余部分网格就取得大得多。弹体的两个群组单元尺寸分别为  $0.0675 \times 0.0851 \text{cm}^2$  和  $0.135 \times 1.136 \text{cm}^2$ , 靶板为  $0.0508 \times 0.0876 \text{cm}^2$  和  $0.429 \times 0.282 \text{cm}^2$ 。全部单元共 1110 个, 节点 1259 个。此外我们在弹体表面以及靶板小尺寸单元预先设置了主滑移面和从滑移面用来模拟弹头在开坑侵彻过程中与靶板的相对滑移运动。

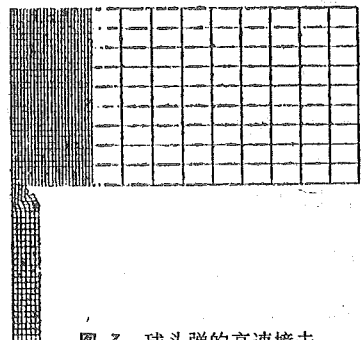


图 3 球头弹的高速撞击

图 4 表示撞击速度  $v = 1000 \text{m/s}, 1800 \text{m/s}$  时不同时刻靶板开坑和弹体侵彻的几何图象。由图可见坑缘和弹头部分的剧烈变形。由于靶板较厚, 在图示的计算时间内, 靶板背面反射稀疏波所引起的运动并不明显。从总体上看上述撞击过程的数值模拟结果与有限差分方法得到的结果基本上一致, 也与实验观察到的现象大体相符。这说明 EPIC-2 程序具有较强的处理大变形问题的能力。通常用有限差分方法计算这类撞击问题时, 往往需要多次重布网格, 从而花费很多 CPU 机时。从这一意义上讲 EPIC 方法具有节省机时和提高计算效率的好处。

另一方面从计算结果可以看到, 本文采用的群组单元划分技术和四边形网格沙漏控制技

术对于处理局部区域发生大变形的物理问题是成功的。我们可以想见，如果用三角形单元进行模拟计算，也不会发生任何计算上的困难，只是在计算机内存占用和机时耗费上有所区别罢了，其总体物理图象应该与这里所给结果相一致。

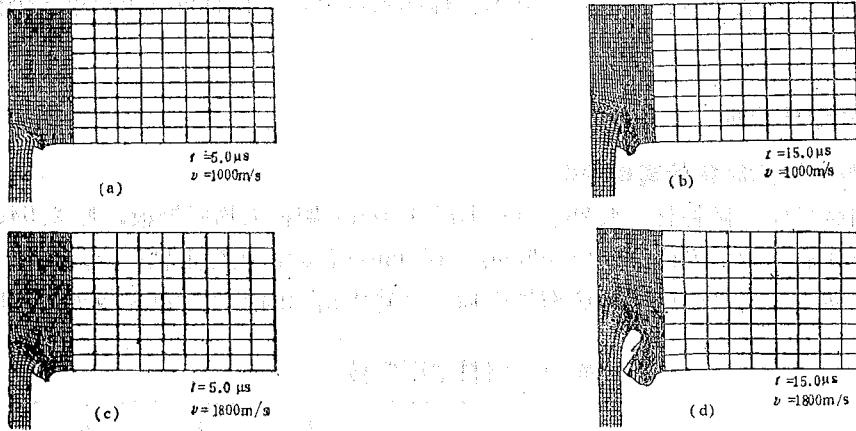


图 4 不同撞击速度下的计算结果

图 5 表示  $t = 10 \mu s$ ,  $v = 1000 m/s$ ,  $p_{min} = 6.92 GPa$  时对称轴上压力  $p$  的分布。由图可见

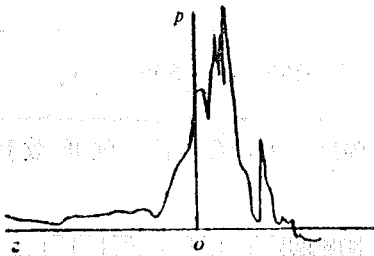


图 5 沿对称轴上的压力分布

压力波形仍有较大的振荡，这一方面与粘性的引入及滑移面处理的细节有关，另一方面也与弹体侧向自由面来的稀疏波的多次作用有关（在  $10 \mu s$  时侧向稀疏波估计反射 5~6 次）。

### 3.2 平头弹对均质靶板的高速撞击

弹体为长 3.0cm, 半径为 0.4cm 的圆柱体, 靶板为厚 1.0cm, 直径 5.6cm 的圆板。弹体分别以 700m/s 和 1200 m/s 的速度撞击静止靶板。弹体和靶板的材料参数见

3.1。本例计算我们取均分四边形单元。弹体表面和靶板上同样设置主滑移面和从滑移面。

由于在侵彻过程中材料在高压作用下将发生塑性破坏，计算中我们采用了等效塑性应变破坏准则<sup>[6]</sup>

$$\bar{\epsilon}_p \geq K \quad (18)$$

式中  $\bar{\epsilon}_p$  表示等效塑性应变，在弹塑性流动问题里由于弹性应变在总应变中所占比重很小，因此我们可以近似地认为

$$\bar{\epsilon}_p^{n+1} = \bar{\epsilon}_p^n + \bar{\epsilon} \Delta t$$

(18) 式中的  $K$  表示临界阈值。在本算例中我们取  $K = 0.15$ 。当单元中的  $\bar{\epsilon}_p$  满足 (24) 式则表示该单元材料因塑性剪切变形而破坏，然后在计算中置等效屈服应力  $\bar{\sigma}$  (见 (8) 式) 为零。

图 6 表示  $t = 5 \mu s, 10 \mu s$  时不同撞击速度下的计算结果，图中标有“+”号的网格表示满足 (18) 式破坏条件的单元，可以看到弹头与靶板相接触的部分由于塑性变形较大而破坏，并且这种破坏的范围随撞击速度的提高而增大。另一方面我们还能看到，靶板背面由于反射稀疏波的作用呈鼓形，并且这种鼓起与撞击速度和计算时间有关，由于程序中还没有引入适当的层裂模型，因此拉伸断裂现象还无法模拟。上述这些基本图象与实验室里靶板的撞击试验结果<sup>[7-8]</sup>基本是吻合的。

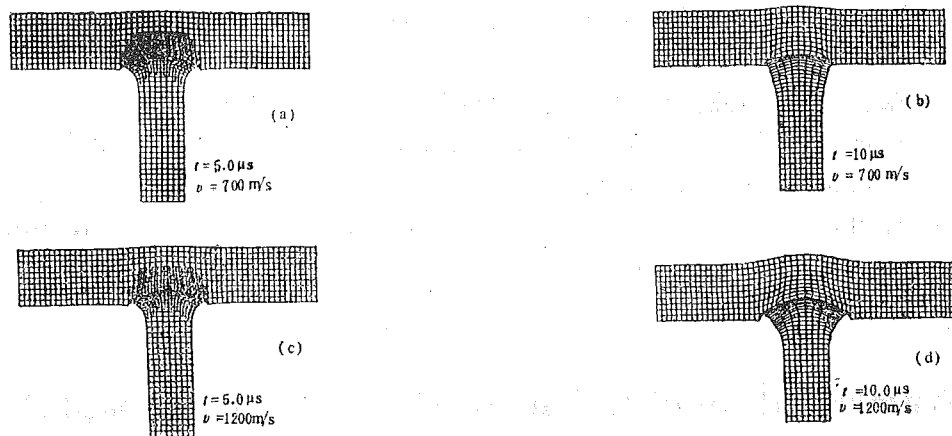


图 6 不同撞击速度下平头弹的计算结果

#### 4 讨论

由以上讨论可知,显式有限元 EPIC方法要比有限差分方法计算更为简便,网格单元划分更加灵活。两个算例的模拟计算结果表示 EPIC-2程序具有很强的处理大变形问题的能力。这往往是弹塑性流动数值模拟中最关心的问题。算例中球头弹与平头弹的高速撞击计算结果,在开坑侵彻等基本物理图象方面与实验结果的物理事实基本吻合,这说明本文的模拟计算是合理的。尽管 3.1 中采用了具有抗沙漏能力的四边形单元和群组单元划分技术,但这些措施只是对原 EPIC-2功能的一种补充与提高。在基本计算逻辑及主要计算公式方面两者是类似的。因此可以认为三角形单元的计算结果应当与算例相似。

当然 EPIC-2程序仍有不少极待改进与完善之处,例如强度效应中硬化因素的引入;本构关系中粘弹性,弹粘塑性等模型的嵌入;层裂与破坏模型的建立和完善等等。我们相信通过对这一程序的不断开发与应用,其功能会更强,适用性会更广。我们期望用它来进行瞬态力学中包括波动问题在内的数值模拟计算。

本文的算例计算是初步的,计算中用到的材料参数也以引用别人结果为准。由于缺乏必要的高速撞击实验结果作比较,因此算例的结果可靠性尚难断言,但它仍有一定的参考价值。我们将这一初步工作提出是希望藉此推进二维数值计算工作的进一步开展。

#### 参 考 文 献

- [1] Johnson G R, EPIC-2, A Computer Program for Elastic-Plastic Impact Computations in 2 Dimensions Plus Spin, Honeywell, Inc. Defense Systems Division, ARBRL-CR-00373 (1978)。
- [2] Flanagan D P and Belytschko T, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17(1981), 676。
- [3] Belytschko T, Yen H J and Mullen R, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 17(1979), 259。

- [4] 王肖钧、胡秀章、李宗芬, 爆炸与冲击, 5 (1985), 32.
- [5] Wilkins M L, Method in Computational Physics, Academic Press, New York, 1979, p211.
- [6] 张志杰、贝新源、周连胜, 国防科技大学学报, 4 (1984), 12.
- [7] Jonas G H and Zukas J A, *International Journal of Engineering Science*, 16(1978), 879.
- [8] Wilkins M L, *International Journal of Engineering Science*, 16(1978), 793.

## Numerical Simulation of High Velocity Impact by EPIC-2 Code

Wang Xiaojun Zhang Xiaowu Hu Xiuzhang Li Yongchi

(*Department of Modern Mechanics*)

### Abstract

The basic ideas and major functions of two dimensional dynamic program EPIC-2 are outlined in this paper. Numerical simulations are carried out for problems of high velocity rod with a hemispherical cap or a flat cap impacting at a plate target (impact velocity 700m/s-1800m/s). The results show that the EPIC-2 Code has strong ability in dealing with large deformations, and hence it is one of the effective computational methods in the field of the high velocity impact.

**Key words:** numerical simulation, hydrodynamic elastic-plastic, finite element, high velocity impact.

# 冲击波加载下剪力对固体相变压力的影响

唐志平

(近代力学系)

## 摘 要

讨论了 Fe、Bi、Ge、Si、CdS 以及 InSb 等几种材料在击波加载下剪应力对相变起始压力的影响。结果表明当剪力水平较低时 ( $\tau_T/\bar{p}_T < 5\%$ ), 可忽略剪力的影响。在剪力水平较高时 ( $\tau_T/\bar{p}_T \approx 15 \sim 30\%$ ), Ge, CdS 无明显影响, Si, InSb 则显示出这种影响, 这表明剪力对相变起始压力的影响与相变机理有关。

**关键词:** 剪力影响, 相变, 冲击波加载。

## 1 引言

自从 1956 年 Bancroft 等人<sup>[1]</sup>首次成功地用击波方法发现了 Fe 在 13GPa 压力下的相变以来, 击波加载方法就成为研究凝聚态物质相变的一种重要手段并获得广泛应用<sup>[2]</sup>。不过对于初始相为固态的材料来说, 冲击加载(通常为平面波)存在剪应力, 这与一般的静高压情况不同。由于剪力的存在, 使动、静态相变参数的比较, 以及某些热力学关系的使用带来困难。因此通常为简化起见, 在一般相变讨论中均作忽略剪应力的假定。但是这一假定是否合理, 剪应力对相变机理, 特别是对相变起始压力有无贡献, 无论在理论上还是实际上都有重要意义。Jones 和 Graham<sup>[3]</sup>早在 1971 年在总结文献的基础上对这一问题做过研究。发现 CdS 和 InSb 晶体也许存在剪应力的影响。Duvall 和 Graham<sup>[2, 4]</sup>也曾做过一些分析和讨论, 并指出应对 CdS 一类晶体矿物材料做进一步系统研究。最近我们对 CdS 晶体在击波加载下的相变性能作了较系统的研究<sup>[5-8]</sup>, 得到了剪应力对 CdS 相变影响的一些有用信息。本文目的是在前人及我们自己工作的基础上, 探讨剪应力在冲击加载条件下对固体相变起始压力的影响。

## 2 相变点的应力分析

由于固体材料具有一定的强度, 当其受击波加载到达相变点时, 通常有两种情况: 一种是相变应力  $\sigma_T$  大于屈服强度  $\sigma_H$ , 即  $\sigma_T > \sigma_H$ , 下标 T 和 H 分别表示相变参数和 Hugoniot 弹性限 HEL 参数; 一种是屈服强度高于或等于相变应力:  $\sigma_T \leq \sigma_H$ , 前一种情况, 由于材料的

屈服，一定程度上削弱了剪应力幅值的增高；后一种情况则可能在相变起始点引起较高的剪力水平。到达相变起始应力之后，由于第Ⅱ相材料性质的不确定性，两相共存区非均匀性，热力学的非平衡状态等，导致难以确定相变点以后的剪应力变化规律。不过我们所关心的是到达相变点的原始相材料（Ⅰ相，固态）中的剪应力强度，为此有必要分析Ⅰ相材料中的应力关系。

### 2.1 $\sigma_T \leq \sigma_H$

这种情况下，材料到达相变点以前处于弹性状态，为了得到相变点的平均压力  $\bar{p}_T$  与剪力  $\tau$ ，我们讨论一维应变非线性弹性关系。由连续介质力学，Green 应变定义为

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial x_m}{\partial a_j} \frac{\partial x_m}{\partial a_i} - \delta_{ij} \right) \quad (1)$$

式中  $x$ ， $a$  分别为 Euler 和 Lagrange 坐标。将比内能  $U(\eta_{ij}, S)$  作等熵展开并定义热力学应力或第二类 Piola-Kirchhoff 应力  $t_{ij}$  为

$$t_{ij} = \rho_0 \left[ \frac{\partial U}{\partial \eta_{ij}} \right]_s \quad (2)$$

其中  $\rho_0$  为初始密度。略去三阶以上小量可得

$$t_{ij} = C_{ijkl} \eta_{kl} + \frac{1}{2} C_{ijklmn} \eta_{kl} \eta_{mn} \quad (3)$$

式中  $C_{ijkl}$  和  $C_{ijklmn}$  分别为二、三阶等熵弹性常数。第二类 Piola-Kirchhoff 应力定义在参考构形中，一维时与工程应力相联系。如要揭示物理上的真实应力状况，可采用 Cauchy 应力（真应力） $\sigma_{ij}$ ，它与  $t_{ij}$  间的变换关系为

$$\sigma_{km} = \frac{1}{J} \frac{\partial x_k}{\partial a_j} \frac{\partial x_m}{\partial a_i} t_{ij} \quad (4)$$

其中  $J$  为 Jacobian 行列式，

$$J = \left| \frac{\partial x_i}{\partial a_j} \right| = \frac{\rho_0}{\rho} \quad (5)$$

对于沿  $x_1, a_1$  方向的一维应变压缩，仅  $\eta_{11} \neq 0$ ，故（3）式可简化为

$$t_{11} = C_{1111} \eta_{11} + \frac{1}{2} C_{111111} \eta_{11}^2 \quad (6)$$

一维时 Green 应变  $\eta_{11}$  与工程应变  $\epsilon$  ( $\epsilon = 1 - \frac{\rho_0}{\rho}$  以压为正) 之关系为

$$\eta_{11} = -\epsilon + \frac{1}{2} \epsilon^2 = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\rho_0}{\rho} \right)^2 - 1 \right] = \frac{1}{2} (\beta^2 - 1) \quad (7)$$

式中  $\beta = V/V_0 = 1 - \epsilon$  为相对比容。由于应力和应变张量的对称性，（6）式可缩写为

$$t_a = C_{1a} \eta_1 + \frac{1}{2} C_{111a} \eta_1^2 \quad (8)$$

其中  $a = 1, \dots, 6$ 。利用（8）（4）（5）式，可得主应力

$$\sigma_1 = \beta \left[ C_{11} \eta_1 + \frac{1}{2} C_{1111} \eta_1^2 \right]$$



$$\sigma_2 = \frac{1}{\beta} \left[ C_{12} \eta_1 + \frac{1}{2} C_{112} \eta_1^2 \right] \quad (9)$$

$$\sigma_3 = \frac{1}{\beta} \left[ C_{13} \eta_1 + \frac{1}{2} C_{113} \eta_1^2 \right]$$

小应变时有

$$t_\alpha \approx \sigma_\alpha, \quad \alpha = 1 \dots 6 \quad (10)$$

平均压力  $\bar{p}$  和剪应力  $\tau$  表为

$$\bar{p} = -\frac{1}{3} (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (11)$$

$$\tau = \frac{1}{2} |\sigma_1 - \sigma_3| \quad (12)$$

这里假设  $\sigma_3$  最小。(9) 式代入 (11) 式得

$$\begin{aligned} \bar{p} = \frac{1}{3} \left\{ \left[ \beta C_{11} + \frac{1}{\beta} (C_{12} + C_{13}) \right] (1 - \beta^2) + \frac{1}{2} [\beta C_{111} \right. \\ \left. + \frac{1}{\beta} (C_{112} + C_{113})] (1 - \beta^2) (\beta^2 - 1) \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

对线弹性各向同性材料有

$$\bar{p} = \frac{1}{3} \left\{ \beta C_{11} + \frac{2}{\beta} C_{12} \right\} (1 - \beta^2) \quad (14)$$

小应变时

$$\bar{p} = \frac{2}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \epsilon \quad (15)$$

弹性常数与 Lamé 系数之关系为

$$\lambda = C_{12}, \quad 2\mu = C_{11} - C_{12} \quad (16)$$

可得

$$\bar{p} = K \epsilon = -\frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \sigma_1 \quad (17)$$

$$\tau = -\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \sigma_1 = G \epsilon \quad (18)$$

其中  $K$ 、 $E$ 、 $G$  和  $\nu$  分别为体模、杨氏模量、剪切模量和泊松比，且存在关系

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (19)$$

当已知相变应力  $\sigma_T$  或应变  $\epsilon_1$ ，就可利用上面的公式求出相变点相应的平均压力  $\bar{p}_T$  和剪力  $\tau_T$ 。需要注意的是，晶体等各向异性材料，本身具有一定的对称性，本节所用的  $x_i$ 、 $\sigma_i$  直角坐标系一般称为物理坐标系，它们与晶体对称轴之关系参见文献 [21] 附录 II。

## 2.2 $\sigma_T > \sigma_H$

这时材料先进入屈服状态，由前一小节讨论的 I 相弹性关系，我们可以计算出 Hugoniot 弹性限处的平均压力  $\bar{p}_H$  以及剪力  $\tau_H$ 。但是材料进入塑性后，呈现各种不同的性状，如各向异

性的变化, 应力松弛, 应变硬化, 热软化等, 使得进入塑性后剪应力的变化情况不清楚, 这就妨碍了对所测轴向应力作剪力修正。比较理想的方法是在整个实验中设法测量第二主应力, 甚至第三主应力, 这样可以全面跟踪了解材料进入塑性, 相变区直至高压相的力学性能变化, 这具有重要意义 (更好的是加上温度跟踪)。Aidun 和 Gupta<sup>[9, 10]</sup> 最近用电磁法测横波波速, 对大理石相变进行了跟踪, 是这方面的一次有意义的尝试。在目前未有足够信息的情况下, 我们一般仅能作所谓理想塑性的假定, 即认为剪力在屈服点达最大值, 以后保持不变。由此得到相变点的剪力修正公式。对各向异性材料有

$$\tau_T = \tau_H = \frac{1}{2} |\sigma_{1H} - \sigma_{3H}| \quad (20)$$

$$\bar{p}_T = \bar{p}_H + |\sigma_{1T} - \sigma_{1H}| \quad (21)$$

式中  $\bar{p}_H$  由  $\beta_H$  表入 (13) 式求出。对各向同性线弹性理想塑性材料小应变时有

$$\begin{aligned} \bar{p}_T &= - \left\{ \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \sigma_{1H} + (\sigma_{1T} - \sigma_{1H}) \right\} = - \left\{ \sigma_{1T} - \frac{2}{3} \frac{(1-2\nu)}{(1-\nu)} \sigma_{1H} \right\} \\ &= K \epsilon_H - (\sigma_{1T} - \sigma_{1H}) \end{aligned} \quad (22)$$

$$\tau_T = \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} |\sigma_{1H}| \quad (23)$$

### 3 动高压与静高压相变压力的比较和讨论

Duvall 等人<sup>[2]</sup> 在综述击波引起固体中的相变一文中指出, 迄今为止对于大多数材料而言宏观剪力对于相变起始压力并无明显影响, 不过可能有例外。Jones 等人<sup>[3]</sup> 比较了 Bi、Fe、Ge、CdS 和 InSb 等几种材料, 发现后两种材料经 HEL 修正后的相变压力比静高压明显偏低, 并认为是由于剪力的影响。本文增添了一种材料 Si, 并尽可能引用一些较新资料进行讨论。这几种材料的主要比较结果列于表 1。

动高压下 Fe 和 Bi 的相变发现最早, 研究也较透彻, 这两种材料的动高压经 HEL 修正后的相变起始压力在实验误差范围内与静高压值吻合很好, 不过这两种情况剪力水平很低, 剪力  $\tau_T \leq 0.5 \text{ GPa}$ , 与  $\bar{p}_T$  的比值  $\tau_T/\bar{p}_T < 5\%$ 。这说明当剪力水平很低的情况, 剪力的作用可以忽略。

Ge 和 Si 同属半导体材料, 实验中的剪力水平相当 ( $\tau_T \approx 2 \pm 0.5 \text{ GPa}$ ,  $\tau_T/\bar{p}_T \approx 18 \pm 5\%$ ), 可是 Ge 无明显的剪力影响, Si 则有剪力的影响。Si 对剪力的敏感性在静高压实验中就可以观察到。Minomura 和 Drickamer<sup>[11]</sup> 曾报道在静高压无剪力存在的情况下, 相变压力达  $20 \text{ GPa}$ , 当有高剪应力 (或单轴) 状态时, 相变压力降为  $13.5 \sim 15 \text{ GPa}$ 。其他研究者如 Jamieson<sup>[12]</sup> 也证实了这一点。

CdS 和 InSb 与前面几种材料不同, 它们在到达相变点前无屈服现象, 因此可以达到相当高的剪力水平 ( $\tau_T/\bar{p}_T \approx 30\%$ ), 不过剪力幅值并不很高 ( $\tau_T \leq 0.72 \text{ GPa}$ )。这两种材料以往被认为是可以说明剪力影响的两个例子。不过最近的研究<sup>[5-9]</sup> 表明对 c 轴 CdS 而言, 剪力对相变起始压力并无明显影响。究其原因在于, 文献 [3] 中作者采用 Samara 等人<sup>[13]</sup> 静高压测得的  $K$  值 ( $K = 54.64 \text{ GPa}$ ) 乘以 Kennedy 等人<sup>[14]</sup> 击波实验算出的  $\epsilon_T = 0.033$ , 得到的  $\bar{p}_T = 1.8 \text{ GPa}$ , 显著小于静高压  $p_T = 2.3 \text{ GPa}$ 。不过文献 [13] 的  $K$  值与其他文献差距

表 1 几种材料的动、静态相变压力的比较

材料	相变类型	静 高 压			动 高 压						
		$P_T$ (GPa)	$\eta_T^*$ %	$\tau$ 对 $\sigma_T$ 敏感性 (GPa)	$\bar{p}_T$ (GPa)	$\eta_T$ %	$\sigma_H$ (GPa)	$\tau_T$ (GPa)	$\tau_T/\bar{p}_T$ %	对 $\tau$ 敏感性	
Fe (多晶)	$\alpha \rightarrow \epsilon$	13.3 <sup>a</sup>	6.6 <sup>a</sup>	无	12.9 <sup>d</sup>	12.5 <sup>d</sup>	6.4 <sup>b</sup>	0.7-1.9 <sup>b</sup>	0.2-0.54	1.6-4.3	无
Bi c 轴	I $\rightarrow$ II	2.55 <sup>c</sup>	6.4 <sup>c</sup>	无	2.56 <sup>i</sup>	2.55 <sup>d</sup>	6.1 <sup>d</sup>	0.3	0.1	3	无
Ge [111]	12.0-12.5 <sup>e</sup>	12.5 <sup>f</sup>	12.5 <sup>f</sup>	无	13.6-14.2 <sup>g</sup>	11.4-12.2 <sup>g</sup>	12-13	4.4	1.58	13.4	无
Si [100]	金刚石结 构 $\rightarrow$ 白锡结构	20 16 <sup>f</sup>	9.2	无 有	14.0 <sup>h</sup>	10.31	10.3 <sup>h</sup>	9.2	2.41	23.4	有
CdS c 轴	纤锌矿结构 $\rightarrow$ 岩 盐结构	2.3 <sup>i</sup>	3.47	无	3.25 <sup>j</sup>	2.29 <sup>j</sup>	3.45 <sup>j</sup>	$\geq 3.25$	0.72	31.5	无
In Sb [100]	闪锌矿结 构 $\rightarrow$ 斜方晶系	2.3 <sup>k</sup>	4.6-5.3 <sup>k</sup>	有	2.0 <sup>l</sup>	1.3	3.0	$> 2.0$			有
[111]					1.7 <sup>l</sup>	0.9	2.1	$> 1.7$			

数据来源: a-[22], b-[23], c-[24,25], d-[26], e-[11], f-[12], g-[27], h-[28],  
i-[13], j-[8], k-[20], l-[19].

\* 相变点 Green 应变值

较大, 它们的比较见表 2. 由表 2 可见后三篇文献的结果较接近. 其中 Fuller<sup>[17]</sup>用超声波

表 2 c 轴 CdS I 相静高压数据比较

作者	方法	弹性常数*	$\epsilon_r = 0.0345$ 时
		(GPa)	平均压力 $\bar{p}_T$ (GPa)
Samara 等 <sup>[13]</sup>	电感法	$K = 54.64$	1.885
Kabalkina 等 <sup>[15]</sup>	X 衍射	$K = 65.36$	2.255
Corll <sup>[16]</sup>	超声	$C_{11} = 93.61, C_{13} = 46.14$	2.176
Fuller <sup>[17]</sup>	超声	$C_{11} = 93.62, C_{13} = 46.14$ $C_{111} = -327, C_{113} = -306$	2.286

\*K 为体模, c 为弹性系数, 下标 1 表示 c 轴方向, c 轴 CdS 是横观各向同性材料, 有  $C_{13} = C_{12}, C_{113} = C_{112}$ .

法测出了 CdS 单晶的二阶三阶等熵弹性常数, 利用这些常数可求出一维应变时 I 相的压缩

曲线. 图 1 所示为我们所做的 c 轴 CdS 击波实验与静态曲线的比较, 图中 T 为实验决定的相变点,  $\sigma_T = 3.25$  GPa, 由 (11)、(12) 式求得  $\bar{p}_T = 2.29$  GPa,  $\tau_T = 0.72$  GPa, 与静高压  $p_T = 2.3$  GPa 很吻合. 这时

$$\tau_T / \bar{p}_T \approx 31.5\%$$

图 1 中 AN 为 I 相弹性线, TC 为 I 相塑性线 (假定 T 为屈服点), AB 为 I 相平均压力线, 以上均利用 Fuller 弹性常数求出. AE 为文献 [13] 的  $p-V/V_0$  曲线, 可见在 I 相段与 Fuller 曲线相差较大. 口点是我们击波实验点, 在 I 相部分与 Fuller 曲线吻合较好.  $\Delta$  点是假定 T 同时为屈服点并作理想塑性假定而得到的平均压力实验点, 它们与 [13] 静高压曲线差距较大. 但是如果把 [13] 的曲线的应变乘以 0.814, 使得其 I 相部分与 Fuller 吻合 (点虚线 AGF),

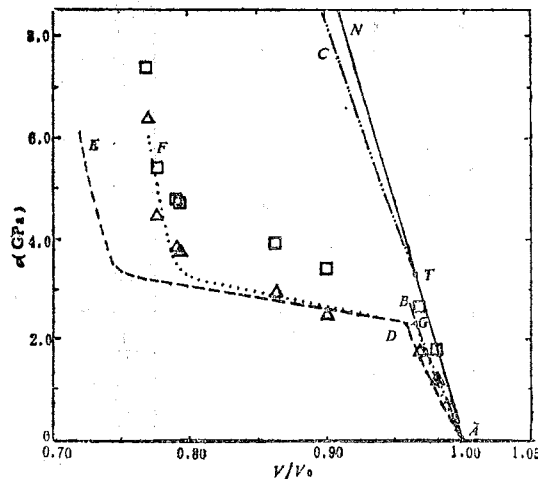


图 1 C 轴 CdS 单晶动静高压实验数据的比较

□  $p-V/V_0$  实验点;  $\Delta$   $\bar{p}-V/V_0$  实验点, ATN I 相弹性曲线 (Fuller), TC I 相塑性曲线, AB I 相平均压力线, ADE 静高压实验曲线 (Samara 等), AGF 修正的静高压曲线,

发现其 II 相部分与击波实验点也相接近了. 这说明 Samara 等人的  $\Delta V/V_0$  部分与他人相差较大 (压力是一致的), 所以 K 值偏小. 其原因不详, 也许与测量方法有关. 从以上讨论可以看出, 对 c 轴 CdS 而言剪力对相变起始压力无明显作用, 不过由于材料进入相变的同时, 可能进入塑性, 说明高剪力水平对微观缺陷的运动有一定耦合作用. 关于  $\alpha$  轴 CdS 的情况, 正在研究之中<sup>[18]</sup>.

InSb 的动高压数据很不完整, 目前可供利用的仅 Kennedy 等人<sup>[19]</sup>的一个未发表的波形. 由表 1 知, 其  $\bar{p}_T$  比静高压有较大幅度的降低, 应当引起剪力对相变压力的影响考虑. 从静高压报道来看<sup>[20]</sup>, 相变机制可能涉及无扩散剪切生长过程, 并观察到有剪力存在时相

变率增高,说明这种材料的相变机制也许与剪切有关。

#### 4 结论

本文给出了有偏应力存在时相变压力的修正方法,并对几种典型材料的动、静高压相变起始压力进行了比较和讨论。可以看出,对于剪力水平很低的情况,如 Fe, Bi,  $\tau_T/\bar{p}_T$  小于 5%,未曾观察到剪应力对相变起始压力的影响,这说明在剪力水平很低的情况下,可以忽略剪力的作用。对于 Ge 和 c 轴 CdS 情况,剪力水平较高 ( $\tau_T/\bar{p}_T \approx 13-30\%$ ),仍未观察到明显的剪力影响,但是 Si 和 InSb,尽管剪力水平与 Ge 和 CdS 相当,动载下都表现出剪力的作用,反观其静高压实验,也显示出对剪力的敏感性,因此可以看出,高剪力水平不一定能影响相变起始压力,剪力对相变压力有无影响主要应由相变机理来决定。对于某些涉及剪应力机制的相变,剪力对相变压力可能会有影响。至于哪些材料,以及从微观上对这种机理做出解释,有待于深入研究。目前对 Si 和 InSb 的研究就很不够。由以上分析可推断,对于大多数剪力水平较低或相变机制与剪力关系不大的材料,均可作忽略剪力影响的假定。对于少数相变机制与剪力有关的材料,则不能轻易忽略,当然这时比较动、静态实验数据变得复杂。反过来它也可成为判断相变机理的一种方法。

由 CdS 实验结果的分析可推断在高剪力水平下材料发生相变的同时可能产生屈服,说明相变和塑性两者的耦合作用,也说明剪力虽然对相变压力无明显影响,但相变时点阵元素的移动会触发微观缺陷(如位错)的运动,反过来由于高剪力水平的存在会加速点阵元素的移动。这种耦合现象有待进一步研究。

前文提及为了探明材料屈服或相变后的性质,如剪力变化,各向异性变化等,跟踪测量第二(甚至第三)主应力是有必要的。

本文未虑及温度修正,对一般材料而言,这种修正是很小的,但是对于有些温度敏感材料,则应当考虑。

#### 参 考 文 献

- [1] Bancroft D, Peterson E L and Minshall S J, *J. Appl. Phys.*, **27** (1956), 291.
- [2] Duvall G E and Graham R A, *Rev. Modern Phys.*, **49** (1977), 523.
- [3] Jones O E and Graham R A, in "Accurate Characterization of the High Pressure Environment" (E.C. Lloyd ed.), National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1971.
- [4] Duvall G E, in "Propagation of Shock Wave in Solids", AMD, Vol. 17 (E. Varley, ed.), ASME, New York, 1976, p97.
- [5] Tang Z P and Gupta Y M, in "Shock Waves in Condensed Matter 1987" (S. C. Schmidt and N. C. Holmes eds.), North-Holland, Amsterdam, 1988, p305.
- [6] Tang Z P and Gupta Y M, *J. Appl. Phys.*, **64** (1988), 1827.
- [7] 唐志平, Gupta Y M, 高压物理学报, **3** (1989), 290,

- [ 8 ] 唐志平, Gupta Y M, 中国科学技术大学学报, **20**(1990), No.3.
- [ 9 ] Aidun J B and Gupta Y M, *J. Appl. Phys.*, **65** (1989), 1898.
- [10] Aidun J B and Gupta Y M, *Geophys. Res. Lett.*, **16** (1989), 191.
- [11] Minomura S and Drickamer H G, *J. Phys. Chem. Solids*, **23** (1962), 451.
- [12] Jamieson J C, *Science*, **139** (1963), 762.
- [13] Samara G A and Giardini A A, *Phys. Rev.*, **140** (1A), (1965), 388.
- [14] Kennedy J D and Benedick W B, *J. Phys. Chem. Solids*, **27** (1966), 125.
- [15] Kabalkina S S and Troiskaya Z V, *Soviet Phys. Dok.*, **8** (1964), 800.
- [16] Corll J A, *Phys. Rev.*, **157** (1967), 623.
- [17] Fuller E R, The Study of Covalent Bonding by Means of Elastic Constants, Ph.D. Thesis, Univ. of Illinois, 1973, (unpublished).
- [18] Sharma S M and Gupta Y M, 私人通讯.
- [19] Kennedy J D and Benedick W B, *Bull. Am. Phys. Soc.*, **10** (1965), 1112.
- [20] Hanneman R E, Banus M D and Gatos H C, *J. Phys. Chem. Solids*, **25** (1964), 293.
- [21] 张克从, 近代晶体基础 (下册), 科学出版社, 北京, 1987, p287.
- [22] Giles P M, Longenbach M H and Marder A R, *J. Appl. Phys.*, **42** (1971), 4290.
- [23] Loree T R, Fowler C M, Zukas E G and Minshall F S, *J. Appl. Phys.*, **37** (1966), 1918.
- [24] Heydemann P L M, *J. Appl. Phys.*, **38** (1967), 2640, 3424.
- [25] Giardini A A and Samara G A, *J. Phys. Chem. Solids*, **26**(1965), 1523.
- [26] Larson D B, *J. Appl. Phys.* **38** (1967), 1541.
- [27] Graham G A, Jones O E and Holland J R, *J. Phys. Chem. Solids*, **27** (1966), 1519.
- [28] Gust W H and Royce E B, *J. Appl. Phys.*, **42** (1971), 1897.

# Effects of Shear Stress on the Phase Transition Pressures of Solids Under Shock Loading

Tang Zhiping

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

In this paper, the effects of shear stress on the initial phase transition pressures of several materials such as Fe, Bi, Ge, Si, CdS and InSb, are discussed. The results show that the shear stress can be ignored when the shear level is low ( $\tau_T/p_T < 5\%$ ). When shear level increases to a high one ( $\tau_T/p_T \sim 15-30\%$ ), some materials (Si, InSb) display such shear effects, but others (Ge, CdS) do not. It means that the shear effects on the initial pressures may be related to the mechanism of phase transition.

**Key words:** shear stress effect, phase transition, shock loading.

# 超高速撞击的数值模拟

胡秀章 王肖钧 李永池

(近代力学系)

## 摘 要

采用二维欧拉型 DIMP 有限差分程序对速度为 5000m/s 的球形弹丸撞击半无限靶体现象进行了数值模拟计算, 给出了撞击早期阶段 (25  $\mu$ s 内) 侵彻成坑的基本物理图象以及沿对称轴上的压力和速度波形。计算结果基本合理, 对于超高速撞击现象的研究具有一定的参考价值, 同时也说明 DIMP 程序是数值模拟超高速撞击现象的有效工具之一。

**关键词:** 数值模拟, 高速撞击, 流体弹塑性动力学。

## 1 引言

七十年代以来, 国外在大型二维、三维流体弹塑性动力学计算程序的研究开发方面进行了大量的工作, 逐步建立起一系列用于瞬态动力学问题的通用程序。例如美国 NASA 的 TOOOY 系列编码程序<sup>[1]</sup>, BRLA 的 BRLSC 程序<sup>[2]</sup>、HELP 程序<sup>[3]</sup>以及有限元 EPIC 程序<sup>[4]</sup>等。

本文采用的 DIMP 程序 (Developed Impact Program) 是我们结合高速撞击问题的特点, 修正并完善了原 HELP 程序中的一些明显错误和不足之处后建立起来的。程序的主要特点是保留了原方法易于处理大变形的能力和引入材料示踪粒子描述物质界面。我们又改进和统一了物质运输的计算, 改进并简化了能量检验的计算, 使程序逻辑更加清晰, 结构更加紧凑。增加了撞击接触面的合理闭合的处理, 通过质量加权与反加权, 非直线自由面斜角质量比加权等方法, 对自由面计算作了改进, 减少了数值噪音, 提高了计算精度, 物理图象更加合理。成为功能较强的高速撞击计算专用程序。

文中以 5000m/s 撞击速度为例讨论了 DIMP 程序的计算结果。对于更高速度的撞击问题, 程序同样能够进行模拟。

## 2 DIMP 方法简介

在空间坐标里, 二维不定常弹塑性流动的基本方程是



$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{Du_i}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{DE_r}{Dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial (\sigma_{ij} u_j)}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

式中的  $t$  是时间,  $x_i$  是欧拉坐标, 在轴对称问题中是  $R$  和  $Z$ 。  $D/Dt$  表示随体微商,  $D/Dt = \partial/\partial t + u_i (\partial/\partial x_i)$ ,  $\rho$  为密度,  $u_i$  为速度分量,  $\sigma_{ij}$  是应力张量。  $E_r$  表示单位质量的总能量, 即内能和动能之和,

$$E_r = e + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (4)$$

式中  $e$  为比内能。 应力张量  $\sigma_{ij}$  被表示成

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \quad (5)$$

这里  $p$  为静水压,  $S_{ij}$  为偏应力张量。

材料的本构关系取成通常爆炸力学领域中常用的流体弹塑性模型, 即压力和体积变形之间满足流体型的状态方程

$$p = p(\rho, e) \quad (6)$$

应力偏量和形状畸变之间则由弹塑性关系相联系, 这包括弹性畸变律, 塑性屈服准则以及塑性应变的流动规律。 弹性畸变律为

$$S_{ij} = 2Ge_{ij} - S_{ik}\omega_{ki} - S_{jk}\omega_{ki} \quad (7)$$

式中  $G$  为弹性剪切模量,  $e_{ij}$  为速度应变率偏量, 它和速度应变率张量  $\dot{\epsilon}_{ij}$  之间有如下关系

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij} + \dot{\theta}\delta_{ij} \quad (8)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (10)$$

$\omega_{ki}$  是旋转率张量

$$\omega_{ki} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (11)$$

塑性屈服准则取 Von Mises 屈服准则

$$\sqrt{J_2} = K \quad (12)$$

$J_2$  为应力偏量第二不变量,  $K$  为剪切条件下的塑性流动应力。 在高速撞击中  $K$  常常被表示成静水压  $p$  (或相应的压缩比  $\mu = \rho/\rho_0 - 1$ ) 的函数

$$K = (k_0 + k_1\mu + k_2\mu^2) (1 - e/E_m) \quad (13)$$

式中  $k_0, k_1, k_2$  为材料常数,  $E_m$  为材料常数相当于熔化能。 (13) 式右边第二项表示了温度对屈服的影响, 顺便指出, 静水压对屈服强度的影响, 这种影响对岩石和高压下的金属都是

重要的。

塑性应变的流动规律采用塑性理论中常用的 Prandtl-Reuss 关系

$$d\epsilon_{ij}^p = d\lambda \left( \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \right) \quad (14)$$

但可以证明在一级近似下<sup>[9]</sup>，理想弹塑性体的弹塑性应力应变关系可以用统一的格式处理，即由弹性关系求出应力偏量，再由屈服条件对其判别修正，统一表示为

$$S_{ij} = \begin{cases} S_{ij} & \text{如果 } S_{ij} S_{ij} < 2K^2 \text{ (弹性)} \\ 2KS_{ij} / (S_{im} S_{im})^{1/2} & \text{如果 } S_{ij} S_{ij} \geq 2K^2 \text{ (塑性)} \end{cases} \quad (15)$$

将随体导数  $D/Dt = \partial/\partial t + u_i \partial/\partial x_i$  用于基本方程，并对特定体积  $\bar{V}$  积分，得到积分型的守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\bar{V}} \rho d\bar{V} = - \int_s \rho u_i n_i dS \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\bar{V}} \rho u_i d\bar{V} = \int_s \sigma_{ij} \eta_j dS - \int_s \rho u_i u_j \eta_j dS \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\bar{V}} \rho E_r d\bar{V} = \int_s \sigma_{ij} u_j \eta_i dS - \int_s \rho u_i E_r \eta_i dS \quad (18)$$

式中的  $\eta_i$  表示的相应积分面元上的法向量。数值计算正是从积分型守恒方程出发进行离散化差分近似。本计算是在欧拉空间采用分裂算子法进行离散化而作出的，显式差分格式，保证具有一级计算精度。

计算中取径向坐标为  $R$ ，轴向坐标为  $Y$ ，计算域划分为欧拉空间的正交网格，允许空间不等步长，但相邻两格空间步长之比不超过 1.1，在本计算中采用的是等步长空间网格。所有物理量均定义在网格中心点上。时间步长  $\Delta t$  满足 Courant 稳定性条件，

$$\Delta t = B * \left\{ \frac{(\Delta Y, \Delta R)_{\min}}{(u_i + c_i)} \right\}_{\min} \quad (19)$$

式中  $B$  为稳定性系数。  $\Delta Y$ ，  $\Delta R$  分别为轴向和径向网格宽度，  $c_i$  为欧拉当地声速。

$$c_i = c_0 + \bar{b} \sqrt{p_i} \quad (20)$$

其中  $c_0$  为弹性声速，  $\bar{b}$  为材料常数。

此外还引入一次型体积粘性以减小击波后方的数值振荡，

$$Q_i = -c_0 \Delta u_i \sqrt{\rho p} \quad (21)$$

式中  $c_0$  为人工粘性。

### 3 计算模型和计算结果

#### 3.1 计算模型

球形弹丸 初始时刻  $t = 0$ ，弹丸以  $v_0 = 5000\text{m/s}$  速度正撞击在静止、半无限靶板上，在  $R \sim Y$  坐标里计算模式如图 1 所示。我们选取  $I_{\text{MAX}} = 50$ ，  $J_{\text{MAX}} = 100$  共 5000 个等步长空间网格，  $J_{\text{FREE}}$  是靶板自由面所在位置，  $J_0$  是球心所在位置，程序也可以处理其它弹形或复合被帽弹形。在计算中材料均作为各向同性的流体弹塑性介质，忽略空气的作用，

本构选取程序中可用 Murnagham 状态方程或 Tillison 状态方程。计算中选用 Murnagham 状态方程, 其形式为

$$p = \frac{K_0}{n} [(\rho/\rho_0)^n - 1] \quad (22)$$

式中  $K_0$ ,  $n$  为实验确定的材料参数。可由实验测定的  $D \sim u$  形式的 Hugoniot 关系

$$D = c_0 + su \quad (23)$$

推算得出。式中  $D$  为冲击波波速,  $u$  为质点速度,  $c_0, s$  为实验值。弹丸的材料常数取为  $\rho_0 = 2.7\text{g/cm}^3$ ,  $c_0 = 3000\text{m/s}$ ,  $s = 1.2$ ; 靶板材料常数取  $\rho_0 = 2.7\text{g/cm}^3$ ,  $c_0 = 3500\text{m/s}$ ,  $s = 1.25$ ; 畸变部分的弹性剪切模量弹丸取  $G = 0.35 \times 10^2\text{GPa}$ , 靶板取  $G = 0.3 \times 10^2\text{GPa}$ 。

状态方程 (22) 式同内能无关, 塑性判据也取与内能无关的简化形式:  $K = k_0 + k_1 \mu + k_2 \mu^2$ 。对弹丸取  $k_0 = 0.1\text{GPa}$ ,  $k_1 = k_2 = 0$ , 对靶板则取:  $k_0 = 0.1\text{GPa}$ ,  $k_1 = 7\text{GPa}$ ,  $k_2 = -1.2 \times 10^2\text{GPa}$ , 而当  $\mu \geq 0.33$  时取  $k_0 = 0.2\text{GPa}$ ,  $k_1 = k_2 = 0$

### 3.2 计算结果分析

图 1 是  $v_0 = 5000\text{m/s}$  撞击速度时早期弹丸侵彻和变形的几何图象。图中 NC 表示计算的循环次数,  $t$  是时间, 单位  $\mu\text{s}$ 。可见弹丸的变形已十分显著, 弹坑的形状基本形成, 开坑的早期阶段已过去, 坑缘的突起 (亦称翻唇) 非常明显, 弹坑的直径超过弹丸原来的直径, 即介质的径向运动已经十分显著了。弹丸与靶板发生了剧烈的大畸变, 计算仍能十分稳定进行, 说明 DIMP 程序对于处理大畸变超高速撞击问题是成功的。

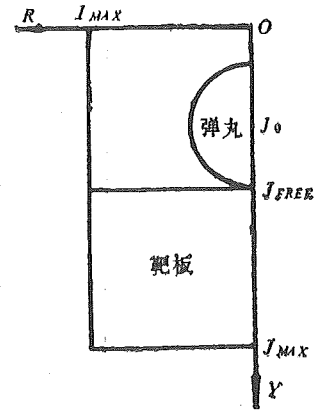


图 1 计算模型简图

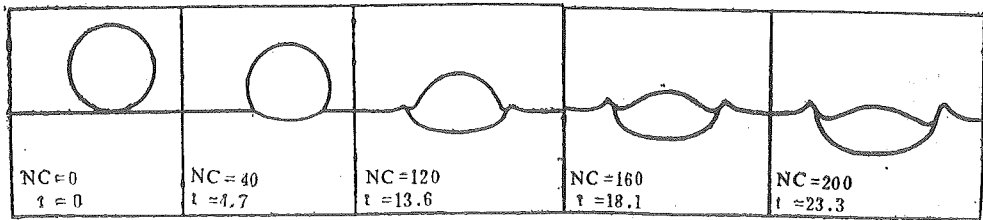


图 2 弹丸撞击靶体变形图

图 3(a)、(b)、(c) 给出了弹丸撞击靶板早期不同时刻对称轴上的压力分布, 由于球面扩散和人工粘性的作用, 冲击波阵面被抹平了些, 但仍是十分明显的, 冲击波后方的数值振荡也控制得较好, 接触界面处压力连续性并无明显间断。因此整个弹靶的早期应力场的计算结果是满意的。图 4 给出了对应图 3 (b)、(c) 时刻对称轴上轴向应力的分布情况, 与图 3 相比可见, 在超高速撞击时弹塑性效应并不显著。

图 5 是弹丸侵彻成坑时, 坑底 (即对称轴上弹丸和靶板的界面) 运动速度随时间的变化。由图可见, 除了早期几个微秒开坑阶段速度变化较快外, 其后基本上是匀速运动 (约为  $2400\text{m/s}$ ), 这说明在超高速撞击的早期阶段, 也有如同射流侵彻靶板时一样的定常侵彻阶段。图中坑底速度略有振荡是由于数值噪音引起的。

图 6 表示坑深 (从坑底到坑缘的距离) 随时间发展的曲线, 可见除了早期有部分振荡外,

后期已是稳定增长，这同图 5 的常定侵彻图象度是相一致的。在撞击后  $13\mu\text{s}$ ，坑深约是 0.46 倍的弹丸直径。

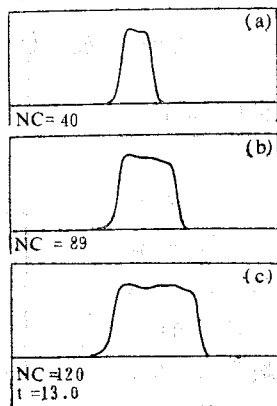


图 3 对称轴上压力分布

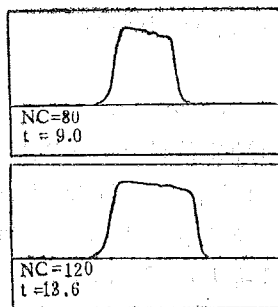


图 4 对称轴上应力分布

图 7 是弹丸撞击后坑径随时间的变化，可见早期坑径的增长率低于后期的增长率，这说明早期坑径的增加只是弹丸侵入引起，因此同弹丸的速度成正比，后期坑宽的增长速度加快，说明坑的径向运动速度变大了从图上计算时间看，坑宽仍在不断增大时期，这同我们本算时间较短有关。在  $13\mu\text{s}$  时，坑宽约是 1.3 倍的弹丸初始直径。

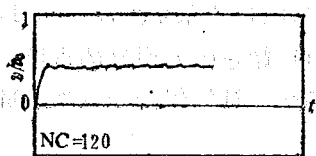


图 5 坑底速度随时间变化图

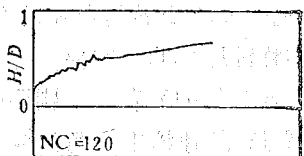


图 6 坑深随时间变化图

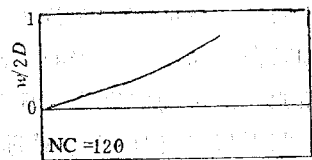


图 7 坑径随时间变化曲线

图 8 是同图 3 (b)、(c) 相对应时刻对称轴上轴向速度的分布情况。由于靶板的阻挡作用，弹丸内速度场明显改变，这是撞击引起的强压缩波向弹丸内传播的必然结果，使得弹丸的侵彻速度降低，同时压力升高。对称轴上速度分布也较光滑，由应力场的数值噪音较低，一定可以推知速度场的数值噪音较低，这是理所当然的结果。

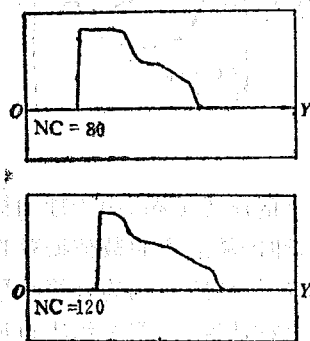


图 8 对称轴上速度分布图

上述结果分析表明，采用 DIMP 程序数值模拟超高速现象可以得到撞击过程较为完整和合理的物理图象，因此是超高速撞击问题研究的有效手段之一。当然计算结果的可靠性有待于实验室实验或现场高速撞击试验的校核，超高速撞击时材料参数的获得也是十分重要的工作。就数值计算本身而言，还有尚待完善之处，如材料破坏模型的嵌入，各种本构模型的嵌入，计算后处理绘图功能的进一步开发等。本文作为超高速撞击数值模拟的一种尝试，供同行参考。

本文作为超高速撞击数值模拟的一种尝试，供同行参考。

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Beneley S E, TOODY II-A, A Computer Program for Two-Dimensional Wave Propagation -C.D.C.6600 Version, Sandia Laboratories, SC-DR-69-516, 1969.
- [ 2 ] Hageman L J and Sedgwick R T, Air Force Armanent Laboratory Report, AFATL-TR-75-152, 1975.
- [ 3 ] Hageman L J and Walsh J M, HELP, A Multiple-Material Eulerian Program for Compressibl Fluid and Elastic-Plastic Flows in the Two Space Dimension and Time, Ballistic Research Laboratories, AD-724959, 1971.
- [ 4 ] Johnson G R, EPIC-2, A Computer Program for Elastic-Plastic Impact Computation in Dimension Plus Spin, ARBRL-CR- 00737, 1977.
- [ 5 ] 胡秀章、李永池等, 爆炸与冲击, 8 (1988), 124~129.

## Numerical Simulation of Superhigh Velocity Impact

Hu Xiuzhang      Wang Xiaojun      Li Yongchi

*(Department of Modern Mechanics)*

### Abstract

A two dimensional eulerian finite difference program DIMP is used in numerical simulation of a superhigh velocity (5000m/s) spherical projectile striking a semi-infinite target. The main physical features of penetrating at an early stage (within 25  $\mu$ s) and the pressure and velocity distributions along the symmetric axis are given. Basically, the results are generally reasonable and valuable for studying superhigh velocity impact phenomena. The results also show that the DIMP program is one of the effective methods for simulating superhigh velocity impact problems.

**Key words:** numerical simulation, high velocity impact, hydro-elastic-plastic dynamic.

# 材料动态性能研究中的拉格朗日分析方法

柴华友\* 唐志平

(近代力学系)

## 摘 要

从数值拟合方法角度讨论了拉格朗日分析方法, 导出了由速度波形求解应力的反解法公式。与 Seaman 提出的方法进行了比较, 发现在某种程度上, 反解法优于 Seaman 方法。当只由一组速度波形求解应力波形时, 计算表明结果对拟合模式依赖很大。拟合模式不当时, 增加测量波形不能改善计算结果。

**关键词:** 拉格朗日分析, 反解法, 路径线。

## 1 引言

波传播法是研究材料动态力学性质的一种重要实验手段。不过作为反问题, 实验应力—应变曲线的得到, 往往依赖于本构模型的假设与烦琐的波传播数值模拟。Fowles 等人<sup>[1]</sup>于70年代初提出的拉格朗日分析方法可以从一组应力、速度或应变波形记录, 得到完整的流场信息, 不依赖于本构模型的假定。这一方法经 Seaman 等人<sup>[2,3]</sup>的改进和发展, 已能用于解决衰减波在内的实际问题。Seaman 指出, 在至少存在一个应力量计的情况下, 一组记录波形可确定流场相应的其他参量。但是, 如果只使用一组速度量计, 由于数学上的困难, 难以定出相应的应力波形, 尽管对具体实验而言, 相应的应力波形是客观存在的。为此 Seaman 作了沿路径线三阶偏导为零的假定, 得到了一组可以沿量计线 (gage line) 求解应力的封闭的差分方程组, 下文中称之为 Seaman 方法。他认为这种方法较好, 并否定了另一种可能解决这一问题的反解法。李孝兰<sup>[4]</sup>曾提出一维应变条件下用反解法从速度波形求解应力波形, 并用于计算 PMMA 的实验结果。本文从数值拟合角度重新讨论了拉氏分析方法并导出了反解法计算公式, 以一维 Maxwell 粘弹性杆及多方介质为算例, 通过自编的反解法程序用 Seaman 法与反解法进行了数值计算, 并对结果进行了分析和讨论。

## 2 Seaman 方法与反解法

一维条件下的拉格朗日守恒方程为

\*现地址: 中科院武汉岩土力学所。

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)_h + \left(\frac{\partial u}{\partial h}\right)_t = 0 \quad (1)$$

$$\rho_0 \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_h + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_t = 0 \quad (2)$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right)_h + \frac{\sigma}{\rho_0} \left(\frac{\partial u}{\partial h}\right)_t = 0 \quad (3)$$

为决定流场参量, 可由 (1) — (3) 式数值积分, 为此须对测到的流场作光滑、拟合、离散以及数值求解某些偏导的准备工作。图 1 给出了一组拉氏量计测得的参量  $f$  的波形, 它们构成了参量  $f(h, t)$  的流场三维图象。 $f$  可以是应力  $\sigma$ , 质点速度  $u$  或其他。按图所示构筑多条路径线 (path line), 它们与量计线 (1, 2, 3, 4) 一起构成了差分网格, 它们的交点构成离散格点。沿路径线  $h = h(t)$ , 参量  $f$  对拉氏坐标  $h$  的偏导可写为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_t = \frac{df}{dh} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_h \frac{dt}{dh} \quad (4)$$

当  $f$  取作应力或质点速度时, 守恒方程变为

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)_h + \frac{du}{dh} - \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_h \frac{dt}{dh} = 0 \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_h + \frac{1}{\rho_0} \left\{ \frac{d\sigma}{dh} - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t}\right)_h \frac{dt}{dh} \right\} = 0 \quad (6)$$

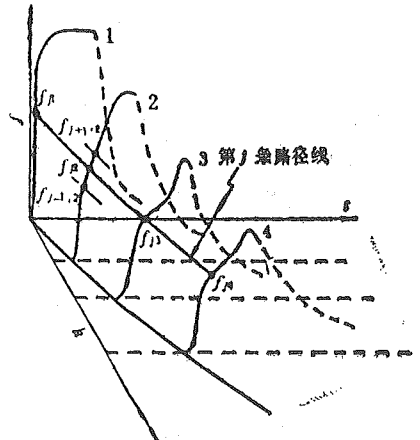


图 1 拉氏量计测量的波形及路径线的构筑

$$\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right)_h + \frac{\sigma}{\rho_0} \left\{ \frac{du}{dh} - \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_h \frac{dt}{dh} \right\} = 0 \quad (7)$$

上式沿量计线可写成如下的差分形式:

$$\varepsilon_{i+1,k} - \varepsilon_{i,k} = -\frac{1}{2} \left\{ \left( \frac{du_{i,k}}{dh} + \frac{du_{i+1,k}}{dh} \right) (t_{i+1,k} - t_{i,k}) - (u_{i+1,k} - u_{i,k}) \left( \frac{dt_{i+1,k}}{dh} + \frac{dt_{i,k}}{dh} \right) \right\} \quad (8)$$

$$u_{i+1,k} - u_{i,k} = -\frac{1}{2\rho_0} \left\{ \left( \frac{d\sigma_{i,k}}{dh} + \frac{d\sigma_{i+1,k}}{dh} \right) (t_{i+1,k} - t_{i,k}) - (\sigma_{i+1,k} - \sigma_{i,k}) \left( \frac{dt_{i+1,k}}{dh} + \frac{dt_{i,k}}{dh} \right) \right\} \quad (9)$$

$$E_{i+1,k} - E_{i,k} = -\frac{(\sigma_{i,k} + \sigma_{i+1,k})}{4\rho_0} \left\{ \frac{du_{i,k}}{dh} + \frac{du_{i+1,k}}{dh} \right\} (t_{i+1,k} - t_{i,k}) - (u_{i+1,k} - u_{i,k}) \left( \frac{dt_{i,k}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right) \quad (10)$$

式中下标  $i, k$  分别表示路径线  $i$  和量计线  $k$ 。为了利用上述差分方程进行逐步积分, 须对网

格化的流场进行拟合。拟合包括三方面：①沿量计线拟合  $f$  波形，从而得到  $\frac{\partial f}{\partial t}$ ；②沿路径线拟合参量  $f(h)$  关系，以计算  $\frac{df}{dh}$ ；③拟合路径线  $t(h)$ ，以决定  $\frac{dt}{dh}$ 。拟合不当会影响计算精度。方程 (8) — (10) 中各导数项应代入拟合后的函数。以参量  $f$  沿路径线  $j$  变化的拟合为例来说明。为方便起见我们选择多项式或指数形式的拟合函数：

$$\bar{f}_j = \sum_{n=0}^N a_n h^n \quad (\text{多项式拟合}) \quad (11)$$

$$\ln \bar{f}_j = \sum_{n=0}^N b_n h^n \quad (\text{指数拟合}) \quad (12)$$

其中  $\bar{f}_j$  是沿第  $j$  条路径线的参量  $f$  的拟合值。系数  $a_n, b_n$  由最小二乘法拟合路径线  $j$  上各量计测量数据  $f_{jk}$  来定出， $k=1, 2, \dots, K$ ， $K$  是量计总数。由此可见  $a_n$  和  $b_n$  与  $f_{jk}$  有线性关系，因此公式 (11)、(12) 可分别写为矩阵形式：

$$\bar{f}_{jk} = \sum_{i=1}^K \xi_{ki} f_{ji} \quad (13)$$

$$\ln \bar{f}_{jk} = \sum_{i=1}^K \zeta_{ki} \ln(f_{ji}) \quad (14)$$

$\bar{f}_{jk}$  是网格点  $jk$  处的拟合值， $K$  为量计总数，矩阵  $\xi, \zeta$  仅是  $h$  与拟合次数  $N$  的函数。微分上式得：

$$\frac{d\bar{f}_{jk}}{dh} = \sum_{i=1}^K \xi'_{ki} f_{ji} \quad (15)$$

$$\frac{d\bar{f}_{jk}}{dh} = \bar{f}_{jk} \sum_{i=1}^K \zeta'_{ki} \ln(f_{ji}) \quad (16)$$

这就给出了每个网格点处的拟合参量  $\bar{f}$  的全导的求法。全导  $\frac{d\bar{f}}{dh}$  也可同样得到。

如果所用的是应力量计，那末构筑应力流场网格并将拟合结果代入 (9) 式可逐步解出相应的速度波形。进而由 (8) 式和 (10) 式解出相应的应变、内能波形。不过，只从一组速度波形求解相应的应力参量时，会遇到困难，因为由守恒方程 (2) 沿  $h$  积分有

$$\sigma(\epsilon)|_h = \sigma(\epsilon)|_{h_0} - \int_{h_0}^h \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_h dh \quad (17)$$

这说明  $h$  处应力的确定，须已知  $h_0$  处的应力边界条件  $\sigma(\epsilon)|_{h_0}$ 。单纯的速度量计无法给出完整的应力边界条件，不过由于实际流场的客观性，速度波形上的每一点，总是与一个未知的但客观上唯一确定的应力相对应，问题在于如何求出这个应力值。为此我们先假设速度流场路径线上的相应应力符合某种拟合曲线，并试图由 (9) 式反解出相应的应力波形，这就是所谓的反解法。我们采用二种模式来模拟待求应力沿路径线的变化（当然可以有多种）：

① a) 多项式拟合



由 (15) 式, 取  $f = \sigma$  有

$$\frac{d\sigma_{i,k}}{dh} = \sum_{i=1}^K \xi'_{k,i} \sigma_{i,i}, \quad \frac{d\sigma_{i+1,k}}{dh} = \sum_{i=1}^K \xi'_{k,i} \sigma_{i+1,i} \quad (18)$$

代入 (9) 式经整理可得矩阵形式的递推方程组

$$A\sigma_{i+1} = B\sigma_i + C \quad (19)$$

其分量形式为

$$\sum_{i=1}^K A_{k,i} \sigma_{i+1,i} = \sum_{i=1}^K B_{k,i} \sigma_{i,i} + C_k \quad (19')$$

式中

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_{i,1} \\ \sigma_{i,2} \\ \vdots \\ \sigma_{i,K} \end{pmatrix}, \quad \sigma_{i+1} = \begin{pmatrix} \sigma_{i+1,1} \\ \sigma_{i+1,2} \\ \vdots \\ \sigma_{i+1,K} \end{pmatrix}$$

$$A_{k,i} = \xi'_{k,i} (t_{i+1,k} - t_{i,k}) - \delta_{k,i} \left( \frac{dt_{i,k}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right) \quad (20)$$

$$B_{k,i} = \xi'_{k,i} (t_{i,k} - t_{i+1,k}) - \delta_{k,i} \left( \frac{dt_{i,k}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right)$$

$$C_k = 2\rho_0 (u_{i,k} - u_{i+1,k})$$

(20) 式中  $\delta_{k,i}$  是 Kronecker 矩阵

$$\delta_{k,i} = \begin{cases} 1 & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases} \quad (21)$$

由 (19) 式可得

$$\sigma_{i+1} = A^{-1}B\sigma_i + A^{-1}C \quad (22)$$

由于 (20) 式中拟合矩阵  $\xi_{k,i}$  仅与量计位置  $h$  和拟合次数  $N$  有关, 路径线每步已知, 这样系数矩阵  $A$ ,  $B$ ,  $C$  均为已知。只要知道第  $j$  条路径线上的应力值  $\sigma_j$ , 则由方程 (22) 可解出  $j+1$  条路径线上的应力值  $\sigma_{j+1}$ , 由此递推, 可解得相应的应力波形。

b) 指数拟合

由 (16) 式知

$$\frac{d\sigma_{i,k}}{dh} = \sigma_{i,k} \sum_{i=1}^K \xi'_{k,i} \ln(\sigma_{i,i}) \quad (23)$$

$$\frac{d\sigma_{i+1,k}}{dh} = \sigma_{i+1,k} \sum_{i=1}^K \xi'_{k,i} \ln(\sigma_{i+1,i})$$

代入 (9) 式经整理可得关于未知量  $\sigma_{i+1}$  的矩阵形式的非线性递推方程组

$$f(\sigma_{i+1}) = 0 \quad (24)$$

其中

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1(\sigma_{i+1}) \\ f_2(\sigma_{i+1}) \\ \vdots \\ f_K(\sigma_{i+1}) \end{pmatrix}, \quad \sigma_{i+1} = \begin{pmatrix} \sigma_{i+1,1} \\ \sigma_{i+1,2} \\ \vdots \\ \sigma_{i+1,K} \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} f_k(\sigma_{i+1}) &= \sigma_{i+1,k} \sum_{i=1}^K \zeta'_{ki} \ln(\sigma_{i+1,i}) (t_{i+1,k} - t_{ik}) - \sigma_{i+1,k} \\ &\quad \cdot \left( \frac{dt_{ik}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right) - 2\rho_0 (u_{ik} - u_{i+1,k}) + \sigma_{ik} \\ &\quad \cdot \sum_{i=1}^K \zeta'_{ki} \ln(\sigma_{ii}) (t_{i+1,k} - t_{ik}) + \sigma_{ik} \left( \frac{dt_{ik}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right) \end{aligned} \quad (26)$$

利用牛顿迭代法可求得方程组 (24) 式的  $M+1$  次迭代解  $\sigma_{j+1}^{(M+1)}$  的表达式:

$$\sigma_{j+1}^{(M+1)} = \sigma_{j+1}^{(M)} - [\mathbf{J}(\sigma_{j+1}^{(M)})]^{-1} \mathbf{f}(\sigma_{j+1}^{(M)}) \quad (27)$$

其中  $\mathbf{J}(\sigma_{j+1}^{(M)})$  是雅可比矩阵在  $\sigma_{j+1}^{(M)}$  处的值:

$$\mathbf{J}(\sigma_{j+1}^{(M)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \sigma_{i+1,1}} & \frac{\partial f_1}{\partial \sigma_{i+1,2}} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial \sigma_{i+1,K}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \sigma_{i+1,1}} & \frac{\partial f_2}{\partial \sigma_{i+1,2}} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial \sigma_{i+1,K}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_K}{\partial \sigma_{i+1,1}} & \frac{\partial f_K}{\partial \sigma_{i+1,2}} & \cdots & \frac{\partial f_K}{\partial \sigma_{i+1,K}} \end{pmatrix} \quad (28)$$

$\sigma_{j+1}^{(M)}$  是第  $j+1$  条路径线第  $M$  步的迭代值, 余类推。

当

$$|\sigma_{j+1}^{(M+1)} - \sigma_{j+1}^{(M)}| \leq \epsilon \quad (29)$$

$\epsilon$  为某给定误差, 表示已解得第  $j+1$  条路径线上各格点处的应力值。经验表明,  $\sigma_{j+1}^{(0)}$  的选取十分重要, 选择不当收敛很慢甚至发散。我们选取

$$\sigma_{j+1}^{(0)} = \rho_0 \mathbf{c} \mathbf{u}_{i+1} = 2\rho_0 \mathbf{u}_{i+1} / \left( \frac{dt_{ik}}{dh} + \frac{dt_{i+1,k}}{dh} \right) \quad (30)$$

实算表明收敛很快。

从上面可以看出反解法从速度波形求解应力波形, 与从应力波形求解速度波形一样都是由应力场拟合入手, 同属数值近似求解法, 不同的是前者应力点未知, 后者路径线上各格点处应力值是已知的。反解法在计算后一步应力时要利用前一步算出的各量计格点处的应力值, 因此前一步的应力计算误差会影响后一步的精度。

Seaman<sup>[2]</sup> 假设沿路径线三阶全导  $\sigma_{k,k,k} = 0$ , 即采用不高于二次的多项式来拟合未知应力变化, 得到了沿单个量计线求解应力的递推公式:

$$\left\{ \begin{aligned} \sigma_2 &= \sigma_1 + (\rho_0/t_h)\Delta u + \frac{1}{2}(\sigma_{h_2} + \sigma_{h_1})(\Delta t/t_h) \end{aligned} \right. \quad (31)$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}(\sigma_{h_2} + \sigma_{h_1})(\Delta t_h/\Delta t - t_{hh}/t_h) - (\sigma_{h_2} - \sigma_{h_1})t_h/\Delta t \\ &= -\frac{1}{2}(\sigma_{hh_2} + \sigma_{hh_1}) - \rho_0(\Delta u_h/\Delta t - \Delta u t_{hh}/(\Delta t t_h)) \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} t_h(\sigma_{hh_2} - \sigma_{hh_1}) &= 2(\sigma_{h_2} - \sigma_{h_1})(t_h \Delta t_h/\Delta t - t_{hh}) \\ &+ \{(\sigma_{h_2} + \sigma_{h_1})/2t_h\}(2t_{hh} \Delta t_h + t_h \Delta t_{hh} - 2t_h \Delta t_h^2/\Delta t) \\ &+ \rho_0\{\Delta u_{hh} - 2\Delta u_h \Delta t_h/\Delta t + 2\Delta u t_{hh} \Delta t_h/(t_h \Delta t)\} \end{aligned} \quad (33)$$

(31) — (33) 式构成一组封闭方程组，只要知道前一步的  $\sigma_1$ 、 $\sigma_{h_1}$ 、 $\sigma_{hh_1}$ ，即可解出后一步的  $\sigma_2$ 、 $\sigma_{h_2}$ 、 $\sigma_{hh_2}$ 。

### 3 算例检验

#### 3.1 解析解

多方介质 ( $\gamma = 1.4$ ) 及一维 Maxwell 半无限粘弹杆的流场具有精确解，以此作为检验。Cowperthwaite 等人<sup>[4]</sup>给出的多方介质流场解析解如下：

$$\text{应力场} \quad \frac{p}{p_0} = (H+1)(T+1)^{-1/5} \quad (34)$$

$$\text{速度场} \quad \frac{u}{u_0} = \frac{3}{2}(T+1)^{-2/5} - \frac{1}{2}(H+1)^{-2/5} \quad (35)$$

$$\text{比容} \quad \frac{V_0}{V} = (H+1)^{5/3}(T+1)^{-1} \quad (36)$$

$$\text{冲击波迹线} \quad H = (T+1)^{3/5} - 1 \quad (37)$$

式中  $H$ 、 $T$  是无量纲拉氏坐标和时间，下标 0 表示  $T=0$  时的初始值。

Maxwell 粘弹体的本构描述为

$$\sigma + p_1 \dot{\sigma} = q_1 \dot{\epsilon} \quad (38)$$

其中  $p_1$ 、 $q_1$  为材料常数。一维 Maxwell 半无限杆在端部施一突加应力阶跃脉冲  $\sigma(0, t) = \sigma_0 H(t)$ ，其应力、速度流场分布如下<sup>[5]</sup>：

$$u(h, t) = \frac{\sigma_0}{\rho c} e^{-h/2p_1 c} - \int_{(h/c)}^t \dot{u}(h, \tau) d\tau \quad (39)$$

$$\sigma(h, t) = \sigma_0 - \sigma_0 A \int_0^h \dot{u}(\xi, t) d\xi \quad \left(t > \frac{h}{c}\right) \quad (40)$$

其中  $\rho$  是密度， $A$  是截面积， $c = q_1/p_1\rho$ ，被积函数

$$\dot{u}(h, t) = \frac{\sigma_0}{\rho c} \cdot \frac{1}{2p_1} \left\{ I_0(\xi) + \frac{t}{2p_1 \xi} I_1(\xi) \right\} e^{-1/2p_1} \quad (41)$$

式中

$$\xi = \frac{1}{2p_1} \sqrt{t^2 - \left(\frac{h}{c}\right)^2} \quad (42)$$

$I_0(\xi)$ 、 $I_1(\xi)$  分别是零阶和一阶修正 Bessel 函数:

$$I_0(\xi) = \sum_{K=0}^{\infty} \frac{1}{K!K!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2K} \quad (43)$$

$$I_1(\xi) = \sum_{K=0}^{\infty} \frac{1}{K!(K+1)!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2K+1}$$

计算中各常数取为  $q_1 = 6 \times 10^4 \text{ N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ ,  $p_1 = 2 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ,  $\rho = 1.25 \text{ g}/\text{cm}^3$ ,  $A = 2.5 \text{ cm}^2$ ,  $\sigma_0 = 4 \times 10^4 \text{ N}/\text{m}^2$ .

### 3.2 由应力波形计算速度波形的比较

图 2 是用拉氏分析方法由应力波形算出的多方介质的速度波形。图中虚划线为应力沿路

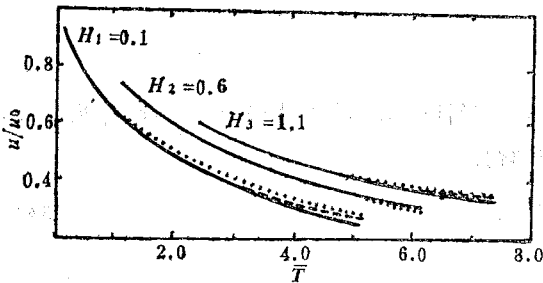


图 2 由应力波形算出的多方介质的速度波形  
— 理论解 --- 多项式拟合... 指数拟合

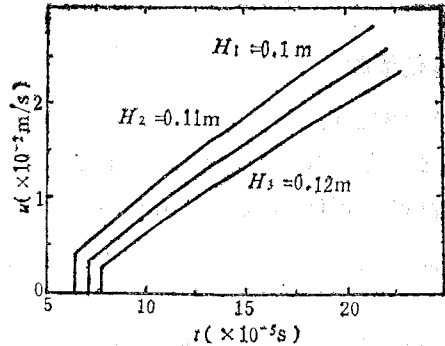


图 3 由应力波形算出的 Maxwell 杆中的速度波形

径线按二次多项式拟合的计算结果, 虚点线则是按二次指数函数拟合的结果, 与理论解 (实线) 符合较好, 二次多项式拟合显得更好些。图 3 是由应力波形算出的 Maxwell 杆中的速度波形, 其中二次多项式拟合、指数拟合结果与理论解都吻合很好, 图中分辨不出它们的差别。

### 3.3 由速度波形计算应力波形的比较

用反解法和 Seaman 法分别对多方介质作了由速度波形求解应力波形的计算。为便于比较起见, 两者采用相同的拟合形式 (指数或二次多项式)。计算结果表明, 两种方法相差不大。与解析解相比, 中间量计的计算结果吻合较好, 两侧量计偏差较大, 并且二次多项式拟合结果优于指数拟合。

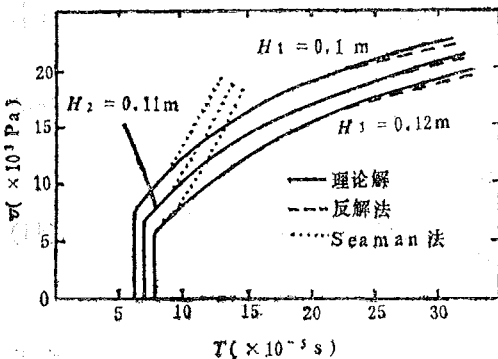


图 4 由速度波形算出的 Maxwell 杆中的应力波形

图 4 给出 Maxwell 杆中由速度波形计算应力波形的比较。图中虚划线是用反解法沿路径线应力按二次指数拟合时的计算结果, 与理论解 (实线) 相比在  $t = 250 \mu\text{s}$  时间范围内, 几乎完全吻合, 而 Seaman 方法不论沿路径线速度拟合采用指数形式还是多项式, 计算结果都是发散的 (虚点线所示)。反解法表现出比 Seaman 法明显的优越性。这是因为 Seaman 法假定应力沿路径线  $\sigma_{hh} = 0$  的缘故。对于多

方介质,二次多项式拟合较好,说明该介质接近于 Seaman 假定,故两种方法相差不大。对于 Maxwell 材料,其三阶全导不趋近于零,这就引起大的失真。如果反解法采用应力沿路径线为二次多项式分布(即  $\sigma_{h,h,h} = 0$ ),计算结果表明与 Seaman 法相一致,这有力地说明了这一点。另外,Seaman 公式(31) — (33)中过多地出现二阶全导,这在数值计算中会带来较大的累积误差。

#### 4 结论与讨论

(1) 以上分析及实算结果表明,从应力波形求解速度波形,结果基本上是可靠的。这一结论也适用于从速度波形求解应变波形的情况。

(2) 当由速度波形求解应力波形时,要克服数学上的困难,必须附设条件。Seaman 的假设是沿路径线  $\sigma_{h,h,h} = 0$ 。反解法则选择某种应力函数,并不受  $\sigma_{h,h,h} = 0$  的限制。计算表明反解法优于 Seaman 法,尤其是对 Maxwell 粘弹性材料。从原则上说拉氏分析并不依赖于对材料本构的预先假定,不过 Seaman 假定实际上是对材料行为附设了一条强限制,因此只适用于  $\sigma_{h,h,h}$  接近于零一类材料。反解法由于可提供多种选择模式,不受此限。

Seaman 否定反解法的理由之一是一个格点上的应力值依赖于前一路径线上各格点处的应力,Seaman 法则可独立地沿一个量计线求解。其实流场中一点的状态必然受前后状态的影响(所谓影响域)。当然影响域不一定包括所有量计。利用影响域也许能提供一种更妥善的解决办法。顺便提一下,Seaman<sup>[6]</sup>近年来已尝试对流场分区域进行曲面拟合,这样对某些导数的计算将更为简捷。

(3) 由速度波形求解应力波形,不论是反解法还是 Seaman 法,其可靠性均不如从应力波形求解速度波形,且往往还要依赖于拟合模式。在具体实验中并无解析解可供比较,这就大大降低了实用性。Tang 和 Gupta<sup>[7]</sup>曾提出所谓自洽性检验法,即根据算出的应力流场重建一个速度流场,若该流场与原测速度流场相吻合,则称算出的应力场与原速度场自洽,因此是可靠的,否则是不自洽、不可靠的。对反解法而言,可以方便地调节拟合模式以得到自洽结果。这正是反解法优点之所在,它扩展了拉氏分析处理动态实验结果的能力。

#### 参 考 文 献

- [1] Fowles G R and Williams R F, *J. Appl. Phys.*, 41 (1970), 360.
- [2] Seaman L, *J. Appl. Phys.*, 45 (1974), 4303.
- [3] Grady D E, *J. Geo. Res.*, 78 (1973), 1299.
- [4] Cowperthwaite M and Williams R F, *J. Appl. Phys.*, 42 (1970), 456.
- [5] 周光泉、刘孝敏,《粘弹性理论》讲义,中国科学技术大学,1983.
- [6] Seaman L, Lagrangian Analysis for Stress and Particle Velocity Gages, Technical Report, SRI International, Aug. 1984.
- [7] Tang Zhiping, Lagrangian Analysis Program for Multiple Particle Velocity Gauges--GUINSYU, Technical Report, Shock Dynamics Laboratory, Washington State University, USA, April 1986.
- [8] 李孝兰,爆炸与冲击, 5 (1985), 45.

# Lagrangian Analysis for Study of Dynamic Material Behaviors

Chai Huayou      Tang Zhiping

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

In this paper, the Lagrangian analysis is discussed and the formulas of inverse method are derived based on the numerical fitting. It is found that Inverse method is better than the method given by Seaman in some degrees. The results show that the accuracy of numerical calculation largely depends on fitting model chosen for unknown stress along pathlines when stress histories are to be calculated from velocity gauge records. It is also shown that increasing the number of measuring waveforms can not improve the accuracy, if fitting model is not chosen properly along path-lines.

**Key words:** Lagrangian analysis, inverse method, path-line.

# 应力波放大器的优化设计

李欣增 周光泉 奉孝中

(近代力学系)

## 摘 要

尝试用直线迭加三角函数的方法表示一般意义上的曲面锥,以应力持续时间为优化设计的目标函数,采用 KONDO 程序求解应力波过程,借助单纯形法找到一种优化锥形。对以往的锥体设计方案进行了对比和评价。

**关键词:** 优化设计, 应力波放大器, 单纯形法。

## 1 前言

七十年代以来,应力波加工技术开始作为专门技术发展起来<sup>[1]</sup>。这种新技术具有加工精确、易于控制、噪声小、能耗低的特点,因而深受工业界的青睐。

应力波放大器(或称聚集器)是应力波加工装置中的核心部件之一,其形状决定着它的应力波传输性能,直接影响加工效果。一般的应力波放大器大小端直径比大于3,具有强烈的二维波动效应。目前,二维应力波分析在理论上仍是一个难题,而使用一维理论其结论的可信度又很成问题,故而在以往的工程设计中,只能使用一些简单的原则,在应力波传输特性这个关键问题上,缺乏有效的理论指导。

超声加工技术中所谓的“变幅杆”和这个问题相类似。近年来,超声变幅杆的设计也有了一些被实践证明有效的理论<sup>[2]</sup>但这种理论却不能直接应用于以瞬态波传输为主的应力波放大器的设计。

为此,我们试图使用数值方法,对放大器的设计问题进行探讨。本文的讨论基于钛材的应力波铆接,但计算结果和优化设计思想也适用于其它类似的问题。

## 2 二维优化设计思想和方法

### 2.1 优化设计思想

首先,我们提出一个简化模型。未加严格论证就认为,图1(b)中构形(小端是无穷长直杆)的最优化锥构形,代表着图1(a)实际模型(小端接工件)的最优化构形。这种简化将问题的讨论控制在弹性范围内了。使用 Hopkinson 压杆进行的实验表明,铝和钛做为铆

钉时的压缩曲线与它们的工程应力—工程应变的关系曲线是类似的。这一结果显示简化了的计算模型可以反映出实际的动力过程。

### 2.2 目标函数的设置

优化设计离不开目标函数<sup>[5]</sup> (或称评价函数), 设

$$\phi = \phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (1)$$

$$\text{约束条件} \quad \psi_i = \psi_i(x_1, \dots, x_N) \quad (i=1, m) \quad (2)$$

这里  $x_1, \dots, x_N$  称优化变量。  $\phi$  的意义是加工效果, 对于铆接来说是变形量、金相结构等。  $m$  是约束条件的数目。

对  $\phi$  的进一步分析就必须考虑到工件金属材料的本构方程。文献[6]表明铝可被认为是很好的线性硬化弹塑性材料, 而且它的延展性较好, 应力强度的大小只会影响其变形发展的快慢, 不会造成材料的破坏。这时的加工效果好坏主要取决于功的大小, 各种形状的放大器差别不大。

在钛铆钉的加工中就不一样了。钛金属可以用两个关键参数  $\sigma_0$  和  $\sigma_b$  来说明, 只有在应力大于屈服限  $\sigma_0$  时才会有塑性变形, 而当应力超过强度极限  $\sigma_b$  时会造成材料破坏。钛铆接时的困难是  $\sigma_b$  和  $\sigma_0$  很接近。我们希望经过应力波放大器对应力波进行控制, 不但要使应力幅值高于  $\sigma_0$ , 而且要使应力处于  $\sigma_0$  和  $\sigma_b$  之间有最长的历时。

钛合金 TB<sub>2</sub> 的材料常数为  $\sigma_0 = 1360$  MPa,  $\sigma_b = 1700$  MPa, 令  $\eta = \sigma_0 / \sigma_b = 0.766$ 。我们在某次计算的结果中锥体小端的输出应力如图 2。

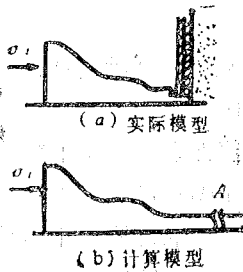


图 1 问题模型

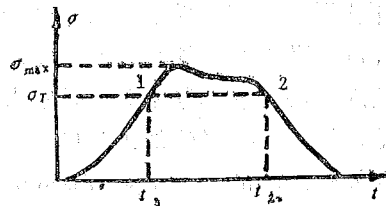


图 2 应力-时间图上目标函数的选取

在图中, 截取  $\sigma_T = \eta \sigma_{\max} = 0.766 \sigma_{\max}$ , 该截线与应力历史曲线相交于两点 1、2, 对应于时间  $t_1, t_2$ , 在迭加原理成立时调节输入应力幅度 (动力源能量), 当  $\sigma_{\max}$  对应于  $\sigma_b$  时,  $\sigma_T$  对应于  $\sigma_0$ , 则时间差  $t_2 - t_1$  为塑性流动时间。在等应变率过程中, 令

$$t_p = t_2 - t_1 \quad (3)$$

则  $t_p$  的大小可以反映加工效果的好坏。这样 (1) 式变为

$$t_p = \phi(x_1, \dots, x_N) \quad (4)$$

### 2.3 自变量及其泛函分析

(1) 式中的  $x_1, \dots, x_N$  是自变量, 是影响加工效果的各参量, 可以写为

$$x_1 = f(x) \quad \text{母线方程}$$

$$x_2 = v_0 \quad \text{动力源能量;}$$

$$x_3 = c_1 \quad \text{锥体材料性能因素;}$$



$$x_4 = c_2 \quad \text{加工条件参数,}$$

$$x_N = \dots$$

但有一点是明确的,即它们之间是独立的。我们进一步设定在  $x_2 \dots x_N$  都相同时,对  $x_1$  的变化进行优化设计,这时(4)式变为

$$t_p = \phi(f(x)) \quad (5)$$

约束条件(2)式变为  $\psi_i(f(x))$ ,它须满足机械结合条件:

$$\left. \begin{aligned} x \in (0, a) \quad f(x) = D/2 \\ x \in (b, \infty) \quad f(x) = d/2 \\ \max(f(x)) \leq D/2 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

这里的  $D$  和  $d$  是锥体大、小端的直径,  $a$  是大端直杆长度,  $b$  是直杆加曲面锥的长度。

原则上最优化设计要求  $f(x)$  的域值包含所有的形状,但我们无法提出这种普适函数的具体形式。我们的方案是用直线迭加三角函数的办法来表示曲面锥。

在坐标  $x-y$  中(图3),直锥剖面的母线方程  $y=f(x)$  在坐标  $x'-y'$  中为  $y'=0$   
迭加

$$y' = f'(x) = A \sin(kx' + \varphi_0) \quad (7)$$

则

$$\begin{cases} y = y' \cos \theta - x' \sin \theta + d/2 \\ x = y' \sin \theta + x' \cos \theta + a \end{cases} \quad (8)$$

其中  $\theta$  为倾角。所以我们就有

$$t_p = \phi'(A, k, \varphi_0, \theta) \quad (9)$$

这样构造的一类曲线虽然显得粗糙,但这类曲线原则上可在直锥基础上进行比较广的范围内的调节,包含了直径缩放的各种过程,可以从主要方面对二维影响进行研究。

作为补充,我们参考了文献[2]中的几种解析曲线,即悬链线、指数曲线、箕舌线。

#### 2.4 最优化方法<sup>[5]</sup>

一般的优化方法如 Fibonacci 法,最速下降法等属于间接方法,要求目标函数有较多的性质为人所知。在我们的问题中,即使我们简化了的优化函数方程(9),它的性质我们也一无所知,更不可能事先假设,这里采用的是直接方法中的一类——单纯形法。

单纯形法的基本思想,就是在不计算导数的情况下,先算出若干点处的函数值,从它们之间的大小关系也可以看出函数变化的大概趋势,为寻求函数的极值提供参考。单纯形法的步骤:

①设函数为  $\phi = \phi(x)$ ,  $x$  为  $N$  维向量。计算  $N+1$  个点  $x_0, x_1, \dots, x_N$  的函数值  $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_N$ ,若保证  $x_i$  向量相互间线性独立,向量  $x_1 - x_0, x_2 - x_0, \dots, x_N - x_0$  就构成单纯形。比较  $\phi_i$  的大小,最好点(在我们这里是最大值点)为  $\phi_H = \max \phi_i, i=0, N$ ; 最坏点  $\phi_L = \min \phi_i, i=0, N$ ; 次坏点  $\phi_C = \min \phi_i, i=0, N, i \neq L$ 。

②算出  $N$  个点的中心  $x_C$  ( $x_L$  除外)

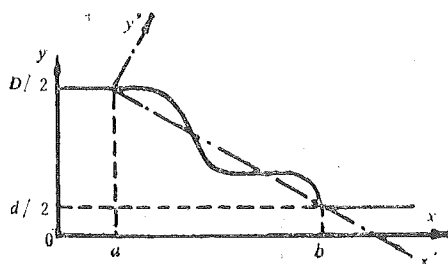


图3 轴面母线形状表示法

$$x_C = \frac{1}{N} \left( \sum_{i=0}^N x_i - x_L \right)$$

求反射点  $x_R = 2x_C - x_L$  的目标函数值  $\phi_R$ .

③若  $\phi_R = f(x_R) \leq \phi_G$ , 就进行“压缩”, 令

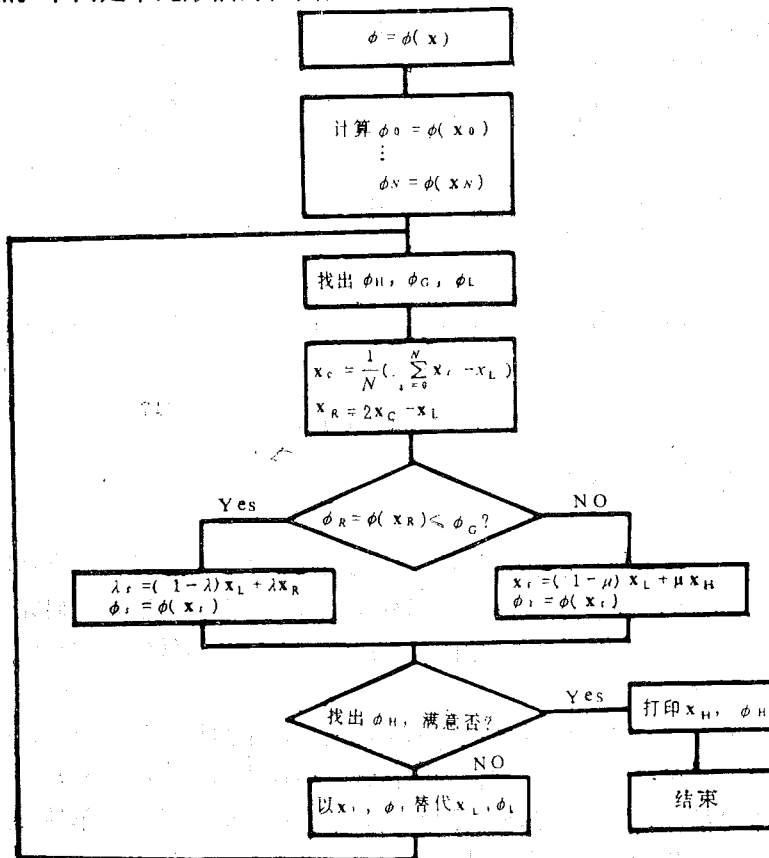
$$x_S = (1 - \lambda)x_L + \lambda x_R, \quad 0 < \lambda < 1, \quad \lambda \neq 0.5$$

求出  $\phi_S = \phi(x_S)$ .

④若  $\phi_R > \phi_G$ , 就进行“扩张”, 令

$$x_S = (1 - \mu)x_L + \mu x_H, \quad \mu > 1$$

⑤以  $x_S, \phi_S$  取代  $x_L, \phi_L$  构成新的单纯形, 重复以上方法进行下一步查寻, 直到找出满意的极大值点. 下面是单纯形法的框图:



### 3 计算过程和结果

目标函数  $t$ , 和参数  $A, k, \varphi_0, \theta$  是通过 KONDO 程序建立对应关系的. 为了集中注意力考查优化问题, 我们在所有的计算中都使用同一输入应力波形:

$$\sigma_{in} = \sigma_0 e^{-kt} \sin^2 \omega t \quad (10)$$

在上式中, 取  $\sigma_0 = 2.19 \times 10^4$  (dyn/cm<sup>2</sup>) (以压为正),  $h = 618$  (1/s),  $\omega = 2\pi/T_0$ .

其中  $T_0 = 300 \mu s$  是输入脉冲的周期, 这时  $\sigma_{in}$  的最大值为  $\sigma_{max} = 2.0 \times 10^4$  (dyn/cm<sup>2</sup>).

为了消除由于划分有限元网格时方案不同产生的偏差,我们使用 KONDO 的前处理程序<sup>[3]</sup>,用计算机来完成有限元划分,保证使用相同的原则划分网格。另外使用了 KONDO 的一个后处理程序,自动完成计算结果的绘图。由于使用了这些软件,我们才得以从原来繁杂的手工劳动中解脱出来,集中精力于优化构形的寻找。

为便于使用单纯形法,我们对(9)式进行无量纲化,选定基本量为  $D=5.0\text{cm}$ ,  $T_0/2=150\mu\text{s}$ 。(9)式中的变量无量纲化为  $\pi=2t_p/T_0$ ,  $\pi_1=A/D$ ,  $\pi_2=k\cdot D$ ,  $\pi_3=\varphi_0$ ,  $\pi_4=\theta$ 。则(9)式变为

$$\pi = \pi(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4) \quad (11)$$

这样,第二节中的  $x = (\pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4)$  是一个四维向量。单纯形法的计算过程和结果示于表1。表1中的  $k$  为放大系数,定义为

$$k = \max(\sigma_{\sigma_i}) / \max(\sigma_{j_n})$$

表1 单纯形法计算结果

编号	形状参数				目标函数 $\pi$	放大系数 $k$
	$\pi_1$	$\pi_2$	$\pi_3$	$\pi_4$		
1	0.000	0.000	0	$\text{tg}^{-1}(0.36)$	0.4202	7.56
2	0.100	1.990	0	$\text{tg}^{-1}(0.36)$	0.4542	8.41
3	0.060	6.570	$\pi$	$\text{tg}^{-1}(0.36)$	0.4181	7.60
4	0.050	5.015	$\pi$	$\text{tg}^{-1}(0.3)$	0.4085	7.23
5	0.066	6.480	$\pi$	$\text{tg}^{-1}(0.4)$	0.4090	8.00
6	0.063	2.505	0	0.417	0.4227	5.83
7	0.0454	-0.950	$-\frac{\pi}{2}$	0.346	0.4189	7.28

作为参考的三种特殊曲面锥的计算结果表示在表2中。

表2 三种特殊锥形的计算结果

名称	方程	参数取值	目标函数 $\pi$	放大系数 $k$
指数线	$f(x) = \alpha e^{-\beta x}$	$\alpha = 2.5\text{cm}$ , $\beta = 0.25\text{cm}^{-1}$	0.3963	6.58
悬链线	$f(x) = \alpha \text{ch}\gamma(1-x)$	$\alpha = 0.7\text{cm}$ , $\gamma = 5.0\text{cm}$	0.3827	9.20
箕舌线	$f(x) = 8a^3/(x^2 + 4a^2)$	$a = 1.25\text{cm}$	0.3991	8.76

#### 4 结论

就我们进行的单纯形优化分析,可以得出以下几点初步结论:

1) 在我们查找的四维空间中,构形最好约为

$$\pi_1 = 0.100 \quad \text{对应于 } A = 0.5$$

$$\begin{aligned} \pi_2 &= 1.990 && \text{对应于 } k = 0.398 \\ \pi_3 &= 0 && \text{对应于 } \varphi_0 = 0 \\ \pi_4 &= \text{tg}^{-1}(0.36) && \text{对应于 } \theta = \text{arctg}(0.36) \end{aligned}$$

它的目标函数  $\pi = 0.4542$ , 即  $t_p = 68.17(\mu\text{s})$

图 4 表示了优化锥形剖面图, 图 5 表示了它的输入输出应力历史。

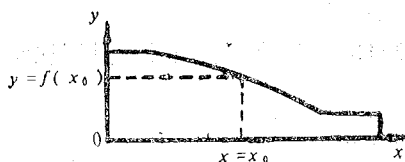


图 4 优化锥形剖面图

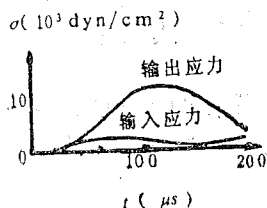


图 5 输入输出应力历史

另外, 从表 1 和表 2 中可看出, 直锥的目标函数值也较好。考虑到它加工容易, 在钛铆接时也是可以采用的一种形状。

2) 通过计算初步澄清了几点模糊的认识。比如认为指数锥适用于铆接器的观点是片面的, 以  $t_p$  为目标函数时, 指数锥效果并不好, 认为在大小端直杆和锥面过渡时应采用切线结合光滑过渡(箕舌线)为适宜的观点也没有把握住问题的关键。现在看来, 锥面的整体形状决定应力波放大器的性质, 局部的细节形式并不起多大作用。

3) 与超声理论相比本文的计算有很大的优越性, 它求证范围广, 结果也更加详尽。对于超声理论无解的小波数应力波传输可以同样计算, 计算过程充分考虑了二维效应, 结果也更趋合理。如在超声理论中, 变形和应力总是按比例对应的, 而在二维有限元中, 变形和应力各自的演变是很不一样的。应力幅值放大达八倍左右, 而位移和速度在大小端的演化历史基本一样。这一结果正好反映了实际加工中应力波技术“机械动作小, 加工能力大”的特点。

4) 对应力波放大器的设计一般性原则有以下建议:

锥体母线呈凹状时, 应力峰值放大倍数较大, 平台持续时间较短。这种锥体可对工件产生短猝而猛烈的打击。

锥体母线呈凸状时, 应力峰值放大倍数较小, 平台持续时间较长。这种锥体可对工件施加平缓而有历时较长的载荷。

### 参 考 文 献

- [1] United State Patent Office, 3559269, 1971.
- [2] 林仲茂, 超声变幅杆的原理和设计, 科学出版社, 北京, 1987, p53~95.
- [3] 中国科学技术大学近代力学系, KONDO—计算轴对称固体中大变形动力响应的有限元程序, 中国科技大学技术报告, 合肥, 1989.
- [4] 周光泉、刘孝敏, 应用数学和力学, 6 (1985), 797.
- [5] 南京大学数学系编著, 最优化方法, 科学出版社, 北京, 1984, p165~172.
- [6] 王礼立、胡时胜, 固体力学学报, 2 (1986), 163.

# Optimization of Stress Wave Amplifier

Li Xinzen Zhou Guangquan Feng Xiaozhong

(Department of Modern Mechanics)

## Abstract

In this paper, the general form of the amplifier's outline is taken as a straight line plus a sinusoid curve, the goal function is taken as ' $t$ ', parameter. The idea is that the optimized amplifier has the longest overstress time. By use of two-dimensional dynamical finite element computer code<sup>5</sup>KONDO, the relationship between the optimization function and the outline shape of the cone to be optimized is established. A optimized amplifier is found out by simplex method. A general rule is also suggested to design the stress wave amplifiers in other similiar apparatuses.

**Key words:** optimization, stress wave amplifier, simplex method.

# 空爆等温冲击波的传播

糜 仲 春

## 摘 要

把压力和内能考虑为热力学理想气体部分与辐射部分的和,从质量守恒、动量守恒和温度均匀分布关系式  $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$  出发,在对温度的无量纲关系式作了近似之后,求得了自模拟解。本文求得的波阵面参量与辐射流体力学的计算结果相接近,速度分布和密度分布比经典的强爆炸自模拟解有明显改进。

**关键词:** 空中爆炸, 冲击波, 自模拟。

## 1 引言

研究强爆炸问题,最初采用点爆炸模型,从质量守恒、动量守恒、熵守恒和理想气体状态方程出发,求得了自模拟解<sup>[1]</sup>,可以称这个解为经典的强爆解。

对于强爆炸的早期过程,需要考虑辐射效应<sup>[2]</sup>。但是,联合求解流体力学问题和辐射输运问题是非常困难的。文[3]采用简化了的输运方程和真实气体的状态方程,对均匀大气中能量为  $8.36 \times 10^{13} \text{J}$  的强爆炸进行了一维辐射流体力学计算(以下简称辐流计算)。注意到在早期阶段,强烈的热辐射使火球内的温度均匀分布,并且在起爆后的一段短时间内火球半径、等温球半径和冲击波半径是相重合的,我们从辐射输运方程的近似形式出发,联立一维球对称的质量守恒方程,动量守恒方程和温度均匀分布关系式  $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ ,采用强冲击波的边界条件,寻求自模拟解。

## 2 控制方程

考虑辐射热传导的能量方程在球坐标下可写为<sup>[4]</sup>

$$\rho \frac{d}{dt} \left( e_m + \frac{U_R}{\rho} \right) + (p_m + p_R) \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2u}{x} \right)$$

$$= \frac{2}{x} \left( \frac{lc}{3} \frac{\partial U_R}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{lc}{3} \frac{\partial U_R}{\partial x} \right) \quad (1)$$

式中  $x$  为半径,  $t$  为时间,  $\rho$  为密度,  $u$  为气团速度,  $l$  为 Rosseland 平均自由程,  $c$  为光速。辐射能密度  $U_R = aT^4$ , 辐射压力  $p_R = \frac{1}{3} aT^4$ , 辐射能流为  $-\frac{lc}{3} \frac{\partial U_R}{\partial x} = -\frac{4}{3} a l c T^3 \frac{\partial T}{\partial x}$ , 其中  $T$  为温度,  $a = 7.56 \times 10^{-16} \text{ J/cm}^3 \cdot \text{K}^4$ 。

把压力  $p$ 、内能  $e$  考虑为热力学理想气体分子的压力  $p_m$ 、内能  $e_m$  和辐射压力  $p_R$ 、辐射内能  $e_R$  之和。对理想气体  $p_m = \rho RT$ , 空气的  $R = 277 \text{ m}^2/\text{s}^2 \cdot \text{K}$ , 于是压力  $p$  可写为

$$p = \rho RT + \frac{1}{4} a T^4 \quad (2)$$

令比热比  $\gamma = \frac{4}{3}$ ,  $e_R = \frac{U_R}{\rho} = 3 \frac{p_R}{\rho} = \frac{1}{\gamma-1} \frac{p_R}{\rho}$ 。于是内能  $e$  可写为  $e = e_m + e_R = \frac{1}{\gamma-1} \frac{p_m + p_R}{\rho} = \frac{1}{\gamma-1} \frac{p}{\rho}$ 。

设  $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ , 则 (1) 式可写作

$$\rho \frac{de}{dt} + p \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2u}{x} \right) = 0 \quad (3)$$

质量守恒方程和动量守恒方程为

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2u}{x} \right) = 0 \quad (4)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5)$$

利用 (4) 式改写 (3) 式, 再利用热力学定律和熵的表达式可得到

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) + u \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) = 0 \quad (6)$$

显然方程组 (4)、(5)、(6) 与经典强爆解的控制方程在形式上完全相同。

我们采用的基本方程是 (2)、(4)、(5) 和

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

在波阵面上的边界条件为强冲击波关系, 在球心处气体静止。

### 3 自模拟解

由 (2) 式、(7) 式有

$$\frac{\partial p}{\partial x} = RT \frac{\partial \rho}{\partial x}$$

代入 (5) 式得

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{RT}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

(8) 式中出现了温度  $T$ ,  $T$  仅仅是时间  $t$  的函数。

为了把偏微分方程组化为常微分方程组求解, 需要讨论温度这一物理量的无量纲化。用量纲分析原理可知,  $T$  的无量纲量  $L = \frac{T}{R^{-1}D^2}$  与  $\alpha$  的无量纲量  $L_s = \frac{\alpha}{\rho_0 R^4 D^{-6}}$  之间存在着确定的函数关系, 其中  $D$  为冲击波速度,  $\rho_0$  为波前空气的密度。

在波阵面上  $p_s = \frac{2}{\gamma+1} \rho_0 D^2$ ,  $\rho_s = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \rho_0$ , 把它们代入 (2) 式, 可得到

$$\frac{(\gamma+1)^3}{2(\gamma-1)} (1+M) L_s = 1, \text{ 式中 } M = \frac{\gamma-1}{3(\gamma+1)} \frac{\alpha}{\rho_0 R} T^3.$$

让我们估计一下  $M$  的量级大小。取  $\gamma = \frac{4}{3}$ ,  $\rho_0 = 1.29 \text{ kg/m}^3$ , 则  $M = 9.71 \times 10^{-2} T^3$ 。当  $T \leq 10^6 \text{ K}$ ,  $M$  至少比 1 小一个量级。在这种情况下, 可以取  $L = \frac{2(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} = \frac{6}{49}$ 。于是 (8) 式就可写作

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{LD^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

冲击波阵面位置  $x_s = x_s(t)$ , 由量纲分析可知

$$x_s = \left( \frac{E_0}{\alpha \rho_0} \right)^{1/5} t^{2/5} \quad (10)$$

$E_0$  为点爆炸释放的能量,  $\alpha$  是待定常数。于是冲击波传播的速度  $D = \frac{2}{5} \frac{x_s}{t}$ 。

定义无量纲距离  $\lambda$ 、无量纲速度  $U(\lambda)$  和无量纲密度  $G(\lambda)$  为  $\lambda = \frac{x}{x_s}$ ,  $U(\lambda) = \frac{u}{D}$ ,  $G(\lambda) = \frac{\rho}{\rho_0}$ 。利用  $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{x_s} \frac{d}{d\lambda}$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\lambda D}{x_s} \frac{d}{d\lambda}$ , (4)、(9) 两式可化为

$$(U-\lambda) \frac{G'(\lambda)}{G} + U'(\lambda) + \frac{2}{\lambda} U = 0, \quad L \frac{G'(\lambda)}{G} + (U-\lambda) U'(\lambda) - \frac{3}{2} U = 0.$$

最后可得到下面两个常微分方程

$$\frac{dU}{d\lambda} = \frac{3}{2L} \frac{(\lambda-U)\lambda - 2}{1 - \frac{1}{L}(\lambda-U)^2} \cdot \frac{U}{\lambda} \quad (11)$$

$$\ln \frac{G(\lambda)}{G(1)} = \frac{1}{L} \left\{ \frac{1}{2} [U^2(1) - U^2(\lambda)] + \lambda U(\lambda) - U(1) + \frac{1}{2} \int_1^\lambda U(\lambda) d\lambda \right\} \quad (12)$$

(11) 式、(12) 式是波阵面后方速度分布和密度分布的无量纲量  $U(\lambda)$ 、 $G(\lambda)$  所满足的方程组。

需要注意的是, 在求解 (11) 式时, 必须先讨论导致  $\frac{dU}{d\lambda} = \frac{0}{0}$  的奇点的性状。在  $0 \leq \lambda \leq 1, U \geq 0$  的范围内存在三个奇点, 它们的坐标是  $O$  点  $(0, 0)$   $A$  点  $(\sqrt{L}, 0)$ ,  $B$  点  $(\frac{4}{3}\sqrt{L}, \frac{1}{3}\sqrt{L})$ 。用特征方程容易判断出  $A$  点是结点,  $O$  点和  $B$  点是鞍点。

在用数值方法解 (11) 式时, 差分方程的截断误差和计算机的舍入误差, 导致向鞍点靠



近时积分曲线总是发散的。这就需要从鞍点出发来求积分曲线。但是鞍点处的斜率是不确定的，我们不能直接以鞍点为起始点。为此，我们先写出过鞍点的两条渐近线中符合本问题解的一条渐近线的方程，然后取渐近线上的点作为数值求解方程 (11) 的起始点。

容易知道过  $O$  点、 $A$  点的积分曲线为  $U(\lambda) = 0$ 。

对鞍点  $B$ ，可以用下述方法来求渐近线。我们记  $\tilde{\lambda} = \lambda - \frac{4}{3}\sqrt{L}$ ， $\tilde{U} = U - \frac{1}{3}\sqrt{L}$ ，渐近线方程  $\tilde{U} = \tilde{U}(\tilde{\lambda})$  可以用多项式  $\tilde{U} = \sum K_i \tilde{\lambda}^i$  来逼近。多项式的项数越少，要求  $\tilde{\lambda}$  的值取得越小，也就是说数值解的起始点越靠近  $B$  点。通过计算可得渐近线的斜率  $K_1 = 1.135$ ，而  $B$  点的  $\infty$  导数线的斜率  $K_\infty = 1$ 。为了提高数值解的精度，我们采用三项式  $\tilde{U} = K_1 \tilde{\lambda} + K_2 \tilde{\lambda}^2 + K_3 \tilde{\lambda}^3$  来表示渐近线。把 (11) 式的  $\lambda$ ， $U$  分别换成  $\tilde{\lambda} + \frac{4}{3}\sqrt{L}$ ， $\tilde{U} + \frac{1}{3}\sqrt{L}$ ，在利用  $\tilde{U}$  的三项式并略去  $\tilde{\lambda}^4$  以上的项，就得到关于  $\tilde{\lambda}$ 、 $\tilde{\lambda}^2$ 、 $\tilde{\lambda}^3$  的方程式，对比等号两边  $\tilde{\lambda}$  同幂次的系数就能求得  $K_1, K_2, K_3$  的值。这样，我们就得到了  $B$  点渐近线的方程  $U = \frac{1}{3}\sqrt{L} + 1.135345\tilde{\lambda} + 0.678453\tilde{\lambda}^2 - 2.453187\tilde{\lambda}^3 + O(\tilde{\lambda}^4)$ 。取  $\tilde{\lambda} = 0.01$ ，得到  $B_1$  的坐标为  $(0.4765695, 0.1280612)$ 。取  $\tilde{\lambda} = -0.01$ ，得到  $B_2$  的坐标为  $(0.4565695, 0.1053592)$ 。于是，我们就可以用 Runge-Kutta 法从  $B_1$  点出发计算到  $\lambda = 1$ ，从  $B_2$  点出发计算到  $A$  点。解得了  $U = U(\lambda)$ ，再由 (12) 式求出  $G = G(\lambda)$ 。

在  $x_s = x_s(t)$  的表达式 (10) 中，还有一个待定常数  $\alpha$ ，采用经典强爆解中的方法可求得  $\alpha = 1.113$ 。

#### 4 结果和讨论

我们对均匀大气中当量为二万吨 TNT (能量为  $8.36 \times 10^{13}$  J) 的强爆炸进行了计算。

##### 1) 冲击波阵面参量

表 1 给出了波阵面位置  $x_s$ ，冲击波速度  $D$ ，波阵面压力  $p$ ，和气团速度  $u$ 。

为了便于比较，表 1 中所选取的时间与文 [3] 相同。表 1 还列出了本文与文 [3] 数据的相对误差。文 [3] 采用了两种模型进行数值求解，一种是辐射流体力学模型，另一种是忽略辐射效应的纯流体力学模型，即在基本方程中引入人为粘性项，并利用实际空气状态方程作为计算模型。对辐射流体力学模型，文 [3] 只列出了 0.941ms 以后的结果。因此，对这一时刻之前的波阵面参数，表 1 中的相对误差是相对文 [3] 的纯流体力学模型而言的。辐流计算给出的时程曲线表明，等温球的半径和冲击波阵面的半径在起爆后约 10ms 的时间内基本上是重合的，因此表 1 的数据给到时间为 10.98ms 为止。

从表 1 可以看出，冲击波阵面的半径  $x_s$ ，与文 [3] 的相对误差不超过 9%，冲击波速度  $D$  与辐流计算的相对误差不超过 11%，波阵面上压力  $p$ ，与辐流计算的相对误差为 10—16%，波阵面上气团速度  $u$ ，与辐流计算的相对误差在 6% 以下，考虑到从 (8) 式推导 (9) 式时对温度无量纲化所作的近似，这个结果是令人满意的。

##### 2) 物理量的空间分布

本文的控制方程组中采用了关系式  $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ ，在起爆后约 10ms 的时间内，冲击波阵面

表 1 冲击波阵面参数

$t$ (ms)	$x_s$ (m)	$\delta x_s$ (%)	$D$ (km/s)	$\delta D$ (%)	$p_s$ (bar)	$\delta p_s$ (%)	$u_s$ (km/s)	$\delta u_s$ (%)
0.0134	6.368	- 9	190.1	2	399600	0.3	162.9	- 1
0.0341	9.252	- 8	108.5	- 5	130200	- 13	93.0	- 9
0.0686	12.24	- 6	71.35	4	56300	2	61.16	- 1
0.102	14.34	- 5	56.24	7	35000	7	48.21	1
0.229	19.82	- 1	34.62	8	13300	10	29.67	1
0.479	26.62	2	22.23	16	5460	22	19.05	6
0.712	31.20	3	17.53	13	3400	12	15.03	4
0.941	34.88	7	14.82	10	2428	10	12.70	1
1.136	37.61	7	13.24	9	1938	10	11.35	1
2.878	54.54	8	7.582	10	635	11	6.50	1
4.791	66.88	9	5.584	10	344	11	4.79	2
6.734	76.64	9	4.552	10	229	14	3.90	4
8.024	82.20	9	4.098	11	186	16	3.51	5
10.98	93.19	9	3.395	11	127	16	2.91	6

内的温度是均匀分布的。

对于压力分布,经典强爆解给出的结果是合理的,但是在密度分布和气体微团的速度分布方面,经典强爆解与实际情况相差甚远。采用本文的模型,可以在这两方面得到明显的改进。

从(11)式求得的  $U = U(\lambda)$  表示了  $\frac{u}{u_s}$  对  $\frac{x}{x_s}$  的依赖关系。在图 1 上画出了  $\frac{u}{u_s} - \frac{x}{x_s}$  曲线。本文得到的速度分布曲线和经典强爆解的速度分布曲线用方格坐标纸画在图 1(a) 上。图

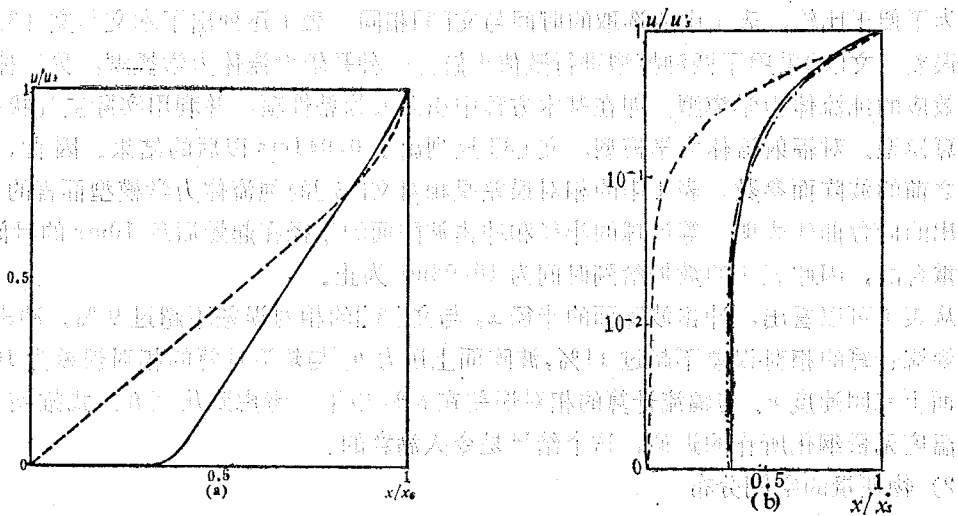


图 1. 无量纲速度分布 (a) 本文的解, (b) 经典强爆解, (c) 辐流计算的数值解

1 (b)是在半对数坐标纸上画出的这两条曲线以及辐流计算得到的速度分布曲线。由图 1 (b)可以明显看出, 本文与辐流计算的结果完全吻合, 而经典强爆解与辐流计算的结果相差甚远。

我们知道球面爆轰波反应产物的速度分布在球心附近存在一个静止区。本文所得的气团速度分布在  $0 \leq \lambda < 0.35$  范围内也出现  $u = 0$  的静止区。可以认为强爆炸早期温度梯度为零的等温冲击波的传播与爆轰波的传播有某些相似之处。

图 2 给出了无量纲密度在空间的分布。作为对比, 在图 2 上画出了经典强爆解的密度分布, 并给出了  $t = 2.83\text{ms}$  辐流计算的密度分布。

从图 2 可以看出, 在波阵面附近, 本文的压缩比, 与经典强爆解一样要比辐流计算的低。实际上, 对  $\gamma = \frac{4}{3}$  的多方气体, 强冲击波阵面上的压缩比为 7, 而辐流计算得到的爆炸早期波阵面上的压缩比要比 7 大, 例如在  $0.941\text{ms}$  时压缩比约为 14.7 倍。需要指出的是, 在高温高压的条件下, 比热比不再是常数, 因此多方气体的假定不再成立。

此外还可以从图中看出, 在球心附近的压缩比, 本文与辐流计算相接近, 经典强爆解则要偏低很多, 即在靠近球心时气体稀疏很剧烈。文 [3] 的纯流体力学数值解也给出了爆心附近始终相当稀疏的结果。经典强爆解和纯流体力学数值解的这个结果是模型本身的缺陷造成的。

在推导控制方程时, 本文假设了空气遵守热力学理想气体关系式, 其比热比  $\gamma = \frac{4}{3}$ 。这对简化方程, 求得自模拟解是很有必要的。然而我们知道, 空气是双原子气体, 对于比热比不变的双原子气体来说,  $\gamma = \frac{7}{5}$ , 而且在爆炸近区的高温高压条件下, 空气并不满足理想气体及  $\gamma$  不变的假定。因此, 原则上应当考虑真实气体效应。但是如果引入表达式颇为冗长的真实气体状态方程, 就只能采用数值方法求解<sup>[3, 5]</sup>。为了既能利用热力学理想气体模型寻求点爆炸解析解, 又能使这个解析解适用于实际空气中的强爆炸问题, 人们通常采用这样的方法, 即选取一个适当的  $\gamma$  值, 而不改变理想气体状态方程的形式。经验表明, 在用经典的点爆炸模型求自模拟解时,  $\gamma = 1.3$  的理想气体能较好地反映早期实际空气中的爆炸现象<sup>[5]</sup>。本文取了  $\gamma = \frac{4}{3}$  后, 一方面可以把辐射内能与辐射压力的关系写成与理想气体相同的形式, 另一方面这个值与 1.3 相近。这样做既可以简化求解过程, 又得到了接近实际情况的速度分布和密度分布。因此可以认为,  $\gamma$  取为  $\frac{4}{3}$  在一定程度上反映了真实气体效应, 是对热力学理

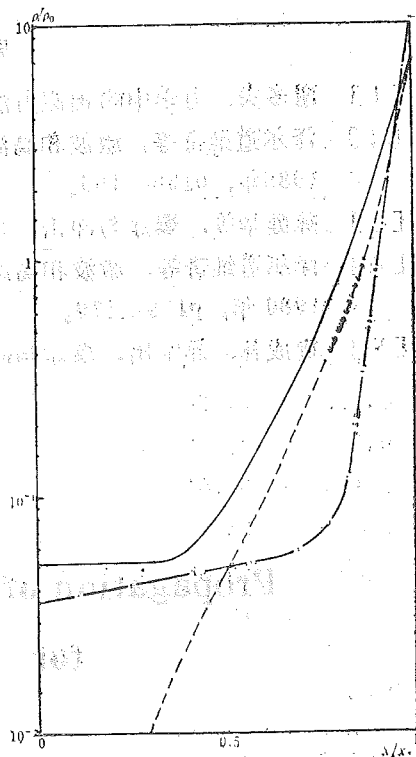


图 2 无量纲密度的分布

——本文的解; ---经典强爆解;  
- · -辐流计算的结果

想气体模型比较合理的修正。

### 参 考 文 献

- [1] 谢多夫, 力学中的相似方法与量纲理论, 科学出版社, 北京, 1982年, p235-261.
- [2] 泽尔道维奇等, 激波和高温流体动力学现象物理学(下册), 科学出版社, 北京, 1985年, p156-166.
- [3] 陈健华等, 爆炸与冲击, 1(1981), 37-49.
- [4] 泽尔道维奇等, 激波和高温流体动力学现象物理学(上册), 科学出版社, 北京, 1980年, p175-179.
- [5] 贺成林、郝宝田, 爆炸与冲击, 1(1981), 37-48.

## Propagation of Homothermal Shock Waves for Explosion in Air

Mi Zhong chun

(Department of Modern Mechanics)

With pressure and internal energy regarded as the combination of such two parts as the thermodynamically ideal gas and the radiation, based on the conservation of mass, momentum and the expression  $\partial T/\partial x=0$  for the uniform distribution of temperature, the self-similar solution is found after the approximative non-dimensionalized relation of temperature is established. The acquired parameters of the shock front are consistent with radiation hydrodynamic computational results. There is a distinct improvement in the distribution of densities and velocities of air particles in contrast with the self-similar solution of a classic strong explosion.

**Key words:** explosion in air, shock waves, self-similarity.

# 变角度扩张管中爆轰临界直径的实验研究

陈成光 李剑 戴伟民

(近代力学系)

## 摘 要

利用自制的方形爆轰管及其配套的方扩张管,在改变半扩张角 $\theta$ 及 $H_2-O_2-Ar$ 系统中Ar浓度的情况下,对爆轰临界直径 $d_c$ 进行了实验研究,得到了 $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 的关系。在 $\theta=90^\circ$ 时,基本符合 $d_c=10\lambda$ 的经验公式,当 $\theta$ 分别是 $15^\circ$ 、 $30^\circ$ 、 $45^\circ$ 时, $d_c/\lambda$ 有明显增加的趋势,其变化规律与用流管理论得到的公式 $d_c/\lambda=16.8\sin\theta$ 相吻合。文中还讨论了Ar浓度对 $d_c/\lambda$ 及临界压力 $p_c$ 的影响。

**关键词:** 爆轰, 方扩张管, 临界直径。

## 1 引言

自 Zeldovich<sup>[1]</sup>在本世纪中期提出了爆轰临界直径的概念以后,人们对它进行了深入的研究,得到了许多重要的成果<sup>[2,3]</sup>。这些成果把爆轰波胞格结构的研究与爆轰波的传播特性联系起来,即把爆轰波微观结构的研究与爆轰气体的宏观特性联系起来,对解决工程、生产、运输、安全防护等实际问题有重要的意义。

Mitrofanov和Soloukhin<sup>[4]</sup>得到了临界直径 $d_c$ 和胞格宽度 $\lambda$ 的下述关系:

$$d_c = 13\lambda \quad \sim \text{圆管}$$

$$d_c = 10\lambda \quad \sim \text{方管}$$

Knystautas<sup>[5]</sup>等人的实验给出了八种碳氢化合物在以 $N_2$ 为稀释剂的情况下其胞格尺寸 $\lambda$ 和临界直径 $d_c$ 的关系,证实了上述经验公式。

进一步的研究表明, $d_c$ 与 $\lambda$ 的关系在一定程度上受管子几何形状,爆炸气体成分等因素的影响。如刘育魁等人<sup>[6]</sup>的实验给出了下述结果:

$$3\lambda \leq d_c \leq 10\lambda$$

这里 $d_c$ 为矩形截面管的宽度, $d_c=3\lambda$ 适用于长宽比大于7的情形, $d_c=10\lambda$ 相当于长宽比为1的方形管。

本实验利用自制的方形爆轰管及其配套的方形扩张管,通过改变扩张管的角度及稀释气体的比例,研究爆轰临界直径与胞格尺寸 $\lambda$ 的关系,并对实验结果进行了分析讨论。

## 2 实验装置和方法

实验采用双层方形管，其边长为 $40 \times 40\text{mm}$ ，管体分为A、B两部分（如图1），A段长 $0.5\text{m}$ ，B段长 $4.5\text{m}$ 。两段截面相同。在A、B两段之间夹有一薄膜。在B段的末端与半锥角为 $\theta$ 的锥形扩张方管相连接。在实验中， $\theta$ 角分别为 $15^\circ$ 、 $30^\circ$ 和 $45^\circ$ 。另外，相当于 $\theta = 90^\circ$ 的扩张腔为底面半径 $300\text{mm}$ ，长 $550\text{mm}$ 的圆柱体。

实验装置除上述管体之外，还包括配气系统、测试系统及点火装置。

配气系统包括贮气罐、配气柱和气压表。

测试系统包括压电晶体探头、电荷放大器、瞬态波形存贮器、光电管、E324计数器。由计数器得到光电信号的时间间隔并由此计算波速；压电探头感受的压力信号由瞬态波形存贮器记录。

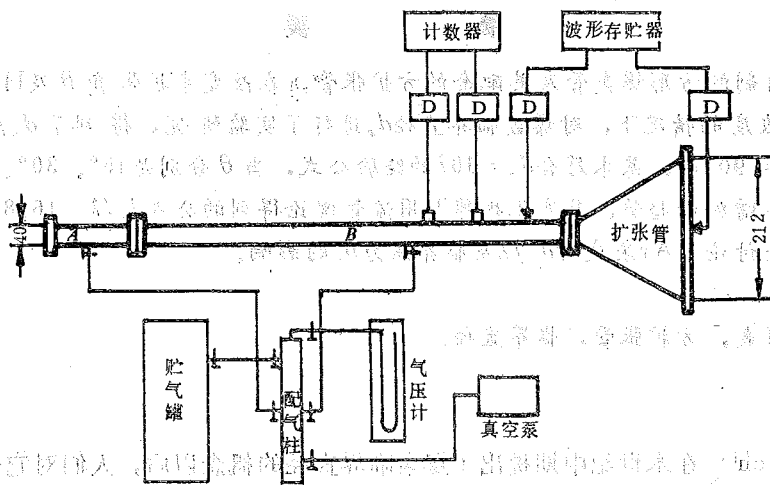


图1 实验装置

▼ 压电探头 □ 光电管 D 电荷放大器

点火装置采用电阻丝加热的方式。对于较低的初压，采用破膜法，即在管体端部的短管内充满高压 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 混合气体，长管内置被测气体。两者用薄膜隔开。

实验步骤包括在透明薄膜或铝片上用煤油蘸上烟灰，放在靠近扩张管与方管连结处附近，然后将全管抽成真空，在A、B段分别充气，进而在A段用电阻丝引爆，形成的冲击波破膜后引爆B段待测的混合气体。

爆轰波进入扩张管后熄灭与否，以波形存贮器显示的波形形状及爆速大小来判别。

改变扩张管角度、稀释度及初压，得出某种角度和稀释度下爆轰波“过”或“不过”的临界压力，重复进行，并测量胞格尺寸，最后对结果进行分析和讨论。

## 3 实验结果

实验采用三种混合气体： $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 0\% \text{Ar}$ ， $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 25\% \text{Ar}$ ， $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 50\% \text{Ar}$ 。得到了不同角度扩张管中爆轰临界压力及临界直径。实验数据列于表1。

从图2中看出,对于某个固定的 $\theta$ 角, $p_c$ 随Ar浓度 $\phi$ 的增加而增加,而且其增加的幅值也随稀释度的增加而明显增大。

从图3中看出, $d_c/\lambda$ 也随Ar浓度 $\phi$ 的增加而略有增加。当浓度较小时, $d_c/\lambda$ 对Ar浓度

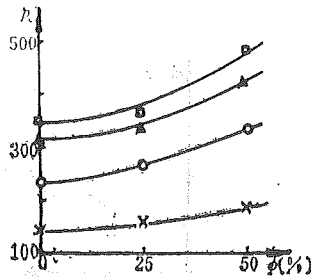


图2  $p_c$ 与Ar浓度的关系

□  $\theta = 90^\circ$  ▲  $\theta = 45^\circ$  ○  $\theta = 30^\circ$  ×  $\theta = 15^\circ$

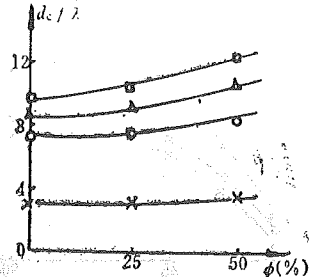


图3  $d_c/\lambda$ 与Ar浓度的关系

□  $\theta = 90^\circ$  ▲  $\theta = 45^\circ$  ○  $\theta = 30^\circ$  ×  $\theta = 15^\circ$

表1 实验数据

气体成分	半锥角 $\theta$	临界初压 $p_c$ (Torr)	胞格尺寸 $\lambda$ (mm)	$d_c/\lambda$
$2H_2 + O_2$	$15^\circ$	145	13	3.1
	$30^\circ$	240	5.4	7.4
	$45^\circ$	310	4.8	8.3
	$90^\circ$	340	4.3	9.3
75% ( $2H_2 + O_2$ ) + 25% Ar	$15^\circ$	150	14.3	2.8
	$30^\circ$	260	5.3	7.5
	$45^\circ$	330	4.4	9.1
	$90^\circ$	365	3.9	10.3
50% ( $2H_2 + O_2$ ) + 50% Ar	$15^\circ$	180	12.8	3.1
	$30^\circ$	325	4.8	8.3
	$45^\circ$	430	3.8	10.5
	$90^\circ$	470	3.2	12.4

变化不很敏感,但当Ar浓度较大时(如超过50%时), $d_c/\lambda$ 的值则随Ar浓度的增加有明显增大的趋势。此时其值比前述经验公式的值稍大(如 $\theta = 90^\circ$ 时 $d_c/\lambda = 12.4$ 稍大于10)。

图4为临界压力 $p_c$ 与角度 $\theta$ 的关系曲线。对于一定的稀释度, $p_c$ 随 $\theta$ 的增加而增加;而对于一定的 $\theta$ 角, $p_c$ 也随Ar浓度的增加而增加。

图5至图7为 $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 的关系曲线。可以看出,对于一定的稀释度, $d_c/\lambda$ 随 $\theta$ 的增加而显著增大。图中虚线为根据流管理论计算的结果。

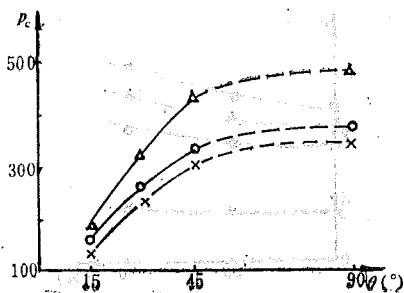


图4  $p_c$ 与 $\theta$ 的关系  
 $\Delta$  50% (2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>) + 50% Ar  
 $\circ$  75% (2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>) + 25% Ar  
 $\times$  2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>

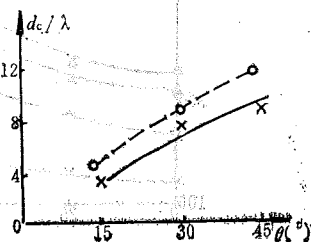


图5 2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>系统 $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 的关系  
 $\circ$  计算  $\times$  实验

#### 4 结论与讨论

(1) 方形爆轰管H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-Ar系统爆轰临界直径与胞格尺寸的关系基本符合 $d_c = 10\lambda$ 的经验公式。但在Ar浓度较大时, $d_c/\lambda$ 有增加的趋势。J. H. Lee<sup>[7]</sup>在1984年就提到在某些条件下 $d_c = 24\lambda$ 。实际上当Ar浓度很高时(如超过75%)就可能出现这种情况。

(2)  $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 的关系说明了管子几何形状对临界直径的影响。从图5~7中看出,随着 $\theta$ 的增加, $d_c/\lambda$ 的值也发生了有规律的变化。这时可以用非理想爆轰的流管理论来讨论其变化规律。

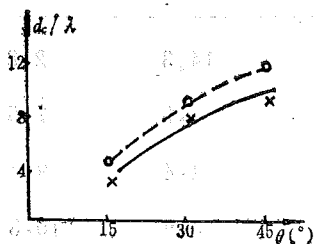


图6 75% (2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>) + 25% Ar系统 $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 关系  
 $\circ$  计算  $\times$  实验

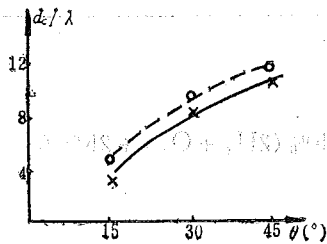


图7 50% (2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>) + 50% Ar系统 $d_c/\lambda$ 与 $\theta$ 的关系  
 $\circ$  计算  $\times$  实验

图8为流动示意图。由流管理论的基本方程可以推及波速与截面积的关系,

$$\left(\frac{D_{CJ}}{D}\right)^2 = 1 + \frac{r^2}{r+1} \left[ \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 - 1 \right]$$

其中 $\gamma$ 为气体比热比, $A$ 为流管截面积,脚标“2”表示反应区终端的值,“1”表示反应区始端的值。 $D_{CJ}$ 为爆轰CJ速度。

曲面 $AB$ 与 $DF$ 用来表示以 $O$ 为球心的球面被方形扩张管管壁所截的部分,则 $AB,DF$ 分别与 $DE,FG$ 垂直,则该处球面半径 $R_2 = \frac{d_c}{2\sin\theta} + l$ ,  $R_1 = \frac{d_c}{2\sin\theta}$ ,其中 $d_c$ 即为管径(临界直径), $l$ 为反应区宽度, $\theta$ 即扩张管的半扩张角。



考虑到扩张管中两相邻曲面的面积比可以表示为该处半径的平方比, 则有

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{R_2^2}{R_1^2} = \frac{\left(\frac{d_c}{2\sin\theta} + l\right)^2}{\left(\frac{d_c}{2\sin\theta}\right)^2} = \left(1 + \frac{2l\sin\theta}{d_c}\right)^2$$

代入上式则有

$$\left(\frac{D_{C1}}{D}\right)^2 = 1 + \frac{r^2}{r+1} \left[ \left(1 + \frac{2l\sin\theta}{d_c}\right)^2 - 1 \right]$$

取  $\gamma = 1.25$ ,  $(D_{C1} - D)/D_{C1} = 0.2^{[2]}$ , 认为化学反应在一个胞格长度  $l_c$  内已基本完成<sup>[9]</sup>, 取  $l = l_c = 1.7\lambda$ , 再假定  $\lambda/d_c \ll 1$ , 展开上式, 取一次项可得

$$\frac{d_c}{\lambda} = 16.8\sin\theta$$

图5~7中的虚线都是根据此公式计算的。

从图中看出, 计算值与实验结果不仅趋势一致, 量值也很接近。特别是随着 Ar 浓度的增加, 两者也愈加吻合。

当  $\theta = 90^\circ$  时, 实验值基本符合  $d_c = 10\lambda$  的经验公式。此时流管理论已不适用, 理论分析有待进一步探讨。

(3) 图4中看出临界压力  $p_c$  随  $\theta$  的增加而增加。当  $\theta$  小于  $45^\circ$  时,  $p_c$  随  $\theta$  的增加幅值较大, 但当  $\theta$  角大于  $45^\circ$  以后, 变化趋于平缓 (图中虚线所示)。总的变化趋势与  $d_c/\lambda$  随  $\theta$  的变化趋势一致。

在本文实验过程中, 得到了周凯元、陈志坚、王强等同志的大力支持, 特此致谢。

### 参 考 文 献

- [1] Zeldovich Ya B, et al., *Soviet Physics Technical Physics*, **1** (1956), 1689.
- [2] Edward D H, et al., *Journal of Fluid Mechanics*, **95**(1979), 79.
- [3] Knystautas R, Lee J H and Guira C M, *Combustion and Flame* **48**(1982), 63.
- [4] Mitrofanov V V, soloukhin R I, *Soviet Physics Doklady*, **9** (1965), 1055.
- [5] Knystautas R, et al., Measurement of Cell Size in Hydrocarbon-Air Mixtures and Predictions of Critical Tube Diameter, Critical Initiation Energy and Detonability Limits, 9th Inter. Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Poitiers, France, (1983).
- [6] Liu Y K, Lee J H, et al., *Combustion and Flame*, **56**(1984), 215-225.
- [7] Lee J H, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **16**(1984), 311-36.

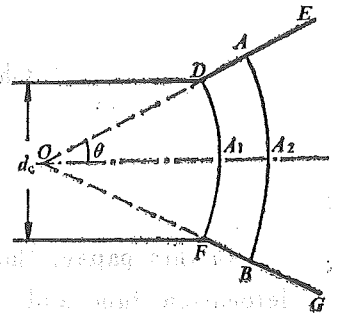


图 8 扩张管中爆轰波的传播

[8] Edwards D H, Thomas G O and Nettleton M A, *Journal of Fluid Mechanics*, **95**(1979), 79.

## Experimentals Study of Detonation Critical Diameter in Divergent Tube

Chen Chengguang Li Jian Dai Weimin  
(Department of Modern Mechanics)

### Abstract

In this paper, the detonation critical diameter is studied in a square detonation tube and a square divergent tube with varying half divergent angle  $\theta$  and the density of Ar in  $H_2-O_2-Ar$  system. The relation between  $d_c/\lambda$  and  $\theta$  is established. At  $\theta=90^\circ$ , the results coincide with the empirical formula  $d_c = 10\lambda$  approximately. The value of  $d_c/\lambda$  increases with  $\theta$  at  $15^\circ$ ,  $30^\circ$  and  $45^\circ$  respectively, and its rule of change is in agreement with the formula  $d_c/\lambda = 16.8\sin\theta$  which is got by the stream theory. The affection of the density of Ar on  $d_c/\lambda$  and the critical pressure  $p_c$  is also studied in this paper.

**Key words:** detonation, square divergent tube, critical diameter.

# H<sub>2</sub>-Air 系统的爆轰稳定性分析

李 剑 陈成光

(近代力学系)

## 摘 要

运用非平衡态热力学耗散结构理论和稳定性分析的方法,讨论了H<sub>2</sub>-Air系统的爆轰稳定性问题,得到了临界稳定条件。在此基础上估算了在化学当量比 $\phi$ 不同时该系统的爆轰胞格尺寸 $W$ ,并得到了一定初压下 $W$ 与 $\phi$ 的关系,其结果与实验基本相符。

**关键词:** 爆轰, 稳定性分析, 非平衡态, 胞格尺寸, 耗散结构理论。

## 1 引言

关于气相爆轰波的稳定性问题, J. J. Erpenbeck<sup>[1]</sup> 利用线性微扰方法, 叠加一个扰动激波, 且对非齐次项及非齐次的边界条件进行线性处理, 得到了爆轰波稳定性的判别函数。后来又发展了非线性扰动理论, 将线性稳定性分析推广到包括一些非线性项的情况。Toong<sup>[2, 3]</sup>等人利用方波模型及人工粘性方法研究了一维和二维爆轰的稳定性, 分析了横波振动周期与管径的关系, 其结果与线性稳定性分析的结果相符。另外, 孙锦山<sup>[4]</sup>应用非平衡态热力学的理论, 研究了临界爆轰波对二维扰动的稳定性问题, 得到了扰动在爆轰波结构内传播的稳定性判据, 并解释了螺旋爆轰现象。

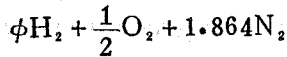
本文试图应用非平衡热力学耗散结构理论来研究H<sub>2</sub>-Air系统的爆轰稳定性问题。在此基础上估算了不同化学当量比 $\phi$ 的H<sub>2</sub>-Air系统的爆轰胞格尺寸 $W$ , 得到了一定初压下 $W$ 与 $\phi$ 的关系, 其结果与实验基本相符。

## 2 H<sub>2</sub>-Air 系统的爆轰稳定性

根据耗散结构理论<sup>[5]</sup>, 任何一种宏观有序状态的出现都可以看作是某种无序的参考态失去稳定性的结果。因此, 爆轰胞格结构可以认为是在爆燃向爆轰的转变过程中, 系统对其自身涨落的失稳而形成的。

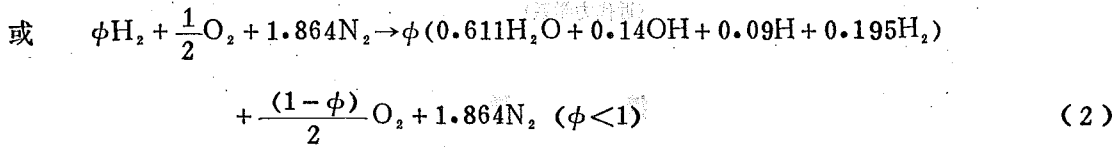
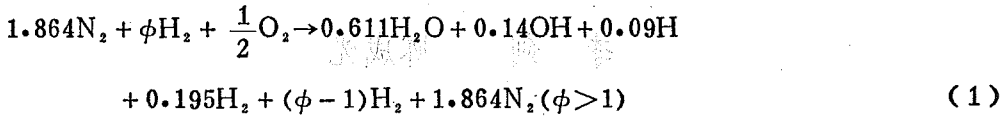
根据非平衡热力学的理论, 还可以把超熵产生 $\delta_x \mathcal{P}$ 看作系统的Lyapounov函数, 并用 $\delta_x \mathcal{P}$ 的符号来判定系统的稳定性。

对于H<sub>2</sub>-Air系统, 其成分可表示为

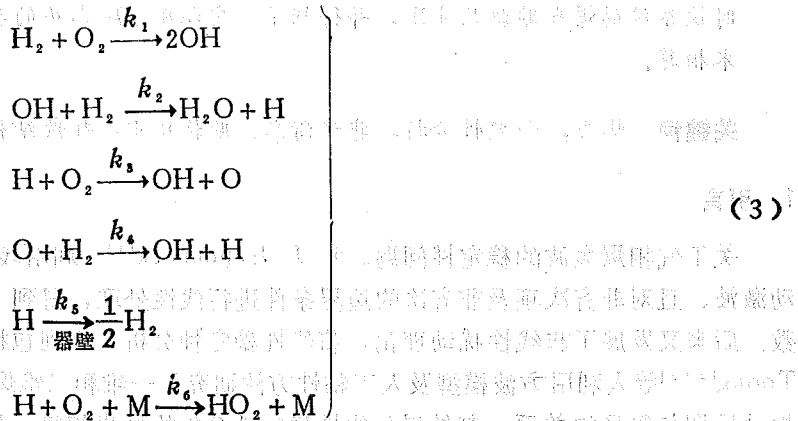


其中  $\phi$  表示化学当量比。

假定对于H<sub>2</sub>-Air系统, 其化学反应按H<sub>2</sub> +  $\frac{1}{2}$ O<sub>2</sub>系统的方式进行, 不参加反应的N<sub>2</sub>, 以及过剩的H<sub>2</sub>或O<sub>2</sub>不影响化学反应的进行<sup>[6]</sup>, 即



而对于2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>的化学反应是由许多元反应组成的<sup>[7]</sup>, 主要有



其中  $k_i (i=1, 2, \dots, 6)$  为第  $i$  个反应的速率常数,  $M$  为三分子反应的第三体。

记  $X_1 = \frac{k_1}{k_2 k_3} [OH]$ ,  $X_2 = \frac{k_1}{k_2 k_3} [H]$ ,  $X_3 = \frac{k_1}{k_2 k_3} [O]$ ,  
 $A = k_2 [H_2]$ ,  $B = k_3 [O_2]$ ,  $n = k_4 / k_2$ ,  $K = k_5 + k_6 [O_2] [M]$ ,  $\bar{A} = [H_2]$ ,  $\bar{B} = [O_2]$ ,  
 $m = [M]$ ,

则动力学方程为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial X_1}{\partial t} &= 2AB - AX_1 + BX_2 + nAX_3 + D_1 \Delta X_1 \\ \frac{\partial X_2}{\partial t} &= AX_1 - (B+K)X_2 + nAX_3 + D_2 \Delta X_2 \\ \frac{\partial X_3}{\partial t} &= BX_2 - nAX_3 + D_3 \Delta X_3 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

其中  $D_i$  为  $X_i$  成分的扩散系数。

令  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ , 求得 (4) 的均匀定态解为

$$\left. \begin{aligned} X_{1s} &= \frac{2BK}{K-2B} \\ X_{2s} &= \frac{2AB}{K-2B} \\ X_{3s} &= \frac{2B^2}{n(K-2B)} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

下面就来分析这个定态解的稳定性。

仅考虑扩散与化学反应, 超熵产生可以写为

$$\begin{aligned} \delta_x \mathcal{P} &= \int dV \left[ \sum_i \delta j_i \cdot \delta X_i \right] \\ &= \int dV \sum_i \left[ \delta j_i \cdot \delta \left( -\frac{\nabla \mu_i}{T} \right) + \delta \omega_i \cdot \delta \left( \frac{\mathcal{A}_i}{T} \right) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $j_i$ ,  $\mu_i$  分别为第  $i$  种组分的扩散流和化学势,  $\omega_i$ ,  $\mathcal{A}_i$  分别为第  $i$  个反应的速率和反应亲和势。

设系统在定态解  $X_{is}$  处某涨落的分量随时间增长, 其幅度达到宏观的量级, 即系统在定态解  $X_{is}$  处有一有限幅度的小扰动  $\delta X_i$ ,

$$X_i = X_{is} + \delta X_i \quad (j=1,2,3) \quad (7)$$

而  $j_i$ ,  $\mu_i/T$ ,  $\omega_i$ ,  $\mathcal{A}_i/T$  在定态解  $X_{is}$  附近的增量分别为  $\delta j_i$ ,  $\delta(\mu_i/T)$ ,  $\delta \omega_i$ ,  $\delta(\mathcal{A}_i/T)$ , 则超熵产生可以写为

$$\begin{aligned} \delta_x \mathcal{P} &= \int dV \sum_i \left[ -\frac{\delta X_i}{X_{is}} \frac{\partial \delta X_i}{\partial t} + \frac{1}{X_{is}} \nabla \cdot (\delta X_i \nabla \delta X_i) \right] \\ &= - \int dV \sum_i \frac{\delta X_i}{X_{is}} \frac{\partial \delta X_i}{\partial t} + \int dS \sum_i \delta X_i n \cdot \nabla \delta X_i / X_{is} \end{aligned}$$

对于零流边界, 在边界处有  $n \cdot \nabla \delta X_i = 0$ , 上述第二项积分为零, 则有

$$\begin{aligned} \delta_x \mathcal{P} &= - \int dV \sum_i \frac{\delta X_i}{X_{is}} \frac{\partial \delta X_i}{\partial t} \\ &= - (K-2B) \int dV \left( \frac{\delta X_1}{2BK} \frac{\partial \delta X_1}{\partial t} + \frac{\delta X_2}{2AB} \frac{\partial \delta X_2}{\partial t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{n \delta X_3}{2B^2} \frac{\partial \delta X_3}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

根据 Lyapounov 稳定性定理, (8) 式大于零时系统渐近稳定, 小于零时系统不稳定, 等于零时系统临界稳定。

由 (8) 式可以得到系统临界稳定的条件为

$$K = 2B \quad (9)$$

或

$$k_s + k_s \bar{B} m = 2k_s \bar{B} \quad (10)$$

另外, 利用线性微扰的方法, 即假定在定态解  $X_{is}$  处有一微扰动  $x_i$ 。

$$X_i = \bar{X}_i + x_i \quad x_i \ll \bar{X}_i \quad (11)$$

可以求得方程组 (4) 有临界稳定解的条件为

$$D_1 D_2 D_3 k^6 + [n A D_1 D_2 + (K + B) D_1 D_3 + A D_2 D_3] k^4 + (n A K D_1 + n A^2 D_2 + A K D_3) k^2 + n A^2 (K - 2B) = 0 \quad (12)$$

(12) 式有非负的根  $k^2$ , 必须

$$K - 2B \leq 0 \quad \text{或} \quad K \leq 2B \quad (13)$$

此即临界稳定条件, 也可以写为

$$k_3 + k_0 \bar{B} m \leq 2k_3 \bar{B} \quad (14)$$

### 3 H<sub>2</sub>-Air 系统胞格尺寸与化学当量比 $\phi$ 的关系

在 (12) 式中  $k$  为扰动 Fourier 分量的波数, 临界稳定时的扰动波长  $\lambda = \frac{1}{k}$  即可作为胞格尺寸  $W$ . 因此求  $W$  就归结为解方程 (12) 求  $k^2$ .

为了求 (12) 中的各系数,  $P, \rho$  可取 C-J 参数  $P_{CJ}, \rho_{CJ}$ , 而  $T$  取使反应速度  $\omega$  为最大值时的温度  $T_m$ .  $T_m$  由下式求得<sup>[7]</sup>:

$$2T_m^2 - \frac{E}{R} T_m - T_i \frac{E}{R} = 0 \quad (15)$$

取  $\gamma_0 = 1.4, \gamma = 1.22$  C-J 参数为

$$\left. \begin{aligned} \frac{V_i}{V_0} &= \frac{2\gamma(1 + \gamma_0 M_0^2)}{2\gamma_0(\gamma + 1)M_0^2} \\ \frac{P_i}{P_0} &= 1 + \gamma_0 M_0^2 \left(1 - \frac{V_i}{V_0}\right) \\ \frac{T_i}{T_0} &= \frac{P_i V_i}{P_0 T_0} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

其中  $M_0^2$  由下式确定

$$1.317M_0^4 - \left(0.919 \frac{Q_r}{P_0 V_0} + 0.415\right) M_0^2 + 1 = 0 \quad (17)$$

$Q_r$  为单位质量反应物的反应热.

取动力学参数为<sup>[7]</sup>

$$\left. \begin{aligned} k_2 &= 4.21 \times 10^6 \sqrt{T_m} e^{-41800/RT_m} \\ k_3 &= 2.56 \times 10^6 \sqrt{T_m} e^{-75240/RT_m} \\ k_4 &= 1.2 \times 10^5 \sqrt{T_m} e^{-25080/RT_m} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

由统计力学知, 两种组分 a, b 的互扩散系数为<sup>[8]</sup>

$$D_{a,b} = D_{a,b}^0 \frac{\rho^0}{\rho} \left(\frac{T}{T^0}\right)^{1/2}$$

其中上标 0 表示标准状态下的量.

$$D_{a,b}^0 = \frac{3}{8} \left[ \frac{RT^0}{2\pi} \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right) \right]^{1/2} \frac{1}{(\gamma_a + \gamma_b)^2 \rho^0 N_a} \quad (19)$$

其中  $M_a$ ,  $\gamma_a$  分别为组分 a 的分子量及分子半径,  $N_a$  为 Avogadro 常数。

假设对所考虑的系统都在爆炸界限内且远离爆炸界限, 则有

$$K \ll 2B \quad (20)$$

因此可忽略 (12) 中含  $K$  的项。于是取  $T_0 = 300^\circ\text{K}$ , 由上述参量值代入 (12) 式可求得不同的  $\phi$  值时的扰动波数  $k$ , 进而可得到扰动波长  $\lambda$  和胞格尺寸  $W$ , 其结果为

$$W = \frac{K\phi}{P_0} \quad (21)$$

其中  $W$  的单位取 mm,  $P_0$  的单位取 Torr。不同的  $\phi$ ,  $K_\phi$  不同。

$$\left. \begin{array}{l} \phi = 1 \quad K_\phi = 5159 \\ \phi = 2 \quad K_\phi = 10021 \\ \phi = 3 \quad K_\phi = 28654 \\ \phi = 0.5 \quad K_\phi = 23497 \end{array} \right\} \quad (20)$$

在图 1 中给出了  $P_0 = 760\text{Torr}$  时, 胞格尺寸  $W$  与当量比  $\phi$  的关系曲线。

#### 4 结论与讨论

1) 本文利用非平衡态热力学耗散结构的理论来研究  $\text{H}_2$ -Air 系统的爆轰稳定性问题, 得到了临界稳定的判别条件。该条件与用线性微扰方法得到的结果一致, 并与有关爆炸极限的理论相符<sup>[9]</sup>。

2) 在稳定性分析的基础上, 估算了化学当量比  $\phi$  不同时  $\text{H}_2$ -Air 系统的爆轰胞格尺寸  $W$ , 得到了一定初压下  $W$  与  $\phi$  的关系, 如图 1 所示。图中还给出了文献[10]的实验曲线。从图中可看出, 理论曲线与实验曲线的趋势相当符合。

3) 图 1 中理论曲线与实验曲线趋势一致, 但量值上有些误差。这是由于在求得关系式 (21) 时曾作了若干假设, 而且动力学参数  $k_2, k_3, k_4$  的值也不十分准确, 不同的文献给出的值相差甚远, 但与其他理论相比  $W$  的误差不是很大<sup>[11]</sup>, 在  $P_0$  为 1 个大气压时  $\Delta W = 18\%$ 。

总的来看, 用耗散结构理论来分析  $\text{H}_2$ -Air 系统爆轰稳定性条件及研究胞格尺寸与化学当量比  $\phi$  的关系, 其结果与实验基本相符。

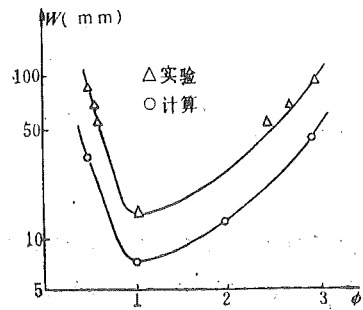


图 1 胞格尺寸  $W$  与当量比  $\phi$  的关系

## 参 考 文 献

- [1] Erpenbeck J J, *Phys. Fluids*, **5** (1962), 604—614.
- [2] Toong Tauyi, *Combustion and Flame*, **63** (1986), 191—207.
- [3] Toong Tauyi, *Combustion and Flame*, **45** (1982), 67—94.
- [4] 孙锦山, 爆炸与冲击 1982年, No. 1, 33—49.
- [5] 李如生, 非平衡态热力学和耗散结构, 清华大学出版社, 1986年, Ch. 2—3.
- [6] Eisen C L, et al., *Combustion and Flame*, **4** (1960), 137—147.
- [7] B.H. 康德拉季耶夫著, 刘巽俊译, 气体化学反应动力学, 科学出版社, 1963年 Ch. 9—10.
- [8] Levine I N 著, 李芝芬等译, 物理化学, 下册, 北京大学出版社, 1987年, Ch.16.
- [9] J. 尼古拉斯著, 吴树森译, 化学动力学—气体反应的近代综述, 高等教育出版社, 1987年, Ch. 7.
- [10] Lee J H, *American Chemical Society*, **97** (1984), 119—150.
- [11] Fickett W & Davis W C *Detonation*, Univ. of California Press, 1979, 349.

## A Stability Analysis of Detonation of the H<sub>2</sub>-Air

Li Jian      Chen Chengguang

(Department of Modern Mechanics)

### Abstract

A stability analysis of the detonation of H<sub>2</sub>-Air is made by the theory of dissipative structure and by way of stability analysis in this paper, and the criterion for critical stability is obtained. The width of cellular structure of H<sub>2</sub>-Air system with various stoichiometry  $\phi$  is estimated in the above discussion, and the relation between  $W$  and  $\phi$  under a given primary pressure is established. The conclusion is in approximate agreement with the experiment result.

**Key words:** detonation, stability analyses, state of non-equilibrium, cell size, theory of dissipative structure.



# 爆破破岩过程及破碎判据

陈保基

(近代力学系)

## 摘 要

应用二维弹性有限元数值计算方法,计算和分析了岩石爆破中的动应力场,得出岩石破裂是应力波和爆炸气体相互作用的结果。结论与实际情况相符。还指出,传统理论仅建立在一维应力波传播基础上,故而它不能解释二维和三维的工程实际问题。

**关键词:** 爆破破岩, 破碎判据, 应力波理论。

## 1 前言

研究岩石爆破破碎过程对实际工程具有重要的指导意义。特别是预裂、光面爆破等新技术在工程中推广应用以来,各国学者对破碎机理作了很多研究。传统的理论是用应力波传播理论解释的<sup>[1]</sup>。该理论认为在多孔瞬时爆炸的情况下,由于应力波传播及叠加的结果,在相邻两孔联心线的中点首先拉裂,裂缝向两孔方向发展。另外在两孔45°线相交点附近区域,应力波叠加后应力被消除,产生一个无应力区域。这一理论在实际工程及模型试验中没有得到证实。

本文采用二维有限元数值计算方法,计算和分析了岩石爆破时的动应力场,提出了岩石破碎过程的物理图象。计算模型假定岩石是均质的各向同性的线弹性体,破碎判据采用第一强度理论。计算结果表明,岩石破裂是应力波和爆炸气体相互作用的结果。同时指出,传统理论仅在一维条件下成立,而一维爆破在实际中是不存在的,所以传统理论的解释必然与实际情况相矛盾。

## 2 数值计算

### 2.1 弹性模型

在爆炸荷载作用及把岩石作为各向同性的均匀体条件下,岩石可以近似地作为线弹性体是合理的,其主要论据<sup>[2]</sup>有:

①在很高的爆炸冲击压力下,岩石的压力和体积变形之间的关系曲线( $p-v$ 曲线)大致成直线关系。这表明除了在装药近旁外,其它区域可视为弹性波。

②在爆炸冲击压力作用下，岩石可被看作为脆性材料。一般来说，脆性材料在冲击荷载作用下具有很高的弹性极限。

③由已知试验资料可知，岩石在动压力作用下，其动态弹性模量比静态弹性模量大。另外由于加载速度不同，岩石的非弹性变形不同，加载速度快，非弹性变形也愈小。

## 2.2 破碎判据

岩石在爆炸荷载作用下，可以认为其破碎主要是由拉伸应力引起的，理由是：

①岩石在动压力作用下，强度虽然提高，但它的动抗拉强度和静抗拉强度相接近。在静态条件下，岩石的静抗拉强度在抗压强度低得多。那末，在动态情况下，其抗拉强度比抗压强度更低，因此拉伸破坏很容易<sup>[2]</sup>。

②炸药放在一个厚壁圆筒内爆炸后，可以观察厚壁圆筒内发生径向裂缝。这主要是由拉伸应力引起的，可以用应力波传播理论进行解释。在钻孔爆破中（例如开采石材），破裂面都是沿着炮孔连线，而且破裂面上可以清楚地看到一半炮孔的现象。除了拉伸破坏外，没有任何其它方法可以解释。

③从计算爆炸动应力场可知，在炮孔联心线上主拉应力的作用方向几乎垂直于联心线的。这也可以证明②中所说的论点，沿炮孔连线形成的破裂面是由拉应力破坏的。

根据上述论点，岩石破碎的判据应是第一强度理论，也就是极限应力理论。由三个主应力 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 可以求出最大主应力的数值及作用方向。只要最大主拉应力超过岩石的动抗拉强度，岩石就被拉裂。所以，不管应力状态多么复杂，最大主拉应力是岩石破碎的判据。

在装药近旁，这个判据可能不适用。如果装药是偶合装药，由于爆炸形成的高温高压气体作用在炮孔壁上，可将岩石压碎形成一个破碎区。破碎区的大小是由岩石性质及作用荷载的强度决定，在破碎区内这个判据当然不能用。但是当非偶合装药和岩石强度比较高的条件下，爆炸压力不足以压碎岩石，那末可能没有这个破碎区。

当存在自由面时，自由面附近的破裂仍然是由拉伸引起的，因为压力波到达自由面时反射波是拉伸波，而且反射面附近的抗拉强度比无限介质中要小。在此，可以形成漏斗。

## 2.3 计算和实例

有了弹性模型及破碎判据的假定，可以用数值计算方法来计算岩石在爆炸荷载作用下的动应力场。又根据动应力分布状态，得到岩石破碎过程的一些结果。我们编制了一个有限元二维弹性动态计算机程序，采用无条件稳定的Willson- $\theta$ 法直接积分，在程序中引入了阻尼边界，因此可以计算无限介质或半无限介质中的爆炸问题。

有限元系统中的动力分析的平衡方程为

$$[M]\ddot{U} + [C]\dot{U} + [K]U = R, \quad (1)$$

式中， $[M]$ 、 $[C]$ 、 $[K]$ 分别为质量、阻尼和刚度矩阵， $R_i$ 为外荷载向量。 $U$ 、 $\dot{U}$ 和 $\ddot{U}$ 分别为有限元集合体的位移、速度和加速度向量。方程（1）是一个二阶线性微分方程组，我们采用直接积分法求解这个方程组，可以得到较好的效果。

方程（1）中除 $R_i$ 外的其它量，都可以用一定方法形成。但是对于外荷载向量 $R_i$ ，也就是作用炮孔壁上的爆炸荷载，是一个重要而复杂且不易解决的量。因为这涉及到爆炸气体、空气和岩石介质相互作用的问题。我们根据多年研究，提出下面三种计算模型：

(i) 假定装药在炮孔中爆炸类似于密闭容器中爆炸。爆炸气体对孔壁作用的压力按燃烧

压力计算，计算公式为

$$p = \frac{p_0 V_0 T}{273 \left( \frac{1}{\Delta} - 0.001 V_0 \right)} \quad (2)$$

式中， $p_0$ 为标准大气压， $\Delta$ 为装药装填密度， $T$ 为炸药的爆温， $V_0$ 为炸药的爆容。计算得到的燃烧压力  $p$  可作为突加载作用在炮孔壁上进行计算。

(ii) 冲击波压力假设 在非偶合装药条件下，炸药爆轰完成后，爆炸气体流入空气中形成冲击波。入射冲击波遇到孔壁后反射形成反射冲击波，作用在孔壁上的荷载可以假定是反射波的压力，入射波和反射波的压力可以按照一般的经验公式计算。

(iii) 可压缩孔壁假设 前面二种假设都是假定炮孔壁是刚壁，但实际情况是炮孔壁是随着爆炸气体的膨胀而变化的，因而作用在壁上的压力也是随时间变化的。根据爆轰原理及应力波理论，用特征线方法求解此问题，可以得到满意的结果。如果使用 2 号铵梯炸药，装药的非偶合系数为 2，则按此法计算可得到指数拟合曲线 ( $p-t$  曲线)，其表达式为

$$p = p_0 \exp(-2321.8t) \quad (3)$$

式中， $p_0$ 为作用在孔壁上的初始压力，相等于从公式 (2) 中计算所得的燃烧压力。

按照以上方法，我们用各种不同条件进行了计算，得到了大量的数据，其中一部分已发表在文献 [3]、[4]、[5] 中。现举一例说明。

在图 1 中，岩石为大理岩，尺寸为  $80 \times 160 \text{cm}^2$ 。三孔孔径均为  $40 \text{cm}$ ，孔距  $32 \text{cm}$ ，同时爆炸。装药非偶合系数为 2，作用荷载为突加载  $1.9 \times 10^9 \text{dyn/cm}^2$ 。按平面应变计算，因为对称关系，只取四分之一即可。有限元分割为 439 个三角形常应变单元，共 255 个节点。

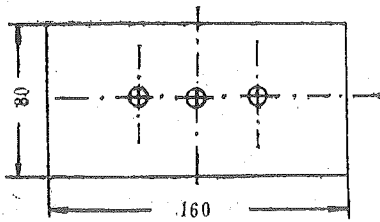


图 1 岩块计算示意图

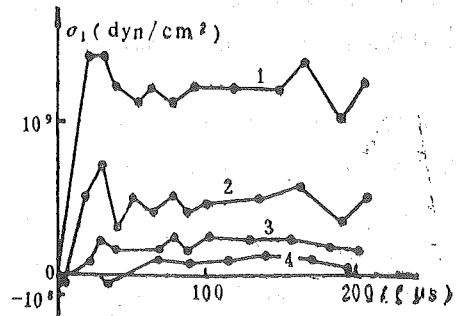


图 2 炮孔联心线上各点主拉应力动态应曲线

主要计算在炮孔联心线上诸点最大主拉应力的动态响应曲线，如图 2 所示。曲线 1、2、3、4 分别表示距中间炮孔中心为 2、4、8、16cm 处诸点的响应曲线。其中曲线 4 表示联心线中点的响应曲线。

### 3 破碎过程

分析计算结果，我们提出以下几种不同爆破条件下岩石破碎过程的物理图象。

**单孔爆破** 此时岩石的破碎过程与前面提到的厚壁圆筒相似。在装药近旁可能产生一个破碎区，在破碎区外产生径向裂缝。因为这里的岩石受到压力波强烈的径向压缩，产生径向运动，因而导致岩块的扩张，引起环向拉伸，也就是环向产生拉应力，把岩块拉裂产生径向

裂缝。同时爆炸气体流入裂缝，像尖劈一样使裂缝进一步发展。毫无疑问，这里的裂缝开始发生在孔壁，然后向外传播。

**多孔爆破** 例如由一排药孔同时爆炸，那末由各孔产生的径向裂缝在两孔间贯通而破裂。另外，按应力波传播理论，当药孔爆炸后，压力波从孔壁向外传播，两孔相向传播的压力波相互交会形成新的应力场。由前面算例可知，最大主拉应力的响应曲线的点距药孔愈近，其曲线位置愈高（见图2）。另外，由计算可知，最大主拉应力的方向几乎垂直于联心线。由此，可以认为，裂缝开始发生在药孔边上，然后向联心线方向发展。同时爆炸气体渗入裂缝中并加快了裂缝的发展。因此，当爆炸荷载具有一定强度时，岩石将沿联心线被拉裂。这一点在实际工程中被证实。

**当药孔之间存在空孔时** 计算表明，在空孔附近有明显的应力集中，这也可用应力波传播理论解释。因为由药孔发出的压力波到达空孔壁上反射形成拉伸波，如果这一拉伸波有足够强度，空孔将被拉裂，起到导向作用，又名导向孔。这在实际工程中经常遇到的。事实上，装药孔本身亦起到导向作用，所以在预裂、光面爆破中预裂面总是沿着预裂孔的。

#### 4 讨论

瞬时多孔爆破的传统理论是按照应力波传播理论来解释岩石破碎机理的<sup>[1]</sup>，主要有二个基本要点。我们从计算结果表明，这二个基本要点可能是不存在的。

传统理论认为，压力波从药孔相向传播，在联心线中点相遇叠加成二倍于单孔时的应力，因而认为岩石的破裂从这中点开始然后向两孔方向发展。这种解释是不符合实际情况的，因为这仅在一维条件下成立，一维爆破在实际工程中是不存在的。在二维和三维条件下，由于应力波的扩散作用，应力波叠加后，不是联心线中点上拉应力达到最大（见图2），而是裂缝开始发生在药孔边上，然后向外发展。这一点已由计算证明，在实际工程中也确是这样的。

传统理论认为在两药孔 $45^\circ$ 方向相交处存在一个各向同性区，因为这个区域内由左右孔传播来的应力波正好被抵消，所以这个区域内应力很小，又称应力消除区。爆破后大块岩石主要产生在这个区域。经过计算研究表明，根本不存在应力被消除的这个区域。我们作了单孔和双孔爆炸计算并作了比较，证明在这个区域内的主拉应力当双孔爆炸时比单孔爆炸大得多。我们认为，这种错误结论也是把一维应力波传播理论用到二维、三维条件下引起的。所以我们有必要重新认识大块岩石发生的原因，这点在开矿中特别重要。

#### 参 考 文 献

- [1] Josef H, The Dynamics of Explosion and Its Use, Elsevier Scientific Publishing Company, New York, 1979, p317.
- [2] A.H. 哈努卡耶夫著，刘殿中译，矿岩爆破物理过程，冶金工业出版社，北京，1980年，p3.
- [3] 陈保基、周昕清，土岩爆破文集（第二辑），冶金工业出版社，北京，1985年，p41.
- [4] 陈保基、朱瑞赓等，爆破，12（1987），1.
- [5] Chen Baoji, Zhu Ruigeng, Second International Symposium on Rock

Fragmentation by Blasting, Society for Experimental Mechanics, Bethel,  
1987, p1.

## The Process of Rock Fragmentation by Blasting and the Breaking Criterion

Chen Baoji

*(Department of Modern Mechanics)*

### Abstract

The numerical method of finite elements of two dimension elasticity is used to calculate and analyse the dynamic stress field during rock blast in this paper, and it is drawn from this that the rock fragmentation is the result of the interaction between stress waves and blasting gas. The conclusion is well in accord with practice. This paper also points out that the traditional theory, which is based on the propagation of one dimension stress waves, can not be used to explain the problem of two or three dimensions in practical engineering.

**Key words:** rock fragmentation by blasting, breaking criterion, theory of stress waves.

# 岩体破碎机理的探讨

胡时胜

(近代力学系)

## 摘 要

根据弹塑性动力学的基本理论,探讨了岩体介质高速度变形过程及炮孔周围应力变化情况,认为建立在静力学基础上的一些岩体破碎理论是有缺陷的,需要修正。另外,文中提出的刚塑性动力学模型也可作为岩体破碎机理新的理论依据。

**关键词:** 岩体破碎机理, 弹塑性动力学模型, 刚塑性动力学模型。

## 1 前言

岩体爆破是一个十分复杂的物理过程。一方面,炸药爆破对岩体的作用是一个高温、高压及高速变形的过程;另一方面,岩体本身结构是非均匀的(节理,裂隙等),其本构关系也十分复杂。因此,人们至今不能透彻地了解岩体的爆破破碎机理,提不出一个完整而系统的爆破理论作为岩体破碎的定性分析和定量计算的依据。

目前,国内爆破界关于岩体破碎机理大致可归纳为爆炸气体产物膨胀压力、应力波反射破坏及爆炸气体膨胀压力和应力波共同作用等三种理论<sup>[1]</sup>。本文试图从弹塑性动力学(应力波)基本理论出发,对岩体破碎机理作一些探讨。

## 2 岩体破碎的弹塑性动力学分析模型

岩体爆破是个高速变形过程,爆炸载荷是以波的形式向外传播。本节着重讨论由球形(点)药包产生的球面波在均匀岩体介质中的传播规律,柱形(条)药包产生的柱面波问题与球面波问题类似,在此不作具体讨论。

由于介质运动的球对称性质,在球坐标  $r, \theta, \phi$  中(参见图)只有径向位移  $u(r, t)$  为非零位移分量,应力、应变及速度等都只是球半径  $r$  和时间  $t$  的函数,与  $\theta$  和  $\phi$  无关。它们是

$$\begin{aligned} \epsilon_r(r, t) &= \partial u / \partial r, & \epsilon_\theta(r, t) &= \epsilon_\phi(r, t) = u/r \\ \sigma_r(r, t), & & \sigma_\theta(r, t) &= \sigma_\phi(r, t) \\ v(r, t) &= \partial u / \partial t \end{aligned} \quad (1)$$

为确保位移  $u(r, t)$  是个单值连续函数,  $\epsilon_r$ 、 $\epsilon_\theta$  和  $v$  之间应满足相容关系,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial t} &= \frac{\partial v}{\partial r} \\ \frac{\partial \varepsilon_\theta}{\partial t} &= v/r \end{aligned} \quad (2)$$

此即控制介质运动的连续方程或质量守恒方程。

根据径向的动量守恒条件，并略去高阶小量，可得

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{2(\sigma_r - \sigma_\theta)}{r} = \rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} \quad (3)$$

式中  $\rho_0$  为介质的初始密度。上式为控制介质运动的运动方程或动量守恒方程。

为了便于问题的分析讨论，假定外加载荷小于弹性屈服限，岩体介质尚处于弹性状态，并假定其本构关系可用最简单的广义虎克定律表示：

$$\begin{aligned} \sigma_r + 2\sigma_\theta &= 3K(\varepsilon_r + 2\varepsilon_\theta) \\ \sigma_r - 2\sigma_\theta &= 2G(\varepsilon_r - \varepsilon_\theta) \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $K$  为介质的体积模量， $G$  为介质的剪切模量。方程 (4) 和 (2)、(3) 一起构成了岩体介质球对称运动的控制方程组，可采用特征线方法、Fourier 变换方法等求解。

若岩体介质原处于静止、未变形，运动的初始条件可表示为

$$\begin{aligned} u(r, 0) &= 0 & v(r, 0) &= 0 \\ \sigma_r(r, 0) &= \sigma_\theta(r, 0) & &= 0 \end{aligned} \quad (5.1)$$

球腔内的炸药爆炸，作用于球壁上的载荷  $p_0$ 。如图 2 所示，运动的边界条件可表示为

$$\sigma_r(a, t) = p_0 \quad (5'')$$

式中  $a$  为球腔内壁半径。顺便说一下，文中的应力、应变均以压为正，以拉为负。

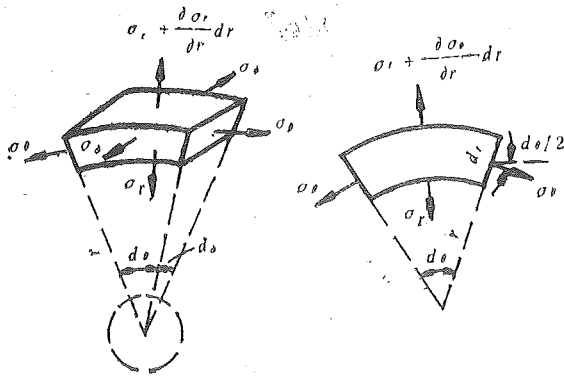


图 1

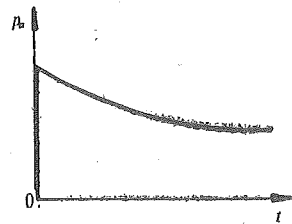


图 2

利用初始边界条件求解控制方程组，可得到介质中传播的弹性球面波波速为

$$c_L = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}G}{\rho_0}} \quad (6)$$

波阵面上的径向应力  $\sigma_r$  和横向应力  $\sigma_\theta$  分别为

$$\sigma_r = \frac{p_0 a}{r}$$

$$\sigma_{\theta} = \frac{\nu}{1-\nu} \frac{p_0 a}{r} \quad (7)$$

式中  $\nu$  为介质的泊松比。(7) 式表明: (i)  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  与球半径  $r$  成反比; (ii)  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  处于相同的应力状态, 均为压应力。这两点与静力分析结果不同。弹性力学给出了厚壁球在内压  $p_0$  作用下的应力分布值, 即 Lamé' 解,

$$\sigma_r = \frac{p_0 a^3 (b^3 - r^3)}{r^3 (b^3 - a^3)}$$

$$\sigma_{\theta} = -\frac{p_0 a^2 (b^3 + 2r^3)}{2r^3 (b^3 - a^3)} \quad (8)$$

式中  $b$  为厚壁球的外半径。(8) 式中的  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  是与  $r^3$  成反比, 而且  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  是处于不同的应力状态,  $\sigma_r$  为压应力,  $\sigma_{\theta}$  为拉应力。

波阵面通过之后, 一方面是由于球面扩散的后果, 另一方面是由于球腔内爆炸载荷的衰减影响,  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  的值会很快降下来, 其中  $\sigma_{\theta}$  值下降得更迅速, 并转变为拉应力, 在球腔孔壁附近, 其拉应力的幅值甚至于超过了静力分析的结果。图 3 给出了  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  在三个位置 ( $r = a, 2a, \infty$ ) 上的应力时程曲线<sup>[3]</sup>。计算中仅考虑了球面扩散, 尚未计及爆炸载荷的卸载波作用, 即假定球腔内的爆炸载荷  $p_0$  为突加恒值, 并等于  $p_0$ 。图中的坐标均采用无量纲量,

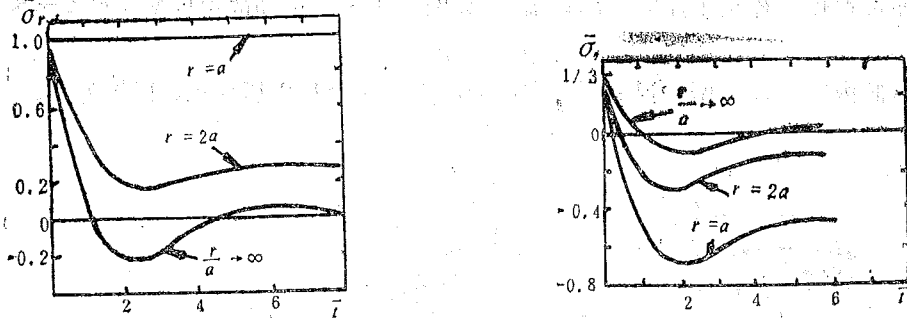


图 3  $\sigma_r$  和  $\sigma_{\theta}$  在三个位置上的应力时程曲线

其中纵坐标为  $\bar{\sigma}_r \left( = \frac{r\sigma_r}{ap_0} \right)$  和  $\bar{\sigma}_{\theta} \left( = \frac{r\sigma_{\theta}}{ap_0} \right)$ , 横坐标为  $\bar{t} \left( = \frac{c_L t}{a} - \frac{r-a}{a} \right)$ 。

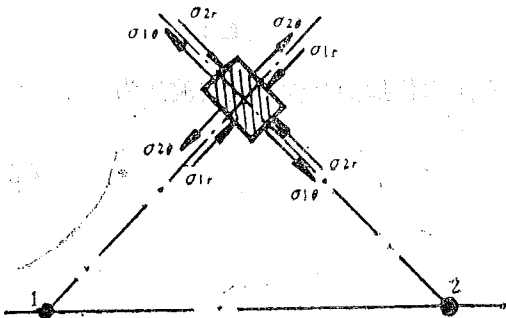


图 4

当球腔内壁作用的爆炸载荷足够大时, 岩体介质处于弹塑性状态或弹粘塑性状态。有关弹塑性波或弹粘塑性波问题的分析与弹性波问题类似, 只是介质的本构方程更复杂一些, 在此不作具体讨论。

根据爆炸气体产物膨胀压力破坏理论, 爆炸气体产物迅速膨胀, 在产生径向压应力的同时会衍生出横向拉应力, 并因此产生径向裂隙。作者认为这一破坏理论中所说的“在产生径向压应力的同时会衍生出横向拉应力”仍采用



了弹性力学的结果,属于静力学的分析方法,因此不应该用于爆炸加载的情况。或者说,上述这种说法至少在爆炸的开始阶段是不合适的。只有在波阵面扫过之后几十微秒乃至几百微秒,由于球面扩散效应以及球腔内爆炸压力的衰减影响,横向压应力才会转变为横向拉应力,这时才可以近似地采用静力学的分析方法。另外,在讨论成组药包爆破对岩体的破坏作用时,根据上述破坏理论所提出的如图4所示的分析模型<sup>[2]</sup>也是建立在“在产生径向压应力的同时会衍生出横向拉应力”这一基础上,因此,由此而得出的在两药包之间某区域出现应力降低区的结论也是不符合动力学分析的结果。

事实上,瑞典学派的径向破碎理论<sup>[4]</sup>为我们提供了较确切的解释。该理论认为,当球腔内的爆炸载荷以波的形式向四周传播时,其横向应力一开始是压缩的,随后很快转变为拉伸的,在靠近球腔(炮孔)处的拉应力幅值甚至超过最初的压应力幅值。由于岩石的抗拉强度远小于抗压强度,因此,在这样的横向拉应力作用下,产生了明显的径向裂缝。

### 3 岩体破碎的刚塑性动力学分析模型

通常,作用于球腔内壁  $r = a$  的爆炸载荷远大于岩体的弹性屈服限,因此球腔周围岩体的塑性变形也远大于它的弹性变形。于是我们可忽略弹性变形影响,将岩体介质按刚塑性模



图 5

型处理,如图5(b)所示,其本构方程则为

$$\epsilon_r + 2\epsilon_\theta = 0 \quad (9')$$

$$\sigma_r - \sigma_\theta = \pm Y \quad (9'')$$

其中(9')式来源于塑性体积不可压假定,(9'')式为塑性屈服条件, $Y$ 为常数,这里已作了理想塑性的假定。方程(9)与(2)、(3)一起构成了刚塑性介质运动的控制方程组。求解这一控制方程组并利用初始边界条件,可得

$$\sigma_r = p_0 - 2Y \ln \frac{r}{a} - \rho_0 a \left(1 - \frac{a}{r}\right) \frac{dv(a,t)}{dt} \quad (10)$$

$$\sigma_\theta = -Y + \sigma_r$$

由于爆破初期的  $p_0$  远大于  $Y$ ,因此在相当大的半径范围内,最初时刻的  $\sigma_r$  和  $\sigma_\theta$  均为压应力,这也不同于静力学的分析结果。随着球腔内爆压  $p_0$  的衰减,随着球半径  $r$  的增加,由(10)式表明,  $\sigma_r$  和  $\sigma_\theta$  的值下降,其中  $\sigma_\theta$  首先转变为拉应力。只有当拉应力超过介质的抗拉强度时,裂纹才会产生,只有当拉应力区扩展到整个区域,球体才会破碎。在这里,  $p_0$  的衰减

是由于爆炸后的爆炸气体经历了膨胀过程,  $r$  的增加则意味着拉应力最初是在远处出现, 裂缝应该由外向里发展. Taylor<sup>[5]</sup> 在研究圆管状弹壳的破碎问题时, 证实了这一分析. 他利用高速摄影观察到弹壳首先在外壁处出现轴向裂纹(横向拉应力  $\sigma_\theta$  所致), 随着弹壳膨胀, 裂纹口逐渐加宽并向中心延伸, 直到管径胀大到原来的两倍左右, 裂纹才穿透内壁而导致弹壳破碎. 岩体的破碎也应该有类似的现象. Johansson 等人拍摄的闪光照片表明, 破碎区是从离开炮孔一定距离开始的, ……可能在实际上就根本没有和炮孔连在一起. Duvall 和 Atchison 也证明了, 即使在形成漏斗时, 气体也没有穿透岩石. 在他们的漏斗试验中, 所有的漏斗都是在没有爆炸气体通过漏斗区逸出的情况下形成的<sup>[4]</sup>. 上面两个实验事实表明裂纹并不在炮孔近处形成, 而是在相隔一段距离之后出现. 这一现象也证明了刚塑性动力学模型的有效性.

#### 4 结论

国内诸多的岩体破碎理论为我们分析岩体破碎机理提供了理论根据. 但是这些理论中, 有一个观点是需要修正的, 因为这一观点仍采用了静力学的分析结果, 认为产生径向压应力的同时会衍生出横向拉应力. 然而这一观点是不符合动力学的分析结果, 因此也不符合岩体爆破的实际情况. 事实上, 岩体爆破的最初阶段, 波阵面上的径向应力  $\sigma_r$  和横向应力  $\sigma_\theta$  都是压应力, 只是在若干时间(几十微秒至几百微秒)之后, 由于球面扩散以及球腔内爆压的衰减, 横向应力  $\sigma_\theta$  才转变为拉应力. 只有在这之后, 那些基于静力学分析结果的岩体破碎理论才是有效的. 由于这些理论仅考虑了岩体爆破的后期效应, 而忽略了岩体爆破最初阶段冲击波的作用, 因此是不完全的, 应予以修正.

刚塑性动力学分析模型, 简单明了, 并且为实验所证实, 因此也可以作为新的岩体破碎理论的依据.

#### 参 考 文 献

- [1] 陶颂霖, 凿岩爆破, 冶金工业出版社, 北京, 1986, p119.
- [2] 陶颂霖, 凿岩爆破, 冶金工业出版社, 北京, 1986, p130.
- [3] Selberg H L, *Arkiv för Fysik*, 5 (1952), 97.
- [4] 库克 M A 著(美国), 陈正衡、孙姝花译, 工业炸药学, 煤炭工业出版社, 北京, 1987, p330.
- [5] Taylor G I, *The Scientific Papers of G. I. Taylor*, V. III Univ. Press, Cambridge, 1963, p559.

# The Discussion on Rock Breakage Mechanism

Hu Shisheng

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

According to the theory of elastic-plastic dynamics, a high-velocity deformation process of rock medium and the distribution of stress round a drill hole are discussed. The paper points out that some rock breakage theories, which are based on statics, are in need of correction and improvement. In addition, the model of rigid-plastic dynamics is presented that can make a new theoretical basis for rock breakage mechanism.

**Key words:** rock breakage mechanism, model of elastic-plastic dynamics, model of rigid-plastic dynamics.

# 大型容器水压爆破解体的药包布置参数

周昕清 奉孝中

(近代力学系)

## 摘 要

根据水压爆破的特点,从均匀解体大型容器构筑物的原则出发,给出了当采用群药包技术时药包之间的间距与药包至待解体的壁面距离的关系,并用具体实例予以说明。

**关键词:** 群药包, 水压爆破, 冲量。

## 1 前言

采用水压爆破技术拆除容器状建筑物、构筑物具有省工、省力、快速等优点,特别是对爆破所产生的冲击波、噪音、振动等公害可得到有效的控制。由于各种建筑的几何尺寸、结构不同,相应的药包重量及设置的位置也有所不同。

通常对于小型圆柱状容器来说,设置单个集中药包于横断面的几何中心,并满足药包的入水深度  $h_{\min} \geq Q^{1/3}$  ( $Q$  为药包重量),显然当药包爆炸时,由于对称性,容器能得到较均匀的破坏。但是对于大型圆柱状容器,有时设置单个集中药包不能保证其最小入水深度,这时爆炸的相当大的一部分能量损失于上冲的水柱并造成较大的声响,而对容器结构却不能形成有效的破坏;或者由于大药量药包太靠近容器底部而不利于底部基础的保护。因此对于大型对称性的容器以及非对称性的结构物,采用群药包技术的爆破就显得更为优越。采用群药包技术即要满足药包的入水深度,使得每个药包的能量都能较充分的利用,又要使得结构物能较均匀的被解体,这就要求确定出最佳的群药包数量及位置参数。本文正是论及这方面的问题。

## 2 药包布置参数

### 2.1 群药包的药量计算公式

杨人光在充分分析了水压爆破特点,考虑了水中冲击波与容器壁面的相互作用后,利用郑哲敏提出的能量准则较严密地推导出了薄板结构时的药量计算公式<sup>[1]</sup>

$$Q = K_e \delta R_w^2 \quad (\text{kg}) \quad (1)$$

式中  $K_e$  是与结构强度、炸药品种等有关的药量系数,  $\delta$  为壁厚或等效壁厚 (m),  $R_w$  为药

包至壁面的距离 (m)。大量工程实践证明上述公式是适用的。

## 2.2 群药包的位置关系确定

### 2.2.1 球形装药在水中爆炸时冲击波的冲量计算

在水压爆破破碎机理中,起主要作用的载荷为水中冲击波的冲量, $t$ 时刻水中冲击波的超压可用下式表示<sup>[2]</sup>:

$$\Delta p(t) = \Delta p_m \exp\left\{-\frac{1}{\tau}\left(t - \frac{R}{C_0}\right)\right\} \sigma_0\left(t - \frac{R}{C_0}\right) \quad (2)$$

式中,  $\Delta p_m = 10^4 B \bar{R}^{-\alpha}$  (kg/cm<sup>2</sup>),  $\bar{R} = R/Q^{1/3}$  (m/kg<sup>1/3</sup>),  $\tau = 10^{-4} Q^{1/3} \bar{R}^{\alpha-F}$  (s),

$$\sigma_0\left(t - \frac{R}{C_0}\right) = \begin{cases} 1 & t > R/C_0 \\ 0 & t < R/C_0 \end{cases}$$

这里  $\Delta p_m$  为冲击波的峰值超压,  $\bar{R}$  为折合距离,  $R$  为冲击波波阵面离药包中心的距离 (m),  $Q$  为药量,  $C_0$  为水中声速近似等于冲击波波阵面速度,  $\tau$  为时间因子,  $\beta, \alpha, F$  为炸药常数。

由 (2) 式可知, 当球形药包爆炸后,  $R$  处的冲击波在  $0-t$  时间间隔内所具有的冲量

$$i(t) = \int_0^t \Delta p(\tau) d\tau = \Delta p_m \tau \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{1}{\tau}\left(t - \frac{R}{C_0}\right)\right] \right\}$$

当  $t \rightarrow \infty$  时可得到  $R$  处冲击波的全冲量

$$I = BQ^{1/3} \bar{R}^{-F} \quad \text{或} \quad I = BQ^{(1+F)/3} R^{-F} \quad (3)$$

即冲击波的全冲量是  $Q$  与  $\bar{R}$  的函数。当药量确定, 冲击波全冲量仅是距离  $R$  的函数。

### 2.2.2 直壁结构容器中群药包相对位置的确定

为方便起见, 我们分析间距为  $2a$ 、到壁面距离为  $b$  的药量相同的两药包 ( $Q_1, Q_2$ ) 同时起爆对壁面的作用情况 (见图 1)。显而易见壁面上任一点  $x_i$  都将受到这两个药包的共同作用, 若  $a, b$  值选择不当, 则作用于壁面不同点处的垂直于壁面的入射冲量值会不一样, 因而不能对壁形成均匀的破坏。

为此, 考察壁面上过  $Q_1$  垂直于壁面的  $x_1$  处和  $Q_1, Q_2$  连线的中垂线与壁面的交点  $x_2$  处所受到的入射冲量  $I_1$  与  $I_2$ , 如果在  $x_1$  和  $x_2$  处所受到的垂直入射冲量  $I_1''$  和  $I_2''$  相等即  $I_1'' = I_2''$ , 则认为在  $x_1, x_2$  这段区域内壁面的破坏是均匀的。在分析这个问题时, 考虑到在一般情况下  $Q_1, Q_2$  爆炸所产生的两个峰值压力到达壁面上任一点  $x_i$  的时间是不同的, 特别是在  $x_1$  处,  $Q_2$  产生的冲量对  $x_1$  处的作用较之  $Q_1$  产生的冲量对  $x_1$  处的作用存在两方面的差异, 一为  $Q_2$  比  $Q_1$  离  $x_1$  的距离远, 相应的  $Q_2$  所产生的冲量对  $x_1$  的作用比  $Q_1$  产生的冲量对  $x_1$  的作用要小, 并且晚到达  $x_1$  处; 二为  $Q_2$  产生的冲量在  $x_1$  处的法线方向上的投影较  $Q_1$  在  $x_1$  处的冲量更小一些, 因此我们在讨论两药包对  $x_1$  点的作用时忽略了  $Q_2$  冲量对  $x_1$  处的影响。于是据 (3) 式可得  $x_1$  处的垂直入射冲量为

$$I_1'' = I_1 = BQ^{(1+F)/3} b^{-F} \quad (4)$$

如图 1 所示  $x_2$  处的垂直入射冲量为

$$I_2'' = 2I_2 \cos^2 \varphi = 2BQ^{(1+F)/3} b^2 (a^2 + b^2)^{-(F+2)/2} \quad (5)$$

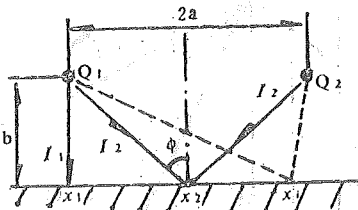


图 1 两药包产生的冲量对壁面和的作用

式中  $\phi$  为入射角。由此当  $I_{1i}'' = I_{2i}''$  时由 (4)、(5) 式可得

$$2\left(\frac{a^2}{b^2} + 1\right)^{-(F+2)/2} = 1 \quad \text{或} \quad \frac{a}{b} = [2^{2/(F+2)} - 1]^{1/2} \quad (6)$$

若选用 TNT 炸药, 取  $F = 0.89$ , 由 (6) 可解得

$$\frac{a}{b} \approx 0.785 \quad \text{或} \quad \frac{b}{a} \approx 1.27 \quad (7)$$

这就是直壁容器采用群药包均匀解体时两药包之间的间距与药包至壁面距离的关系表达式。

当满足 (7) 式关系时, 可以证明在壁面上过  $x_1$  点垂直于  $x_1x_2$  的直线  $l_1$  上的面元和沿壁面过  $x_2$  点且平行于  $l_1$  的直线  $l_2$  上相对应的面元上所受到的垂直于壁面的入射冲量有如下关系 (见图 2):

$$I_{1i}'' < I_{2i}'' \quad (8)$$

由 (3) 式可知

$$I_{1i}'' = BQ^{(1+F)/3} b^{-F} \left(1 + \frac{l^2}{b^2}\right)^{-(F+2)/2} \quad (9)$$

$$I_{2i}'' = 2BQ^{(1+F)/3} b^{-F} \left(1 + \frac{a^2}{b^2} + \frac{l^2}{b^2}\right)^{-(F+2)/2} \quad (10)$$

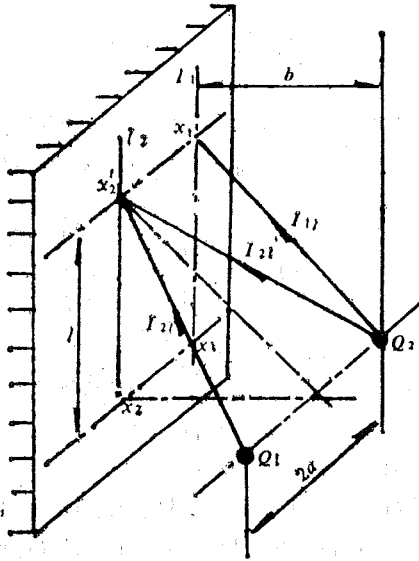


图 2 两药包产生的冲量对壁面  $x_1'$  和  $x_2'$  的作用

式中  $l$  的含义如图 2 所示, 对于 TNT 炸药取

$$B = 0.0588,$$

由 (9)、(10) 式可解出当

$$\frac{b}{a} = 1.27, \quad l = \frac{b}{2}, \quad l = b$$

时  $I_{1i}''$  和  $I_{2i}''$  值:

$$I_{1i}'' |_{l=b/2} \approx 0.724BQ^{(1+F)/3} b^{-F}$$

$$I_{2i}'' |_{l=b/2} \approx 0.839BQ^{(1+F)/3} b^{-F}$$

$$I_{1i}'' |_{l=b} \approx 0.367BQ^{(1+F)/3} b^{-F}$$

$$I_{2i}'' |_{l=b} \approx 0.510BQ^{(1+F)/3} b^{-F}$$

即当满足  $b/a \approx 1.27$  时,  $l_2$  线上的面元所受的垂直入射冲量总是大于  $l_1$  线上面元所受到的垂直入射冲量, 也就是说在直壁容器的平行于药包高度的横断面处虽然能得到较均匀的破坏, 而在壁面的高度方向上总是在二药包的对称面上首先破坏。

### 2.2.3 圆柱状结构容器中群药包相对位置的确定

分析方法同前, 仍考虑药量相同, 入水深度相同的两药包在同时起爆时, 药包平面与柱面交线上  $x_1$  与  $x_2$  处面元上的垂直入射冲量  $I_{1i}''$  和  $I_{2i}''$  的值。其中  $x_1$  为圆柱横断面中心  $O$  与  $Q_1$  延长线与壁面的交点,  $x_2$  为  $Q_1Q_2$  的中垂线与壁的交点, 如图 3 所示。根据图 3,  $x_1$  处的垂直入射冲量为

$$I_1' = I_1 = BQ^{(1+F)/3} b^{-F} \quad (11)$$

$x_2$  处的垂直入射冲量为

$$\begin{aligned} I_2'' &= 2I_2 \cos^2 \varphi = 2BQ^{(1+F)/3} \{a^2 \\ &+ [R - (R-b) \cos \theta]^2\}^{-F/2} \\ &\cdot \frac{[R - (R-b) \cos \theta]^2}{a^2 + [R - (R-b) \cos \theta]^2} \\ &= 2BQ^{(1+F)/3} \{a^2 + \\ &+ [R - \sqrt{(R-b)^2 - a^2}]^2\}^{-(F+2)/2} \\ &\cdot [R - \sqrt{(R-b)^2 - a^2}]^2 \quad (12) \end{aligned}$$

若令  $\frac{a}{R-b} = M$ ,  $\frac{b}{R-b} = N$ , 由  $I_1'' = I_2''$  可

得出

$$N^{-F} = 2[M^2 + (1 + N - \sqrt{1 - M^2})^2]^{-(F+2)/2} (1 + N - \sqrt{1 - M^2})^2 \quad (13)$$

上式为  $M$ 、 $N$  的关系式, 在考虑具体结构的爆破时  $R$  为已知量,  $b$  为药量公式 (1) 中的  $R_w$  可由药包的入水深度等因素选定, 因此  $N$  为一已知数。将  $N$  值代入 (13) 式, 采用数值解法可求出  $M$  的值, 则  $\frac{a}{b} = \frac{M}{N}$ , 即可确定出圆柱状容器群药包技术均匀解体时两个药包间距与药包至壁面距离的表达式。

## 2 工程实例

1988年5月由中国科技大学爆破技术公司设计并爆破了两个容积均为  $1000\text{m}^3$  的大型石油贮罐。两罐位于安徽省巢湖石油分公司油库区内, 油罐高  $6.7\text{m}$ 、内径  $14\text{m}$ 、上部壁厚为  $0.44\text{m}$ 、下部壁厚为  $1.30\text{m}$ 、为一条有少量钢筋的水泥砂浆砖砌结构。该公司要求爆破后罐体基础不受破坏, 为此我们采用了水压爆破的群药包技术的布置方案。罐体的结构及药包的布置如图4所示。

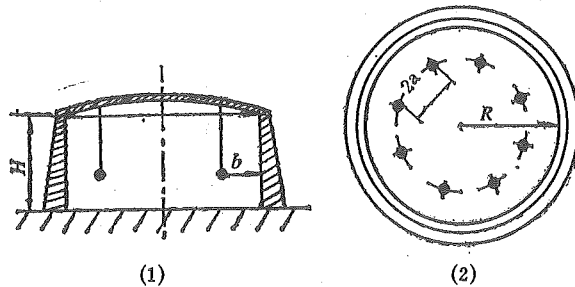


图4 油罐结构及药包的布置示意图

根据结构的特点, 等效壁厚  $\hat{\delta} = 1.0\text{m}$ , 选取  $R_w = b = 2.2\text{m}$ , 由  $R = 7.0\text{m}$  可算出  $N = 0.458$ , 再利用 (13) 式求得  $M = 0.366$ , 因此  $\frac{a}{b} = \frac{M}{N} = 0.80$ , 即8个药包均布正好满

足均匀解体的条件。单个药包的重量由(1)式可求出  $Q = 3.0\text{kg}$ 。图5显示了选用上述参数后爆炸瞬间罐体的破坏情况的照片。

由图5可见采用前面所述药包布置参数时油罐整体的破坏是比较均匀的，由照片还可以发现罐体的破坏首先发生在相邻二药包的对称面处，(8)式的证明能解释这一点。此外对称面处首先得到破坏还可用水中马赫反射的作用予以说明。见图6。图6中两药包的对称面上可作为假想刚壁，两入射波在此刚壁上产生马赫反射波，这样加强了对壁体的作用。考虑到

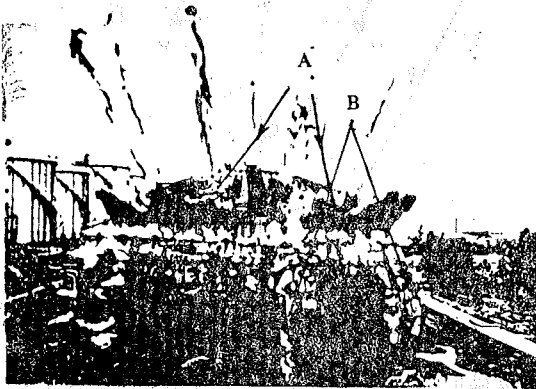


图5 油罐水压爆破破坏的瞬间照片  
A 为悬挂药包处 B 为破裂断面

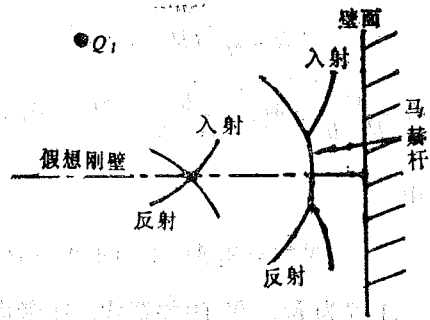


图6 两对称药包产生的马赫反射示意图

马赫反射和(8)式的影响，药包布置参数  $\frac{a}{b}$  的值可适当增大，这样可以减小马赫反射产生的可能性，以及消除(8)式的影响，使得壁体的破坏更趋于均匀。

#### 4 结束语

从上述理论分析得到的药包布置参数的计算公式(7)、(13)，能较好地满足均匀解体的原则，这一点已从很多工程实践中得到证实。但是直接使用(13)式计算  $a$ 、 $b$  之值不方便，若能给出不同半径  $R$  时的  $a$  与  $b$  的曲线集，则在工程中使用起来会更方便一些。关于这一点还有待于进一步完成。

关于水中由炸药爆炸所产生的马赫反射的研究有待于深入，这将会使水压爆破的理论研究进入一个更深的层次。

#### 参 考 文 献

- [1] 杨人光等著，建筑物爆破拆除，中国建筑工业出版社，北京，1985年，226—264。
- [2] Josef Henrych, DrSc., The Dynamics of Explosion and Its Use, Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam Oxford New York, 1979, 178—181。
- [3] 宋秀娟等编译，金属爆炸加工的理论和应用，中国建筑工业出版社，北京，1983年，40—47。



# The Position Parameters of Multiple-Charges in Water-Pressure Blasting in the Construction of Big Container

Zhou Tingqing Feng Xiaozhong

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

According to the characteristics of shock waves under water and the idea that the construction of big container can be broken uniformly by water-pressure blasting, in this paper the relations between the distances of charges to the wall and the distances between charges in the case of multiple-charge are given. And these are illustrated with an engineering example. Based on our work, the technique introduced in this paper is practicable and good.

**Key words:** multiple-charge, water-pressure blasting, impulse.

# 城市建筑群对球面冲击波传播影响的实验研究

郭长铭 张寒虹 周昕清

(近代力学系)

## 摘 要

介绍运用相似律在实验室进行模拟城市建筑群对冲击波传播影响的实验研究。利用电爆炸为爆源,用高速纹影摄影为记录手段,拍摄了冲击波传播过程的纹影图象。照片清晰地显示了马赫杆形状逐渐弯曲的过程。由照片测量出了马赫波的时程曲线和三波点的运动曲线,并与无建筑群的情况进行了简单比较。

**关键词:** 马赫反射, 球面冲击波, 高速纹影摄影。

## 1 引言

在空气中进行核爆炸时,其总能量的50%是以空中冲击波形式传出的。而且,就空中爆炸对目标的破坏、杀伤作用而言,爆炸产物只在近距离内起作用。在较远距离上起主要破坏作用的则是冲击波。因此,研究存在地面建筑群时空气冲击波的传播规律是涉及爆炸造成建筑物的破坏、城市防空、防护等许多方面的一个基础课题。

鉴于空气冲击波在传播过程中会出现诸如马赫反射等一系列复杂现象,多数情况下难以获得理论上的解析解。即使在有条件进行空中核爆炸时,也很难在现场实测地形变化对冲击波传播的影响。为此,我们在实验室内,以电爆炸装置为爆源,根据相似理论设计建筑群的模型;模拟城市建筑群上空的核爆炸现象。并采用高速纹影摄影的记录手段来对此进行研究。

## 2 实验原理

空气中爆炸现象遵循相似规律,当存在

$$\frac{r_1}{r_2} = \sqrt[3]{\frac{W_1}{W_2}}$$

时可采用几何相似律进行分析<sup>[1]</sup>。式中, $r$ 是距药包中心的距离, $W$ 是装药重量。

装药密度为  $1.6\text{g/cm}^3$  的球形 TNT 药包在空中爆炸时,峰值超压的萨道夫斯基公式<sup>[1]</sup>为

$$\Delta p_m = p_1 - p_0 = 0.67 \frac{1}{\bar{r}} + 3.01 \frac{1}{\bar{r}^2} + 6.7 \frac{1}{\bar{r}^3} \quad (\text{kg/cm}^2)$$

其中  $\bar{r} = \frac{r}{\sqrt[3]{W}}$  ( $\text{m/kg}^{1/3}$ ),  $r$  与  $W$  同上。

而冲击波速度  $D$  和峰值超压  $\Delta p_m$  存在下列关系:

$$\Delta p_m = p_1 - p_0 = \frac{7}{6} \left( \frac{D^2}{c_0^2} - 1 \right) = \frac{7}{6} (M^2 - 1) p_0$$

式中,  $p_0$  是未扰动的空气初始压力, 标准状态下  $p_0 = 1.0332\text{kg/cm}^2$ ;  $c_0$  是未扰动的空气声速;  $M$  是冲击波的马赫数。

由此可以得到装药与冲击波马赫数的近似关系:

$$0.67 \frac{\sqrt[3]{W}}{r} + 3.01 \left( \frac{\sqrt[3]{W}}{r} \right)^2 + 6.7 \left( \frac{\sqrt[3]{W}}{r} \right)^3 = \frac{7}{6} (M^2 - 1) p_0$$

因此, 测出球面波半径  $r$  和相应的马赫数  $M$  即可计算出模拟化爆的 TNT 当量  $W$ , 再折算成模拟核爆的 TNT 当量。

在比例爆高相等的条件下, 模型的尺寸及爆高与被模拟建筑物的尺寸及爆高有几何相似关系:

$$r_1 : h_1 = r_2 : h_2$$

式中,  $r_1$  为实验爆高,  $h_1$  为建筑物模型高度,  $r_2$  为被模拟爆高,  $h_2$  为被模拟建筑物高度。

### 3 实验装置

在双反射式纹影仪的试验段安装爆炸丝和模型, 电爆炸装置使爆炸丝爆炸, 产生冲击波。转镜式高速摄影机的高压同步脉冲同时触发电爆炸的球隙开关及纹影仪的光源脉冲钨灯, 使爆炸、光源闪光、拍摄三者同步。

模型为金属铝板, 一部分是平面, 另一部分是一片长方体凸起。长方体的长  $10\text{mm}$ 、宽  $4\text{mm}$ 、高  $4\text{mm}$ 、横行间距  $6\text{mm}$ 、竖行间距  $5\text{mm}$ 。见图 1。在纹影仪试验段安置模型板时, 使长方体的长度方向与纹影仪的平行光平行。在纹影图上得到的是其宽度和高度的投影。

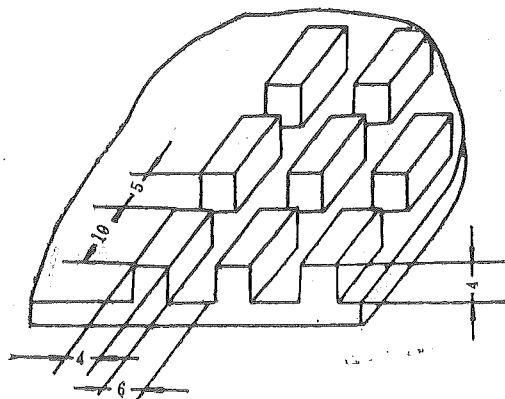


图 1 模型的局部示意图

### 4 实验结果

模型上方球形冲击波传播过程的高速纹影照片如图 2。实验时, 电爆炸装置的电容为  $13\mu\text{F}$ 、充电电压  $30\text{kV}$ 、拍摄频率  $25 \times 10^4 \text{fps}$ , 爆高  $121.9\text{mm}$ 。通过测量球面波的半径和马赫数, 按前述公式计算出模拟核爆的 TNT 当量为  $0.44\text{g}$ , 比例爆高为  $1.6\text{m/kg}^{1/3}$ 。按相似

律，这相当于 82.4 千吨 TNT 当量的原子弹在距地面 1500m 的空中爆炸，建筑物的高度为 50m。

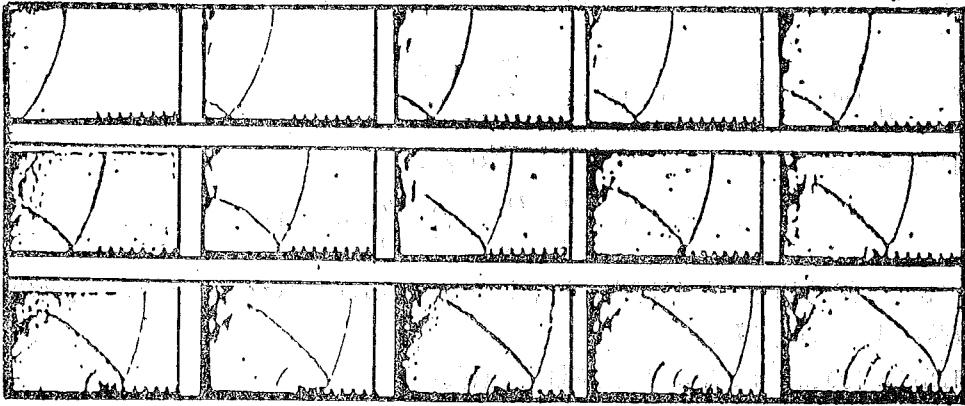


图 2 建筑群对球形冲击波传播的影响

球形冲击波在无建筑群的平面（刚壁）上马赫反射的主要特征是：马赫杆不断增长，马赫波逐渐超前于入射波，马赫杆有一条切线与平面近似正交。见图 3。而图 2 则显示了由于建筑群的干扰马赫杆逐渐倾斜、弯曲，马赫杆增长缓慢，马赫波始终滞后于入射波的不同特征。亦即，由于建筑群的存在，马赫反射受到削弱甚至破坏。另外，由于建筑物的墙对球面波的反射，入射波传播到每排建筑时，都有一反射波向波后传播。

测量纹影图象得出的马赫杆在壁面（地平面）的时程曲线见图 4。图中的  $y$  是马赫杆在壁面的位置， $t_0$  是马赫杆形成的初始时刻。对应于马赫波到达建筑物的时刻，曲线有一拐点  $A$ ，

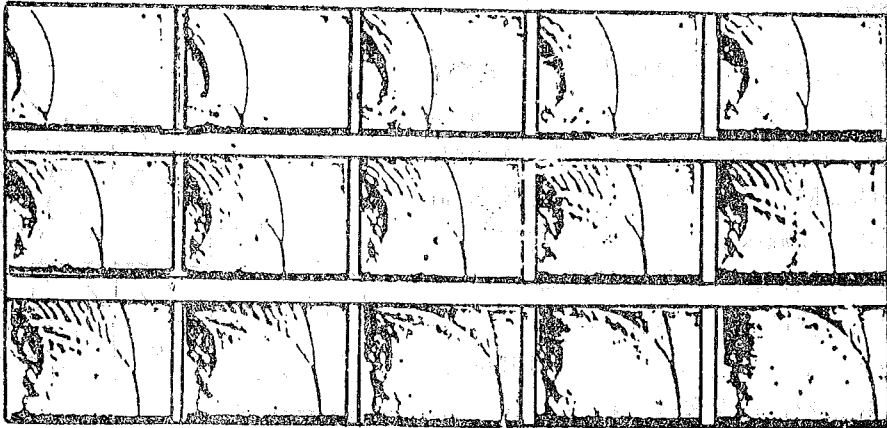


图 3 球形冲击波在刚壁上的马赫反射

曲线斜率变小并基本保持不变，说明其速度减小而且几乎没有加速度。通过测量得到以下结果：马赫波到达建筑群之前，马赫数从初始的 1.68 上升到 2.15，到达建筑群后马赫数下降，其平均值为 1.98。

三波点的时程曲线如图 5。S 为三波点的路程， $t_0$  为形成马赫杆的初始时刻，当马赫反射波到达建筑群后，三波点的运动迹线偏离了无干扰时的理论曲线<sup>[2]</sup>（图中以虚线表示），而且不再是单调增的，出现了波动。其原因是在建筑物墙壁处三波点速度下降，而在建筑物

顶部三波点的速度又升高。

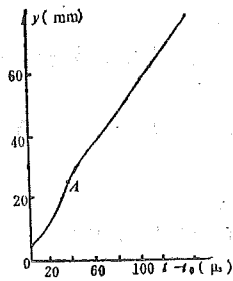


图 4 马赫杆在壁面的时程曲线

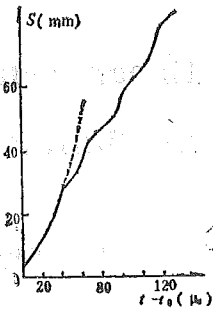


图 5 三波点时程曲线

## 5 讨论

用显微镜测量纹影照片时发现在凸起上面的马赫杆与在两凸起之间凹处的马赫杆形状有明显不同。前者与在平面上的相似，后者的马赫杆发生弯曲、折断。在小凸起之间波的扰动十分复杂。由于模型尺寸太小，难以作进一步的观察和分析。

分幅高速摄影的时间讯息是间断的。本实验中画幅间隔为  $8\mu\text{s}$ ，而马赫波传过一个凸起和一个间隔的时间约为  $20\mu\text{s}$ 。由于拍摄频率不够高，无法测量出三波点运动曲线的波动周期。

## 参 考 文 献

- [1] Josef Henrych, Drsc., The Dynamic of Explosion and Its Use, Elsevier Scientific Publishing Company, New York, 1979, p149-159.
- [2] 徐彬等, 爆炸与冲击, 8 (1988), 25.

# An Experimental Study on the Effects of Buildings on Characteristics of Spherical Shock Wave

Guo Changming   Zhang Hanhong   Zhou Tingqing

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

An experimental study on the effects of simulacrum buildings on the characteristics of spherical shock wave was conducted. The exploding wire apparatus was used as the exploding load. The pictures of shock wave propagation were taken by high speed schlieren photography. It is clearly seen in the pictures that the Mach stem becomes a curve. From these pictures the trace of the Mach stem on the wall with a folded point and waved triple-point trace were obtained.

**Key words:** Mach reflection, spherical shock wave, high speed schlieren photography.

# 间隔装药深孔爆破的数值分析

胡秀章 虞吉林

(近代力学系)

## 摘 要

采用二维动态有限元程序,对有间隔装药的堵塞深孔爆破进行了轴对称弹性波效应的数值分析,得到了爆破远区的动应场,特别是爆炸波在传播过程中,在固定抵抗线上所达到的最大拉应力的分布。通过对最大应力分布的计算分析,获得合适的装药间隔长度,可供工程参考应用。

**关键词:** 爆破, 深孔爆破, 数值分析, 弹性动力学。

## 1 引言

深孔有堵塞间隔装药是深孔爆破中的一种新技术,也是某些特殊装药的需要。研究装药间隔对爆破效果的影响是有意义的课题。由于矿体的不均匀和爆炸过程的复杂性,传统的研究工作都采用现场爆破试验实验室模型试验,有时还求助于经验,这样不仅工作量大,费用高,而且难于获得最优值。本文利用爆炸波迭加原理,均匀化假定,用二维弹性波效应的数值计算,研究间隔装药对爆炸波传播的影响,从爆孔远区动态应力场的分析,求得合适的间隔长度以及装药间隔的不同配置,这将能提高爆破效果,为深孔间隔装药爆破的实验研究和工程应用提供参考。

## 2 基本方程

考虑占据一有限空间的物体 $\Omega$ ,其上作用有体力和面力,该物体的运动为

$$x^i = x^i(X^a, t)$$

这里 $X^a$ 是物质坐标, $x^i$ 是欧拉坐标。根据虚功原理可得

$$\delta\pi = \int_{\Omega} \rho \ddot{x}^k \delta x_k dV + \int_{\Omega} t^{km} \delta x_{k,m} dV - \int_{\Omega} \rho f^k \delta x_k dV - \oint_{\phi^1} S^k \delta x_k dV = 0$$

其中 $\rho$ 是材料密度, $\ddot{x}^k$ 是加速度, $t^{km}$ 是Cauchy应力, $f^k$ 是体力, $S^k$ 为面力(即外加作用力),逗点表示协变导数。利用奥高定理可得

$$\begin{aligned}
 \text{运动方程} \quad t^{km}{}_{,m} + \rho f^k &= \rho \ddot{x}^k && \text{(在 } \Omega \text{ 内)} \\
 \text{面力边界条件} \quad t^{km} n_m &= S_0^k(t) && \text{(在作用力边界上)} \\
 \text{位移边界条件} \quad x^i(X^\alpha, t) &= x_0^i(t) && \text{(在位移边界上)} \\
 \text{接触间断条件} \quad (t_+^{km} - t_-^{km}) n_m &= 0 && \text{(在接触界面上)}
 \end{aligned}$$

仅考虑  $t=0$  时刻为均匀的初始条件:

$$\begin{cases} x^i(X^\alpha, 0) = X^\alpha \\ \dot{x}^i(X^\alpha, 0) = v^i(X^\alpha) = 0 \end{cases}$$

在二维轴对称情况下, 可依据上述公式将所考虑  $\Omega$  的区域空间采用四边形等参单元离散化, 在给定本构关系的基础上, 通过数值计算得到物体内部应力、应变分布随时间的变化 (详见文献 [1]、[2])。

### 3 计算模型和本构关系

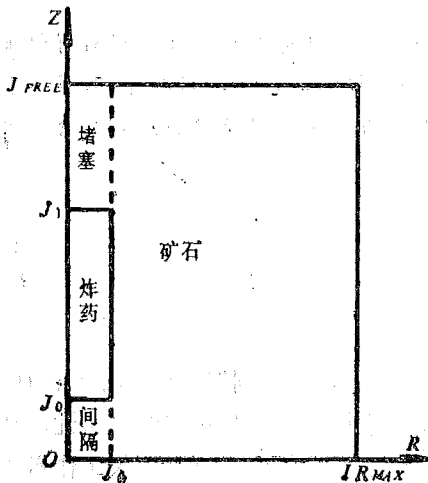


图 1 计算模型示意图

#### 3.1 计算模型

计算模式如图 1 所示。计算域是个有限的大柱体,  $Z$  为对称轴,  $R$  为径向坐标。0 至  $I_0$  是孔的半径。装药的中段有间隔, 上部有堵塞。  $J_{FREE}$  是自由面。图中的  $J_1$  至  $J_{FREE}$  是堵塞长度,  $J_0$  至  $J_1$  是上半部装药, 0 至  $J_0$  是堵塞的一半。考虑到装药的对称性, 把  $R$  轴所在的平面近似地看作对称面。因而  $R$  轴所在的平面是反射边界条件 (或称固定边界条件)。  $IR_{MAX}$  柱面作为自由边界条件处理。由于计算条件限制, 计算时取孔深 17m, 堵塞长度 4.25m, 装药间隔长度从 0 至 4m 不等。最大径向距离  $IR_{MAX}$  取为 12m 以消除这一边界对

波传播的早期影响。计算中, 对边界动载荷作了一些简化: 不考虑炸药的爆轰过程, 并把孔径扩大一倍 (即 0 至  $I_0$  为 24cm) 的界面上的压力条件  $p(t)$  作为炸药气体的作用条件, 这一孔径的扩大相当于不考虑塑性破坏部分的影响。全部计算域划分为 4258 个左右的四边形单元 (因为间隔长度不等时单元数目略有改变), 每一单元实际为绕  $Z$  轴的物质环。

#### 3.2 本构模型及参数选取

考虑到除了药孔附近的小部分区域为弹塑性破坏区外, 远离孔区的大部分区域都是弹性破碎区这一事实, 并且又主要是弹性区的拉应力场特别是间隔装药对抵抗线附近的拉应力场的影响, 因而我们把矿体和堵塞部分均作为各向同性的均质弹性体处理。在小变形条件下本构关系为

$$t^{km} = C^{kmrr} e_{,r}$$

其中  $C^{kmrr}$  为弹性模量张量, 在各向同性线弹性的情形下只有两个独立常数, 取杨氏模量  $E = 7.8 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ , 泊桑比  $\nu = 0.26$ , 材料密度  $\rho = 2.9 \text{ g/cm}^3$ 。不考虑体力  $f^k$  的影响。



压力边界条件取为  $S_0^s(t) = p(t) = p_m e^{-t/\theta}$ 。其中  $t$  为时间,  $\theta$  为特征衰减时间,  $p_m$  为峰直压力。由于缺乏实验数据, 这里我们利用水中相同当量 TNT 球形装药的衰减特征时间作为柱形装药的衰减特征时间的近似值<sup>[1]</sup>, 取  $\theta$  为 0.2ms, 另一计算参数峰压取为  $p_m \approx 1 \times 10^{10}$  dyn/cm<sup>2</sup>。由于本构关系是线性的, 这一参数的选取并不影响拉应力的相对分布。

#### 4 计算结果

图 2 是在距孔中心 5 m 处, 与间隔中点相对应的点处 ( $Z=0, R=5$ ) 的应力时程曲线。(a) 是周向应力  $\sigma_\theta$  的时程曲线, (b) 是径向应力  $\sigma_r$  的时程曲线。两图中都明显地显示

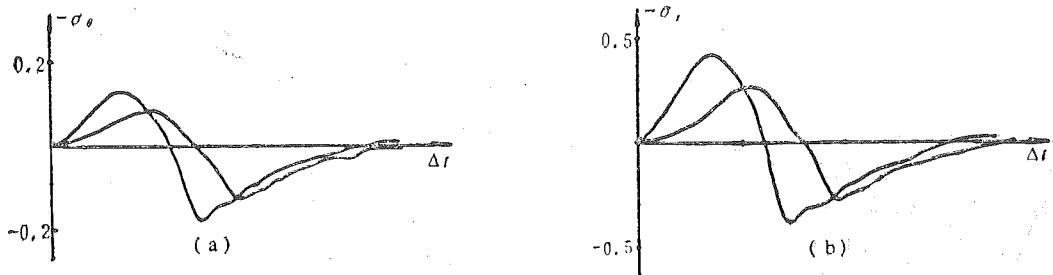


图 2  $R=5$ m 处间隔中点的应力时程曲线

出, 在经历了压缩阶段以后有一拉应力作用的历程。随着时间的发展拉应力逐步减弱直至再次进入压缩阶段, 但此时的压力值已远远小于拉应力值了。图中压力作用的上升曲线明显变缓主要是由于柱面扩散效应引起的。首次拉应力历程的时间比压缩历程的时间要长, 其后的拉应力值都明显小于第一个拉应力历程的拉应力值。整个计算情形同柱对称时典型曲线相似<sup>[1]</sup>由此说明本计算是基本可信的。

从计算结果可以看到, 材料在经历了弹性压缩以后, 将出现一个三向受拉的过程 ( $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$  都是小于零的拉应力值), 这对于脆性材料的破坏将是十分有利的。可以认为, 在爆孔远区岩石的破碎主要是由这种拉应力的作用产生的。因此, 下面将着重考察间隔装药对爆炸波传播过程中所达到的最大周向拉应力  $\sigma_\theta$  和最大平均拉应力  $p$  在爆孔远区的分布的影响。

图 3 是在上述同样的几何位置, 即距孔心 5m 与间隔中点相对应点处的最大拉应力  $\sigma_\theta$  值随间隔长度不同的变化曲线 (图 3a)。图 3b 是最大平均拉应力  $p = -\frac{1}{3}(\sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z)$  随间隔长度不同的变化曲线。从图上可见, 就中点的最大拉应力而言, 在小间隔的情形

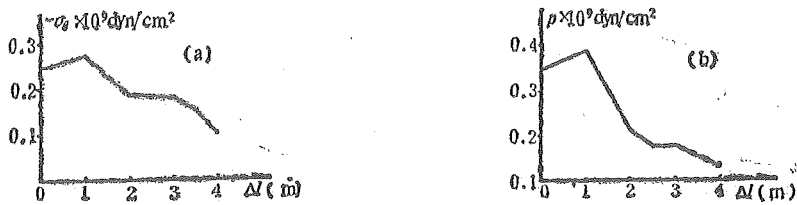


图 3  $R=5$ m 间隔中点最大拉应力变化曲线

下是随着  $\Delta l$  的增大而增大, 但在间隔超过 1 m 以后, 随着间隔长度的增长, 无论是  $\sigma_\theta$  还是

$p$  都有明显下降。但是, 间隔在 2 ~ 3 m 之间时, 最大拉应力似乎变化不大。以后, 随着间隔的增大拉应力值又一次明显下降。

图 4 是在  $R = 5\text{m}$  处, 最大周向拉应力  $\sigma_\theta$  从间隔中点 ( $Z = 0$ ) 沿着  $Z$  轴方向的变化曲线。由图可见, 由于装药间隔的存在, 除了 1 m 间隔的情形以外, 间隔附近区域的周向拉应力普遍要低于无间隔装药时的最大周向拉应力, 而两倍间隔距离以外的部分, 最大拉应力  $\sigma_\theta$  值又高于无间隔装药时的最大拉力  $\sigma_\theta$ 。但不管间隔长度多少, 间隔中点总是一个极大值点, 而且几乎总在距间隔中点 1 m 处达到最小值。从图上还可看到, 当间隔超过 3 m 以后, 低拉应力区域明显地变大了。

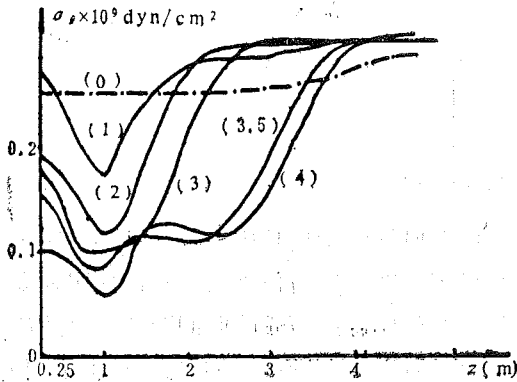


图 4  $R = 5\text{m}$  处最大拉应力分布  
(括号内数值代表间隔距离)

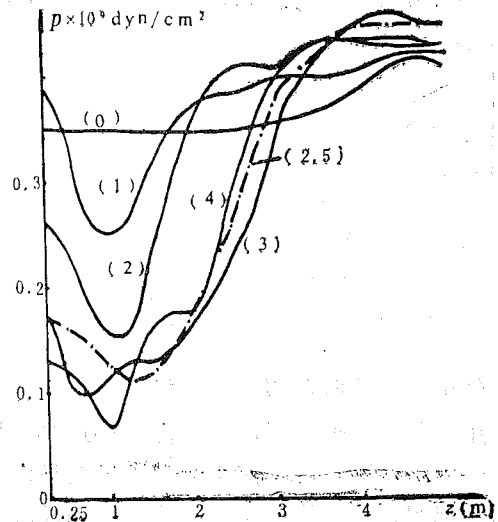


图 5 最大平均拉应力的分布情况  
(括号内数值代表间隔距离)

图 5 是与图 4 同样条件下最大平均拉应力  $p$  的分布曲线, 其规律亦同最大周向拉应力  $\sigma_\theta$  的变化规律相似。随着  $Z$  的继续增加, 最大平均拉应力  $p$  由间隔中心的极大值开始下降, 在 1 m 左右处达到最小值, 然后逐渐增大, 直至高于无间隔装药内的值。

从图 4 和图 5 可以看出, 间隔装药对远区最大拉应力分布的主要影响有两个方面: 其一, 由于总能量的减少, 使得间隔附近区域的应力从总体上比无间隔装药时有所降低, 它的影响随着间隔的增大而增大 (当间隔超过 3.5 m 后, 由于自由面反射的拉伸波迭加的结果, 影响区域不再扩大)。其二, 对于远区来说, 这一个装药间隔造成了某种空间干扰效应, 使得间隔附近区域 (远区) 的应力分布进一步产生起伏, 与间隔中点对应处得到增强而在稍远处出现一个最小值, 这个最小值的轴向位置主要取决于径向距离, 而与间隔长度关系不大。

## 5 结论

数值计算的结果表明, 即使在炸药孔壁上仍然是压缩状态的情况下, 随着压力波的径向传播, 由于柱面扩散效应, 在压缩波后紧跟着一个强拉伸波使材料处于三向受拉状态, 这是利于材料破坏的, 同样也可以预料裂缝的开启将由孔壁附近向外发展。

由于存在装药间隔, 在确定的径向距离上, 对应于间隔同样  $Z$  坐标的间隔附近引起了拉应

力值的下降, 如果以  $\sigma_r$  的拉应力情形为例, 则 1 m 间隔对拉应力的影响最小, 而 3 m 以后的低拉应力区明显增大, 这显然是不利于破碎的, 因此 2 m 左右的间隔为好。从平均拉应力  $\bar{p}$  的分布曲线 (图 5) 看, 似乎 2 m 至 2.5 m 之间的低拉应力区就有了明显增大, 因此又以不超过 2 m 的间隔为好。如果仅从间隔中点处的拉应力来衡量, 则 1 m 的间隔装药效果为最好。

装药间隔对远区应力分布产生某种空间干涉效应, 与间隔中点对应的位置总是得到增强, 另一方面, 对于  $R=5\text{m}$  处, 在  $Z=1\text{m}$  左右总是被削弱。由于抵抗线附近的岩石同时受到两个以上炮孔装药产生的应力波的作用, 根据上述计算结果, 如能将相邻两个炮孔的装药间隔位置错开 1 m 左右, 将有助于改善抵抗线附近最大拉应力分布的非均匀性, 提高破碎效率。

以上是二维轴对称弹性波动数值计算的结果, 由于是完全弹性分析, 没有考虑装药区附近弹塑性波区的影响。计算参数也是一种模拟, 因此计算结果的绝对数值大小并不能完全反映工程实际的情况, 但计算曲线所反映的相对关系仍是有参考价值的。

#### 参 考 文 献

- [1] Key S W, HONDO-A Finit Element Computer Program for the Lage Deformation Dynamics Response of Axisymmetric Solids, Sandia Laboratories, SLA-74-0039, 1974.
- [2] 周光泉、刘孝敏, 力学进展, 16卷, p363.
- [3] 爆炸力学教研室, 《爆炸概论》下册, 中国科技大学五系讲义, 1975, p107.
- [4] 王礼立, 应力波基础, 国防工业出版, 北京, 1985, p196-206.

# Numerical Analysis for Deep Hole Blasting of spaced Power Charge

Xu Xiuzhang    Yu Jilin

*(Department of Modern Mechanics)*

## Abstract

Numerical analysis of axial symmetric elastic waves are carried out, with a two dimensional finite element dynamic program, for explosions of plugged deep hole powder charge. Dynamic stress fields at longer distances and the maximum tensile distribution along a fixed resistant line are given. Suitable space of power charge can be obtained by a numerical analysis of maximum stress distributions at different spaced powder charge. The results are reasonable and useful in engineering.

**Key words:** explosion, deep hole blasting, numerical analysis, dynamics of elastic.

# 创伤过程中空腔成腔机理初探

周光泉 邢立平

(近代力学系)

## 摘 要

将创伤过程分为三个可单独处理的阶段,对空腔形成问题作了初步探讨,给出了瞬时空腔的最大直径,体积及简要的脉动过程。

**关键词:** 创伤, 弹道学, 空腔。

## 1 引论

创伤研究的历史虽然很久,但“创伤弹道学”的兴起只是近几十年的事。由于创伤现象的复杂多变,影响因素千变万化,各种因素之间交织迭合,至今未能对创伤过程有一清晰完整的认识。所用的研究方法仍然是对试验结果的唯象分析。虽然也测到一些影响致伤能力的因素,却不能定量化。对冲击波,瞬时空腔造成的损伤虽有一定的认识——这种认识更多也是基于病变行为,但两者间的关系尚未解决,冲击波的效应,空腔的成腔机制也所知不确。

## 2 创伤过程的整体认识

在总结前人工作,观察试验记录的基础上,本文不揣冒昧,把创伤过程分为三个阶段,每一阶段都可独立研究。

### 2.1 产生冲击波的阶段

在子弹撞击目标的极短的时间内,产生出一个陡峭的脱体激波,其峰值一般远大于靶标的强度。之所以这样说,有如下根据:

(i) 图1是定点压力波形图<sup>[1]</sup>。这些波形有如下特点:第一是波峰陡峭,升降迅速,总共只有十几微秒,这说明它的激发过程很短;第二是在传播过程中峰值很快衰减。所以,可不考虑自由边界的反射问题。

(ii) 图2是脱体激波的照片<sup>[2]</sup>。从中可以看出密度变化区域也只有很小的范围,而后恢复。

L. M. Sturdiven<sup>[3]</sup>根据试验发现,由于产生激波和冲击波使子弹损失的速度为:

$$\Delta v/v_0 \propto v_0/\rho_d \quad (1)$$

$$v_0 = \frac{v_s}{1 + \frac{b}{\rho_d} c^{\sigma_s} / c} \quad (2)$$

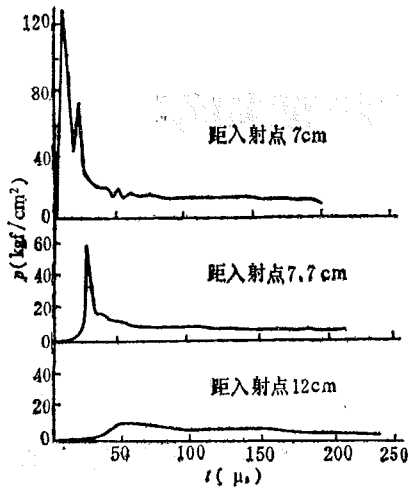


图1 入射点附近的压力波形

破片:  $\phi 6.35\text{mm}$  钢球, 速度:  $1110\text{m/s}$ , 入射极角:  $54^\circ$

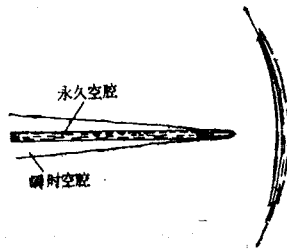


图2 脱体激波图

计算结果表明, 在  $600\text{—}1500\text{m/s}$  的弹速范围内, 能量损失率为  $12\%\text{—}35\%$ 。可以认为, 损失的能量基本上化为离体的球面激波。由 (1) 式可以看出, 初速度  $v_s$  愈高, 速度损失即能量损失愈多, 形成的冲击波越强。虽然冲击波传递能量不是非常有效, 但它是唯一能远达的能量形式, 也是造成间接骨折和形成远达效应的根源<sup>[4, 5]</sup>。

这种形式和水下爆炸有某些相似, 即都有一先行的冲击波。只是在水下爆炸过程中, 冲击波带走的能量比创伤中为多, 约占总能量的  $50\%\text{—}60\%$ <sup>[6]</sup>。由此可以看出, 子弹的运动是在冲击波的波后区域, 而冲击波对该区的影响在子弹到达时已经非常微弱, 可不加考虑。

## 2.2 穿透过程

如果说产生冲击波的过程是以子弹和靶标的作用为研究对象。那么在这一过程中, 则着重以子弹为研究对象, 观察其在靶标中的运动情况。我们知道, 在第一阶段中, 由于产生冲击波, 有一定的速度损失, 所以, 第二阶段的速度不再是初速度  $v_s$ , 而是  $v_0$ 。——我们暂时称之为穿透速度。

由阻力公式知子弹运动过程中受到的阻力为

$$F = \frac{1}{2} \rho C_x S v^2(x) \quad (3)$$

根据牛顿定律, 弹的运动方程为:

$$m \cdot \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{2} \rho C_x S v^2$$

积分得

$$v(x) = v_0 e^{-kx/d} \quad (4)$$

其中

$$K = \frac{3}{4} \cdot \frac{\rho}{\rho_d} \cdot C_x$$

由(4)式, 可得穿透 $x$ 距离所需要的时间为

$$t = \frac{1}{v_0} \cdot \frac{d}{K} (e^{\frac{Kx}{d}} - 1) \quad (5)$$

据此, 阻力随侵深的变化关系为

$$F = \frac{1}{2} \rho C_x S v_0^2 e^{-2Kx/d} \quad (6)$$

一般而言, 直径5.56mm的钢珠弹, 以 $v_0 = 1000\text{m/s}$ 的速度穿过150mm厚的明胶或肥皂约需 $300\mu\text{s}$ 的时间。这个时间远大于冲击波的升降时间, 由此也可以看出, 冲击波不是在穿透过程中产生的。

穿透过程是子弹克服凝聚阻力, 粘滞阻力惯性阻力做功的过程。子弹把能量传给附近介质, 使之产生很高的压力及一定的质点速度, 这是空腔形成的初始条件。因为穿透过程是一非常复杂的过程。若以靶标介质为对象, 我们现在还无法给出确切的解析解, 但我们可以知道子弹在每一位置处的能量释放率及穿过该处时的空腔形状。另外, 与整个空腔的膨胀过程相比, 穿透过程非常短暂。因此, 即便不知其确切的过程, 在前述条件下, 仍可进行下一阶段——空腔运动过程的研究。

### 2.3 空腔运动过程

在这阶段是以靶标质点为研究对象。观察诸如 $A$ 、 $B$ 等点的运动情况(参见图3)。此时, 可以认为: 开始时产生的冲击波的扰动已经结束。穿透过程引起的质点运动已经稳定, 此后的过程是个质点在一定的应力及初速下的运动。此时, 介质发生弹性和/或塑性变形。

对于弹性介质, 由于质点惯性, 在平衡点处介质点仍要运动, 直至动能全部转化为变形能以及抵抗外力做的功才停止。这时, 瞬时空腔达到最大位置。而后又在外界压力及弹性恢复力作用下回复。如此再三, 产生空腔的脉动。这一过程与质量—弹簧—阻尼系统极为相象。

对于塑性介质, 当空腔膨胀到最大以后, 因其没有恢复能力, 而且外界压力不足以使其恢复, 这样, 最大瞬间空腔得以保存。

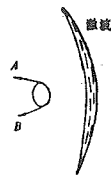


图3 定常穿透过程示意图

## 3 空腔运动分析

依据前面分析, 我们可以对空腔形成、运动进行一点尝试性讨论。

### 3.1 空腔最大直径

子弹在靶标中释放的能量, 除一小部分因摩擦产生的热量转化为分子内能外(这一小部分暂且不予考虑), 一部分转化为介质的动能, 另一部分抵抗外界压力做功, 还有一部分转化为弹性/塑性功。

在最大空腔位置处, 质点的动能为零, 此时只有如下两部分能量:

空腔从直径为零发展到直径为 $2a_m$ , 由文献(6)知, 外界压力做的功为 $\pi a_m^2 \cdot p_0$ 。

在弹性介质中, 有弹性功的存在。考虑最简单的模型: (i) 体变为零, (ii) 介质的应力—应变关系呈线性, 模量为 $E$ , 不考虑粘性影响。

对诸如粘土, 肥皂类的粘塑性介质, 基于如图4的应力-应变关系, 仍可作上述假定, 只是 $E$ 为塑性模量<sup>[7]</sup>.

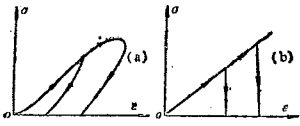


图4 粘塑性介质应力应变曲线

在此条件下, 位移分布为

$$u(r, t) = au(a, t)/r \quad (7)$$

半径为 $r$ 处的径向应变为

$$\epsilon_r(r, t) = -\frac{a}{r^2}u(a, t) \quad (8)$$

由前述假定, 得

$$\begin{cases} \epsilon_r + \epsilon_\theta = 0 \\ \epsilon_r = \frac{3}{4E}(\sigma_r - \sigma_\theta) \end{cases}$$

畸变功密度为

$$w = \int_0^t \mathbf{T} : \mathbf{D} dt = \frac{1}{2}(\sigma_r \epsilon_r + \sigma_\theta \epsilon_\theta) = \frac{2}{3} \cdot \frac{a^2}{r^4} u^2(a, t) E$$

畸变功为

$$\begin{aligned} W &= \int_V w dV = \int_V \frac{2}{3} \cdot \frac{a^2}{r^4} u^2(a, t) E dV = \frac{4}{3} \pi E a^2 u^2(a, t) \int_0^\infty \frac{1}{r^4} r dr dx \\ &= \frac{2}{3} \pi E u^2(a, t) dx \end{aligned}$$

在最大空腔位置处的弹(塑)性功为

$$W_m = \frac{2}{3} \pi E a_m^2 \cdot dx$$

由能量原理有

$$F dx = \pi a_m^2 p_0 dx + \frac{2}{3} \pi E a_m^2 \cdot dx$$

所以

$$a_m = \sqrt{\frac{F}{\pi(p_0 + \frac{2}{3}E)}} \quad (9)$$

或

$$a_m = \sqrt{\frac{\rho C_s}{2(p_0 + \frac{2}{3}E)}} r_0 \cdot v \quad (10)$$

可见, 空腔最大直径与该处弹速成正比, 与弹径成正比, 比例系数差不多只和目标性质有关。

下表为钢珠弹射击124mm厚肥皂的实验结果<sup>[8]</sup>。计算结果表明组合参数 $v_0 d/D$ 几乎是常数, 最大相差4.7%, 这说明我们的理论基本和实验吻合。



表 1 空腔接径实验结果

弹径 (mm)	实验 次数	初速 (m/s)	穿透初速 (m/s)	空腔直径 (cm)	参数 $v_0 d/D$	平均值
3.175	7	1174	1000	2.40	13.23	12.74
	7	1375	1157	3.00	12.25	
4.764	6	1010	883	3.20	13.14	12.90
	5	1321	1090	4.10	12.67	
5.56	7	529	490	2.20	12.38	12.29
	5	945	832	3.80	12.20	
6.30	5	474	410	2.20	11.83	12.60
	5	877	780	3.70	13.38	

由公式 (10) 得出的另一个推论是当撞击动能一定时, 即

$K_i = \frac{1}{2}mv_0^2 = \alpha r_0^3 \cdot v_0^2$  为常数时, 有

$$a_m = \sqrt{\frac{\rho C x}{2(p_0 + \frac{2}{3}E)} \cdot \frac{K_i}{\alpha r_0}} \quad (16)$$

即最大瞬时空腔直径和子弹半径平方根成反比, 也就是说弹径越小, 造成的损伤越严重。减小弹径, 可减小武器弹药系统的重量。这也是现今各国竞相研制、装备小口径武器的主要原因之一。

瞬时空腔的最大直径是判断损伤程度的标准之一。现在美军方已把瞬时最大空腔的大小, 形状作为判定武器杀伤效能的依据。从 (9) 式, 我们可以知道, 阻力越大, 速度的衰减越快, 能量的释放也越快, 造成的损伤越严重。而阻力的大小不仅仅取决于弹速。以前人们只看弹速和损伤的关系, 把弹速作为子弹具有创伤能力的标志, 于是, 在武器的设计上, 便通过增加子弹的速度来提高某杀伤效能。而弹速的提高必然伴随有武器重量的增加, 造成携带的不便。但随的实验发现: 7.62mm 的步枪弹有时只形成很小的空腔, 创伤轻微, 虽然它具有很强的穿透能力, 这表明, 它的稳定性好, 能量释放很少, 能量释放率较低。后来人们发现, Pumpkin 球形弹 (铅质) 在进入目标几个厘米之内, 便释放其所有能量, 创伤极为严重。进一步的实验也发现, 能量释放率与损伤程度有极为密切的关系。所以, 此后的弹药武器的设计便通过减小子弹的稳定性, 使之在进入目标之后迅速失稳甚至翻滚, 增加其阻力面积 (有时可使阻力面积增加几十倍, 这是靠增加速度所不能达到的), 提高子弹的能量释放率, 以此造成严重的创伤。现在, 我们通过理论推导, 给予证实。

根据 (9) 式, 还有如下的结论: 瞬时空腔最大直径随侵彻深度 (或时间) 的变化曲线, 除了程度不同外, 形状一致, 从文献 [9] 的图 2、图 3 我们得到了较好的验证。

### 3.2 空腔体积的计算

由

$$a_m = \sqrt{\frac{F(x)}{\pi(p_0 + \frac{2}{3}E)}}$$

可得出瞬时空腔的最大体积为

$$V_m = \int_0^x \pi \cdot a_m^2(x) \cdot dx = \frac{1}{p_0 + \frac{2}{3}E} \int_0^x F(x) \cdot dx = \frac{\Delta E}{p_0 + \frac{2}{3}E}$$

所以

$$V_m = \frac{\Delta E}{p_0 + \frac{2}{3}E} \quad (11)$$

即瞬时最大空腔体积和子弹在穿透距离内消耗的能量成正比，比例系数只与介质性质有关。

在瞬时最大空腔体积到底是与子弹的动能还是动能损失直接相关的问题上曾有过争论。早期的一些经验公式把动能作为损伤量的宗量，直到七十年代末，才把能量损失作为决定损伤的决定因素。

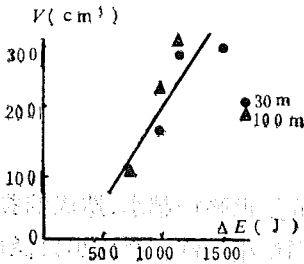


图 5 伤道容积与传递能量关系(子弹)

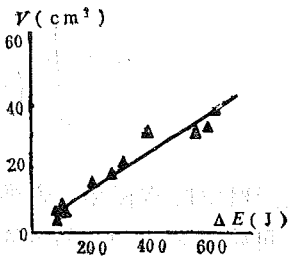


图 6 伤道容积与传递能量关系(钢珠)

图 5 是制式军用子弹射击肥皂的实验曲线<sup>[10]</sup>，图 6 是钢珠弹的射击结果<sup>[11]</sup>这说明在该条件下，最大瞬时空腔体积和子弹的形状、大小及稳定性等因素没有直接关系，只取决于子弹在其中释放的能量以及目标的性质。

下面把动能的损失换算成基于初始动能的能量损失：

$$\Delta E = \frac{1}{2}m(v_0^2 - v^2) = \frac{1}{2}m(v_s^2 - v^2) - \frac{1}{2}m(v_s^2 - v_0^2)$$

$$v_0 = \frac{v_s}{1 + \frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c}}$$

得

$$\Delta E = \Delta E_s - \frac{\frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c} \left( 2 + \frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c} \right)}{\left( 1 + \frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c} \right)^2} \cdot E_s$$

故

$$V_m = \frac{\Delta E_s}{p_0 + \frac{2}{3}E} \cdot \frac{\frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c} \left(2 + \frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c}\right)}{\left(1 + \frac{b}{\rho_d} e^{v_s/c}\right)^2} \cdot \frac{E_s}{p_0 + \frac{2}{3}E} \quad (12)$$

可以看出,影响瞬时空腔最大体积的因素,除了能量的损失外,还有子弹的初始动能,速度及靶标性质。当然,一般情况下,后一项的影响比较小。

### 3.3 空腔的运动

作为初级模拟,为简单计,我们采用有限流体模型,不考虑粘性影响。基本假定:(i) 介质不可压缩,没有体积形变;(ii) 具有轴对称性。

子弹的做功过程极为短暂,一旦它穿过介质,在空腔的壁上就不再有外力的作用,而它在该处做的功

$$F \cdot dx = \frac{1}{2} \rho C x S v^2(x) dx$$

由不可压缩性,知介质质点的速度分布满足

$$\dot{u}(r, t) = \frac{a}{r} \dot{u}(a, t)$$

单位长度介质的动能为

$$\int_0^l \frac{1}{2} (2\pi r \cdot dr \cdot \rho) \dot{u}^2(r, t) = \pi \rho a^2 \left(\frac{da}{dt}\right)^2 \ln \frac{l}{a}$$

抵抗外界压力作的功是  $\pi a^2 p_0$ ,

由能量守恒得

$$\pi a^2 p_0 + \pi \rho a^2 \left(\frac{da}{dt}\right)^2 \ln \frac{l}{a} = F(x)$$

因为动能为零时,瞬时空腔达最大位置,有

$$F(x) = \pi a_m^2(x) \cdot p_0$$

$$\text{所以 } \rho a^2 \left(\frac{da}{dt}\right)^2 \ln \frac{l}{a} = p_0 (a_m^2 - a^2)$$

$$t = \left(\frac{\rho}{p_0}\right)^{1/2} \int_{r_0}^a \sqrt{\frac{\ln \frac{l}{a}}{(a/a_m)^2 - 1}} da \quad (13)$$

通过数值计数,可得  $t-a$  曲线,当  $a = a_m$  时得周期之半。结果如图 7。

对弹性或塑性介质,其运动可以通过增加变形能来得到,即在以上的方程之中,再加进介质发生弹性/塑性形变的功:

$$\pi a^2 p_0^2 + \frac{2}{3} \pi a^2 E + \pi \rho a^2 \ln \frac{l}{a} \left(\frac{da}{dt}\right)^2 = F$$

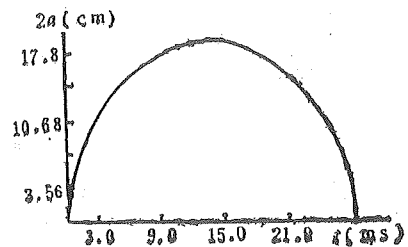


图 7 空腔直径变化曲线

$$\rho a^2 \left( \frac{da}{dt} \right)^2 \ln \frac{l}{a} = \left( p_0 + \frac{2}{3} E \right) \cdot (a_m^2 - a^2)$$

所以

$$t = \left( \frac{\rho}{p_0 + \frac{2}{3} E} \right)^{1/2} \cdot \int_{r_0}^a \sqrt{\frac{\ln \frac{l}{a}}{(a_m/a)^2 - 1}} da \quad (14)$$

上式说明，由于刚性的增加空腔的脉动周期将缩短。所以，明胶中空腔的脉动比水中的要快。

#### 4 结论

通过以上论述我们得出以下结论：

(1) 在创伤的研究中，为方便起见，可将创伤过程分为三个阶段，分别进行讨论。如此使问题得到很大简化，带来实验和分析的方便。

(2) 从弹性方面来讲，瞬时空腔的最大直径只取决于弹速和当地的阻力半径，靶标的影响是通过密度，阻力系数及弹/塑性刚度施加的。对相同动能的弹，弹径小者会产生大的空腔。

(3) 瞬时空腔的最大体积和子弹穿透过程中的能量损失成正比。

作为初级近似，模型的选择比较简单，对问题作了较多假定，这虽有助于问题的求解，却造成了与实际差距。然而，我们已经考虑了作为其核心和主导地位的因素，在以后的工作中可逐步考虑各种非主要因素的影响，使之更加完善。

#### 符 号 表

$a$	空腔边缘质点坐标，即空腔半径	$i$	质点速度
$b$	参数，和介质有关	$v$	子弹速度
$d$	弹径	$v_0$	子弹初速
$k_i$	动能	$v_a$	子弹穿透初速
$k$	参数	$v_m$	空腔体积
$C_x$	阻力系数	$w$	畸变功密度
$l$	靶标的径向尺寸	$W$	畸变功
$m$	子弹质量	$\rho$	靶标密度
$p_0$	外界压力	$\rho_s$	子弹密度
$r_0$	子弹半径	$D$	空腔直径
$S$	阻力面积	$\epsilon$	应变
$u$	质点位移	$\sigma$	应力

#### 参 考 文 献

- [1] 李鸣等，轻兵器，1986，No. 4，36—40。  
 [2] Fracler M L et al., ADA 178880, U. S. A., 1978。  
 [3] Sturdiven L, ADA063525, U. S. A., 1979。

- [4] 胡时胜等, 间接骨折的应变片测量, 实验力学, 5(1990), No.2.
- [5] 付冰梅, 创伤弹道学研究, 中国科学技术大学硕士论文, 1989.
- [6] 周光泉, 爆炸动力学, 中国科学技术大学讲义, 1985.
- [7] 王礼立, 应力波基础, 国防工业出版社, 北京, 1985, p126—129.
- [8] 冯天顺等, 轻兵器, 1986, No.4, 24—27.
- [9] 傅荣向, 中国兵工学会论文选编, 北京, 1984, No.14, 48—52.
- [10] Tikka S *et al.*, Acta Chir. Scand., Suppl 508, 1982, p89—104.
- [11] 傅荣向, 中国兵工学会论文选编, 北京, 1984, No. 14, p20—23.

## Study of Formation of Cavity Produced by the Traumatic Process

Zhou Guangquan    Xing Liping

*(Department of Modern Mechanics)*

### Abstract

In this paper the traumatic process is divided into three separated stages. Based on this assumption the formation of cavity is discussed preliminarily. The maximum diameter, volume and pulsation of cavity is obtained.

**Key words:** Trauma, Ballistics, Cavity.

# 应力波铆接器系统分析和应用

奉孝中 周光泉 李欣增

(近代力学系)

## 摘 要

从应力波铆接原理出发,分析讨论了应力波铆接器主要系统的结构和参数,可供应力波铆接器设计参考。文中还简单介绍了一种小型化的应力波铆接器——便携式应力波铆枪。

关键词: 应力波, 铆接器, 变截面杆, 电磁线圈。

## 引言

在使金属板件高速成形方面,自50年代始人们进行了以炸药为能源的爆炸加工系统研究。到了60年代以电为能源的电液成形,电磁成形以及压缩气体为能源的气压—机械成形等方法<sup>[1]</sup>相继问世。到了70年代,随着航空航天事业的发展,要求解决高强度而屈强比(屈服限/强度限)很接近的钛合金等特种材料的铆接问题,于是人们开始了以应力波铆接<sup>[2]</sup>为先导的应力波加工技术<sup>[3]</sup>的研究。它与以上几种加工方法类似,即对工件施加的载荷均为强冲击载荷,工件的成形速度都很高,工件的成形时间约在毫秒量级。但应力波加工也还有其自身的特点,它主要侧重于应力波在加工装置中的传输及对加工工件的作用,因而它是接触式的无噪音加工。

## 2 应力波铆接原理

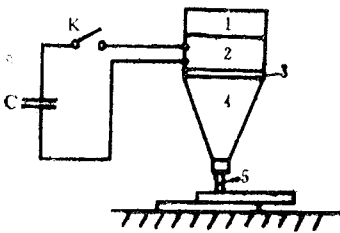


图1 铆接原理图

- C 贮能电容器, K 高压开关
- 1 缓冲装置, 2 电磁线圈,
- 3 激励器, 4 变截面杆, 5 铆钉

所谓应力波铆接是以电作为能源,利用贮能电容器对电磁线圈放电所产生的脉冲强磁场与激励器中感应的电涡流磁场的相互斥力给一变截面杆(亦称波形放大器)输入一应力波,输入应力波的幅值、宽度经变截面杆的放大、调整后输入与之紧密接触的铆钉,使铆钉在瞬间发生塑性形变而成形。

从应力波铆接原理可看出,铆钉的成形是在它与加载系统接触状态下一次高速完成的,因而避免了气压—机械式成形法或常规气动铆接时因连续撞击工件而产生的巨大噪音。

从应力波铆接原理还可看出,铆接器是采用电/力直接耦合的转换系统提供能量,这样通过改变系统的电参量就可精确地控制载荷的大小(输出应力脉冲幅值及宽度),这就为屈服限和强度限接近的特种材料的铆接提供最适当的变形能。此外,由于应力波铆接时铆钉是在高应变率状态下成形,铆钉的动态力学性能表现出与静态时有较大的差异,其高速变形过程是一个同时包含应变硬化和热软化的热—力学耦合过程,这使材料的表观应变硬化模量较之准静态时来得低,这特别给对绝热剪切敏感的钛合金材料的铆接提供了有利条件<sup>[4]</sup>,使常规气铆难以实现的铆接成为可能。早在1983年在国内我们首次采用应力波铆接的方法将 $\phi 4\text{mm}$ 、 $\phi 6\text{mm}$ 的钛铆钉铆接成功。

还值得一提的是,由于应力波铆接采用电/力直接耦合方式提供能量,所以系统能量的转换效率高,其能耗较之常规气铆低。

### 3 应力波铆接器主要系统分析

应力波铆接器的组成框图示于图2。

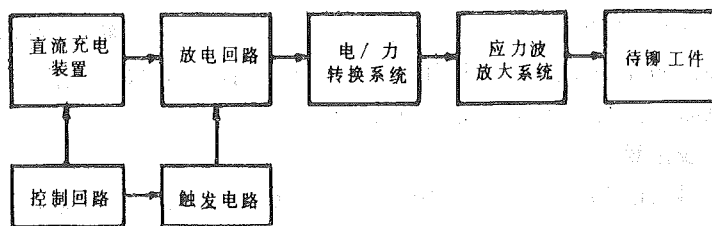


图2 应力波铆接器的组成框图

#### 3.1 直流充电回路

直流充电回路是由低压交流电源、高压变压器、高压整流器及贮能电容器C等组成。它的作用是把低压交流电变为高压直流电,并对C进行充电,即将电网中的电能贮存于C中。对于一般的充电回路,充电速度通常取决于时间常数 $RC$ 的大小( $R$ 为充电限流电阻)。对铆接而言,要求每一次充电时间短,并希望尽量减少回路上电能的损耗,这时简单的 $RC$ 充电回路往往不能满足要求,为此我们采用图3所示的电感—电容变换式充电回路,这样近似的恒流充电使充电时间大为缩短,并有效地减少了电能有功元件上的损耗。

#### 3.2 放电回路

放电回路是由贮能电容器C、高压触发开关K及电磁线圈组成。由触发回路输出的高压触发脉冲到达K时,K瞬时导通,C通过电磁线圈进行放电,其等效电路如图4所示

图中 $L_1$ 为电磁线圈的电感, $R_1$ 为其直流电阻及引线阻之和, $L_2$ 、 $R_2$ 分别为与电磁线圈紧邻的激励器的电感和等效电阻, $M$ 为电磁线圈与激励器之间的互感。显然图4可进一步简化为图5所示的RLC等效电路,图5中 $u_0$ 为C上的直流电压,

$L$ 、 $R$ 都包含了激励器折合过乘的影响,具体数值易由图4的电路方程中解出。

图5的电路方程为

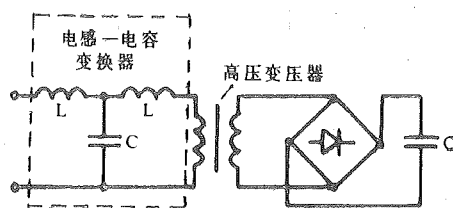


图3 T形电感-电容变换器充电回路

$$L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{1}{C} \int i dt = u_c \quad (1)$$

令  $h = \frac{R}{2L}$ ,  $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$ ,  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - h^2}$ , 并代入初始条件  $i|_{t=0} = 0$ ,  $L \frac{di}{dt} \Big|_{t=0} = u_c$ .

易由 (1) 式解出

$$i(t) = i_0 e^{-ht} \sin \omega t \quad (2)$$

式中  $i_0 = \frac{u_c}{\omega_0 L} = u_c \sqrt{\frac{C}{L}}$ .

由 (2) 式中可看出, 放电电流的大小取决于  $u_c$ 、 $C$ 、 $L$  之值。为了获得大的峰值电流

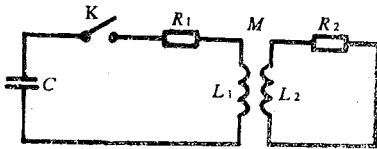


图 4 放电等效电路

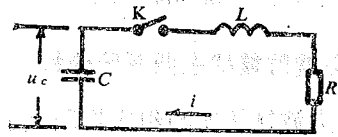


图 5 简化等效电路

可提高储能电容器的充电电压  $u_c$ , 增加电容量  $C$  及减小整个回路的电感  $L$ , 但为了获取合适脉冲宽度的电流, 需合理安排  $C$  及  $L$  的大小。

### 3.3 电/力转换系统

应力波铆接器的电/力转换系统包括薄饼形的电磁线圈和与之紧贴的激励器两部分。电磁线圈为铜排单层或多层环向绕制, 激励器为薄金属圆板构成。当电磁线圈里有冲击电流  $i(t)$  流过时, 激励器中会感应出环状的涡电流。电磁线圈的脉冲强磁场与激励器中的涡电流相互作用的结果, 给激励器作用一应力脉冲, 即电能通过该电磁耦合系统后以应力波的形式输出, 完成了电/力的转换。

为分析电/力的转换关系, 可把实际的几匝线圈简化为单匝线圈, 激励器中感应的涡电流简化为一单匝电流环, 二者同轴。则此时单匝线圈中流过的脉冲电流为实际电流  $i(t)$  的几倍, 据 (2) 式有

$$i_1 = n i_0 e^{-ht} \sin \omega t \quad (3)$$

由图 5 电路易解出

$$i_2 = A e^{t/\tau_0} \cdot i_1 \quad (4)$$

式中  $A = \omega M / \sqrt{R_2^2 + (\omega L_2)^2}$ ,  $\tau_0 = \text{tg}^{-1} \frac{R_2}{\omega L_2}$ .

若单匝线圈电流环与涡电流环之间的距离为  $a$ , 其半径分别为  $r_1$ 、 $r_2$ , 则涡电流环上的一个微元  $dl$  处电流环  $i_1$  的磁场为

$$B_r = \frac{\mu_0 i_1}{2\pi} \cdot \frac{a}{r_2 \sqrt{(r_1 + r_2)^2 + a^2}} \left[ -K + \frac{r_1^2 + r_2^2 + a^2}{(r_1 - r_2)^2 + a^2} E \right] \quad (5)$$

式中  $K$ 、 $E$  分别是第一、第二类完全椭圆积分, 其模

$$k = 2\sqrt{r_1 r_2 / [(r_1 + r_2)^2 + a^2]}, \quad K = \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 x}}, \quad E = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 x} dx.$$



而共轴圆环  $i_1$  的磁场对涡电流环  $dl$  段的作用力

$$dF = i_2 \cdot dl \times B,$$

由于对称性,  $B$ , 对涡电流  $i_2$  各点是常数, 所以激励器受到的斥力为

$$F = \oint i_2 B_r dl = 2\pi r_2 B_r i_2 \quad (6)$$

于是得到激励器的输入应力

$$\sigma = \frac{F}{\pi r_2^2} \quad (7)$$

考虑到实际结构中  $a \ll r_1$ ,  $r_1 \approx r_2$ , 把 (3)、(4)、(5)、(6) 式代入 (7) 式可得

$$\sigma = N i_2^2 e^{-2\lambda t} \sin \omega t \quad (8)$$

式中系数  $N = \mu_0 \omega M n^2 / \sqrt{R_2^2 + (\omega L_2)^2}$ .

由 (8) 式可见, 当电磁线圈的匝数、几何尺寸及与激励器的相对位置确定后, 电磁线圈输出的应力完全取决于放电回路电流的大小。而该电流的大小可很方便地用改变电参量 (充电电压  $u_c$ 、电容量  $C$ ) 来控制, 由此可推知应力波铆接输出力的大小, 控制方便、准确, 重复性好, 故应力波铆接的成形精度高。

### 3.4 应力波放大系统

应力波铆接器的放大系统是由一变截面杆组成的, 其大端为输入端, 小端为输出端。当弹性波由变截面杆的大端向小端传播时会发生显著的变化, 这主要表现为应力波强度 (应力幅值) 的增大, 应力波形状及应力脉冲宽度的变化。若变截面杆大、小端面积分别为  $S_1$ 、 $S_2$ , 输入、输出应力分别为  $\sigma_1$ 、 $\sigma_2$ , 则在静力学中该变截面杆的应力放大倍数  $K_r = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \frac{S_1}{S_2}$ , 而当

输入为一维冲击波且不计及变截面杆的二维效应时, 应力放大倍数  $K_b = \sqrt{\frac{S_1}{S_2}}$ 。对于实际应

力波铆接器而言, 其输入既不是一个静态压力, 也不能简单近似于一维冲击波, 据 (8) 式它是一个较复杂的输入函数。为此我们采用 HONDO—II 动态有限元程序, 对母线为直线的变截面杆中传输的实际应力波进行二维数值分析, 计算结果示于图 6<sup>[5]</sup>。

二维数值计算的结果表明应力波铆接过程是一种波动效应很强的动力过程。对于我们选用的变截面杆, 其  $K_r = 12.8$ ,  $K_b = 3.58$ , 装置于应力波铆接器中时其放大倍数  $K_s = 8.0$

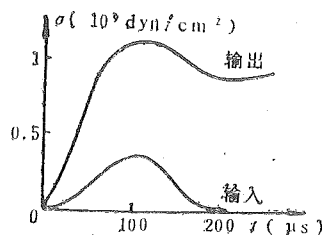


图 3 输入输出应力波形

## 4 应用

基于对应力波铆接原理的理论和实验研究, 我们于 1988 年研制了一套具有工业实用价值的便携式应力波铆枪。它可用于铆接  $\phi 6\text{mm}$  以下铝铆钉及其它强度相当的铆钉。铆枪电源部分装配为可移动式专用电源车, 充电过程全部自动控制。枪体部分用手枪钻外套改制而成, 其最大线度小于 250mm, 重量轻于 1.5kg, 铆枪的核心部件之一电磁线圈作为易损件可

方便地更换。就目前的工艺水平电磁线圈的寿命约 300 次, 相信随工艺水平的提高, 线圈寿命可望增加。当选定了合适的电参数, 铆接的合格率可达 100%。该套装置工作速率大于 15 次/分钟, 总体能耗小于 6kWh/千次铆接。经过严格的动物安全试验及人手持铆枪铆接试验, 操作人员的安全是完全有保障的。实际铆接时噪音远小于气动铆枪铆接时的噪音。鉴于应力波铆接具有噪音小、能耗低、加工精度高等优点, 予期应力波铆枪将逐步替代常规气铆。如在应力波放大器后配以适当工装, 应力波铆接器还可用于压配合连接, 加工抛光孔, 销钉的打入与拔出等一系列应力波加工中, 实现一机多能。因此应力波加工技术, 在我国的航空工业和其它机械工业中有着广泛的应用前景。

### 参 考 文 献

- [1] 宗秀娟等编译, 金属爆炸加工的理论和应用, 中国建筑工业出版社, 北京, 1983, 319—312。
- [2] United States Patent Office, 3, 559, 269, (1971)。
- [3] United States Patent 4, 129, 028, (1978)。
- [4] 王礼立, 胡时胜, 爆炸与冲击, 1 (1985), 9—15。
- [5] 李欣增, 应力波铆接器的研制及其二维数值分析, 中国科学技术大学近代力学系硕士论文, 1989年。

## Principle of Stress Wave Riveting and Its Application

Feng Xiaozhong Zhou Guangquan Li Xinzen

(Department of Modern Mechanics)

### Abstract

The Structure and parameters of main systems of stress wave riveter are analysed and discussed from the principle of stress wave riveting in this paper. This may help with the design of stress wave riveters. As a practical example a portable stress wave riveters is introduced briefly.

**Key words:** stress wave, riveter, bar with varying cross-section area, electromagnetical coil.

# 应力波杆中传播质点速度的磁电测量方法

奉孝中 杨继跃

(近代力学系)

## 摘 要

介绍用磁电法测量杆中质点速度的原理和方法,分析了误差原因,给出了冲击加载时有机玻璃杆及合金铝杆的质点速度的实测结果,误差较小。

**关键词:** 质点速度, 磁电测量方法, 敏感丝。

## 1 前言

在材料的动态力学性能、应力波传播和其它动态实验力学的研究中,应力、应变、位移、质点速度、波速等基本力学量随时间变化的动态过程是人们普遍关注的。在忽略应变率效应的条件下,弹性和弹塑性材料在加载过程中其应力、应变、质点速度等量之间有一对应的关系。可以通过各种应变测量技术(如应变片传感器)、来间接测量应力和质点速度等量。如众所知,对于粘弹性、粘塑性等材料而言,只有在其本构关系已知的条件下,才能通过基本方程由应变波形推算出质点速度波形。目前,许多新材料的本构关系尚属未知,则上述方法不能奏效。然而很多场合下人们希望能直接得到质点速度。六十年代美国的Ripperger和Yeakley<sup>[1]</sup>以及Malven等人<sup>[2]</sup>对此作过一些研究。借鉴他们的经验我们设计了一套用磁电法测量杆中质点速度的装置,并在我系爆炸力学专业设计的分段式霍布金生压杆装置(即所谓SHPB装置)上对冲击加载后有机玻璃杆及合金铝杆的纵向质点速度进行测量,取得了较满意的结果。

## 2 测试原理

磁电法测量质点速度的原理基于Faraday电磁感应定律

$$E = \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \times \mathbf{v} \quad (1)$$

式中 $E$ ——感应电动势(V), $\mathbf{B}$ ——磁感应强度矢量( $\text{Wb}/\text{m}^2$ ), $\mathbf{L}$ ——导线长度方向矢量(m), $\mathbf{v}$ ——导线运动的速度矢量(m/s)。

显然,在磁感应强度恒定及适当布置磁场及导线的情况下可以得到

$$v = kE \quad (2)$$

即导线的运动速度与导线中的感应电动势成正比例, $k$ 为灵敏度系数。

磁电法测量杆中质点速度装置原理如图 1。

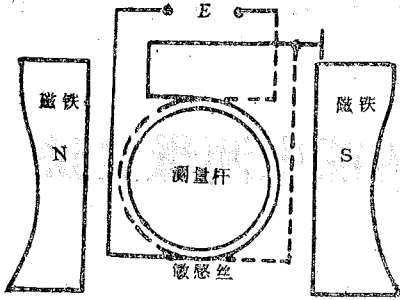


图 1 磁电法测量杆中质点速度装置原理图

装置中用两段细铜线作敏感元件，将其粘贴在垂直于杆轴线的一个圆周上，并置于二永久磁铁形成的磁场中。这样粘贴部细铜线的运动实际上反映了该处杆表面质点的运动。两段对称粘贴的细铜线采用串接方式，这样可将测试信号增大一倍。

测量装置的磁场是由铝镍钴 U 形磁钢产生。为了改善磁场的均匀性及在可能情况下增大磁感应强度  $B$ ，在每个磁极上附加了一个截面积收缩的电工软铁极靴，用高斯计实测，除去靠极靴边缘部分外，在二极靴内部区域磁场的均匀性较好。沿着杆的同一轴线方向，磁感应强度均匀一致，只是在杆的径向磁场呈现出较小的不均匀性。

为定出磁电测速系统的  $k$  值，将 (1) 式改写为

$$E = \int (\mathbf{B} \times d\mathbf{L}) \cdot \mathbf{v} \quad (3)$$

以正十二边形代替敏感丝所处圆周，对 (3) 式采用近似求和

$$E = \sum_{i=1}^{12} (\mathbf{B}_i \times \Delta \mathbf{L}_i) \cdot \mathbf{v} \quad (4)$$

式中  $\Delta \mathbf{L}_i$  为边长矢量， $\mathbf{B}_i$  为该边中点处的磁感应强度矢量。灵敏度系数标定如图 2 所示。

将测量值代入 (4) 式得到

$$E = \Delta L [(B_2 + B_6 + B_8 + B_{12}) \sin 30^\circ + (B_3 + B_5 + B_9 + B_{11}) \sin 60^\circ + B_4 + B_{10}] v \approx 3.781 \times 10^{-3} v \quad (V) \quad (5)$$

从而定出该磁电测试系统的灵敏度

$$k = \frac{v}{E} \approx 264.5 \quad (\text{m/s} \cdot \text{V})$$

这样只要测出感应电动势  $E$ ，即可由 (2) 式直接得出杆表面纵向质点速度。

但值得注意的是，前述分析只论及了粘贴于杆表面的敏感丝，事实上总有部分引线处于磁场之中，这样引线的运动就有可能产生一个附加信号电压，从而给测试带来误差。因此，如何布置引线使误差趋于最小是个甚为棘手的问题。Ripperger 等人曾采用一个专门支撑联接引线系统，使用起来相当不便。

我们采用图 3 所示引线布置将  $AO_1O_2B$ 、 $CO_1O_2D$  两根漆包线用 502 胶粘贴在垂直于测量杆轴线的某一圆周上，使  $AO_1$  与  $O_1C$  及  $BO_2$  与  $O_2D$  分别处于同一直线上，并且  $AC \parallel BD$ ，然后分别将其引至与测量杆同心的铝管的端面并按平行于测量杆轴线方向粘贴在铝管的外表面上引出。测量杆与铝管采用橡胶圈支撑固定。这样既解决了引线移动带来误差的问题，联接线方便，又由于引线可随测量杆一起运动，从而避免了引线的折断，一次粘贴可进行多次实

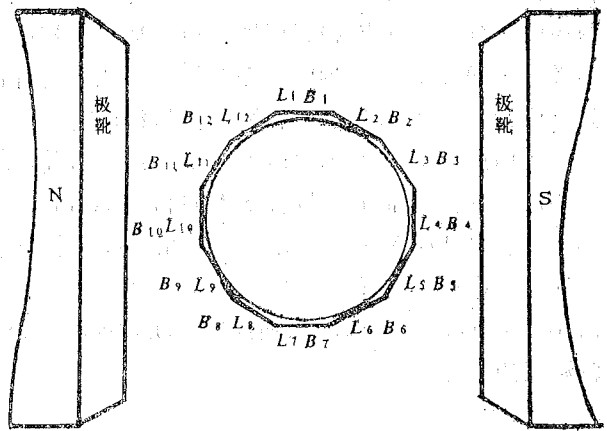


图 2 灵敏度系数标定

验而不至损坏

### 3 杆表面纵向质点速度的测量

将上述磁电测速系统置于 SHPB 装置上, 利用 SHPB 装置的撞击杆对测量杆进行冲击加载, 输出的电压信号由瞬态波形存贮器记录, 电压波形即质点速度波形由函数记录仪绘出。整个测试系统如图 4 所示。

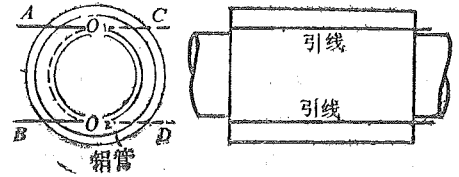


图 3 敏感丝引线布置

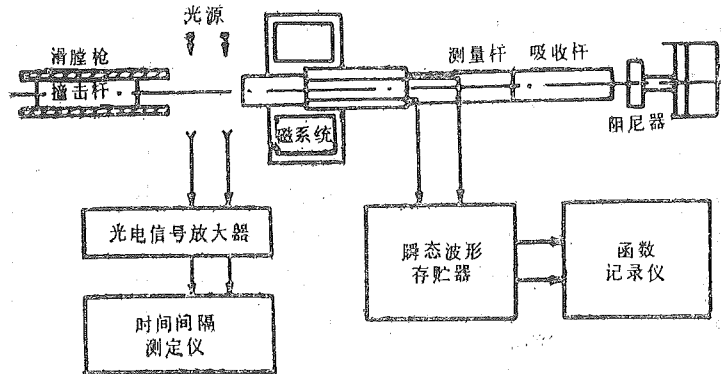


图 4 测试系统示意图

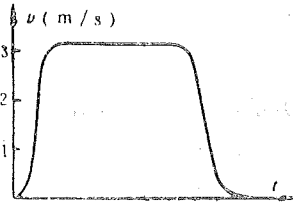


图 5 有机玻璃杆纵向表面质点速度波形

采用与待测杆相同的材料作 SHPB 装置的撞击杆, 由于二杆材料相同, 故从碰撞理论知测试杆中的质点速度为撞击速度之半。用一套光学测速系统可测得撞击杆的速度, 由于这套系统有很高的测速精度, 故可得到质点速度的高精度近似值, 磁电系统的实测值可与之进行比较。另外 SHPB 装置改变撞击速度非常方便, 这就大大有利于实验工作的进行。

图5给出了撞击杆速度 $v_0 = 6.28\text{m/s}$ 时有机玻璃杆的表面质点速度波形。测试数据见表1。

表 1 有机玻璃杆纵向质点速度测试数据

试验次数	撞击杆通过二狭缝时间 $t (\mu\text{s})$	撞击速度之半 $v^* = v_0/2$ (m/s)	信号电压幅值 $E$ (mV)	测量杆纵向表面质点速度 $v$ (以实测 $k$ 值计算) (m/s)	以 $v^*$ 为真值时 $v$ 的相对误差 $\Delta$ (%)
1	19199.9	2.60	9.6	2.54	-2.3
2	15912.4	3.14	11.6	3.07	-2.2
3	14192.9	3.52	13.2	3.49	-0.9
4	13197.0	3.79	14.2	3.76	-0.8
5	11086.8	4.51	16.9	4.47	-0.9
6	9700.3	5.15	19.4	5.13	-0.4

续表

7	8167.8	6.12	23.4	6.19	+0.5
8	7572.3	6.60	25.2	6.67	+1.1
9	7004.5	7.14	26.8	7.09	-0.7
10	6397.5	7.82	29.4	7.78	-0.5
11	6200.5	8.06	30.0	7.94	-1.5
12	5328.3	9.38	35.4	9.36	-0.2
13	5208.0	9.60	35.8	9.47	-1.4
14	4336.3	11.53	43.0	11.37	-1.4
15	3865.5	12.93	48.0	12.70	-1.8
16	3764.9	13.28	49.2	13.01	-2.0
17	3565.4	14.02	50.8	13.44	-4.1
18	3349.8	14.93	54.0	14.28	-4.4
19	3033.8	16.48	60.0	15.87	-3.7
20	2752.2	18.02	65.6	17.35	-3.7
21	2678.5	18.67	68.8	18.20	-2.5

$$k = 264.5 (\text{m/s} \cdot \text{V}), \quad v = kE,$$

$$v^* = \frac{v_0}{2} = \frac{S}{2t}$$

$$\text{二狭缝宽度 } S = 100.0 \text{ mm}$$

$$\Delta = \frac{v - v^*}{v^*} \times 100\%$$

从表 1 可以看出, 以实测  $k$  值计算时质点速度  $v$  在 2~20m/s 范围内与高精度近似值  $v^*$  相比, 相对误差  $\Delta$  均在 5% 以内, 大致来源于四个方面: 磁场测量时的误差; 标定灵敏度时用

正多边形逼近圆周求和代替积分所造成的误差; 读数误差, 这特别在速度较高时, 由于测得的信号电压有小的振荡不利于判读; 敏感丝的粘贴质量。尽管如此, 对于一般的测量采用标定的  $k$  值计算误差是较小的。

另外我们对应力波在金属材料杆中传播时纵向质点速度进行了测定。撞击杆与测量杆为相同铝合金材料, 撞击杆  $L_1$  长 300mm, 测量杆  $L_2$  长 600mm。据应力波的特征线理论, 两杆中应力波传播过程如图 6 (a) 所示, 测量杆上  $x_1$  处的速度波形如图 6 (b) 所示。

由图 6 分析可知, 测量杆  $x_1$  处的纵向质点速度波形为一系列矩形脉冲, 第一个脉冲平台代表的质点速度值为撞击速度  $v_0$  之半。

图 7 给出了撞击速度为 6.12m/s 时合金铝杆纵向质点速度的实测波形。11 次试验实

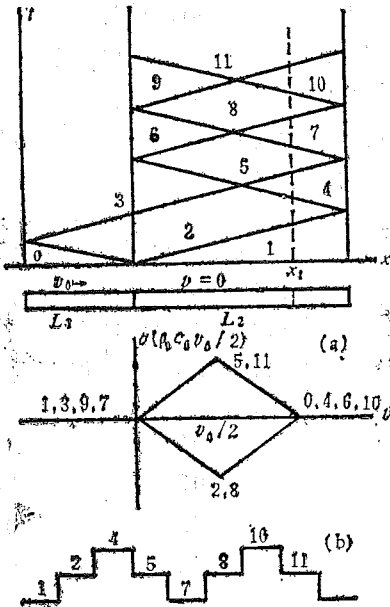


图 6 两杆中传播的应力波及处的速度波形

测数据见表 2。

由图 7 可看出, 实测波形与理论分析是基本相符的, 不过顶部不平呈逐渐下降趋势, 这可用电磁学原理进行分析。因为测量杆是金属材料, 处于磁场中的那部分铝杆会因其本身的质点运动而产生感应电动势并形成涡流磁场, 这涡流磁场必然会部分抵消原磁场的作用, 于是导致

表 2 合金铝杆的纵向质点速度测量数据

试验次数	$E$ (mV)	$v^*$ 撞击速度之半	$v$ 计算值 (m/s)	$\Delta = \frac{v - v^*}{v^*} \times \%$
1	10.70	3.06	3.08	+0.6
2	12.11	3.43	3.49	+1.7
3	15.43	4.46	4.44	-0.4
4	15.63	4.56	4.50	-1.3
5	17.77	5.09	5.12	+0.6
6	19.34	5.56	5.57	+0.2
7	21.09	6.15	6.07	-1.3
8	22.66	6.68	6.53	-2.2
9	24.22	7.35	6.95	-5.0
10	26.37	8.17	7.60	-7.0
11	26.95	8.68	7.76	-10.6

波形顶部的倾斜。从前面有机玻璃杆中测得的波形顶部为较好的平台也可证明上述分析的正确性。因此为了提高测试精度, 改善记录波形, 应设法消去涡流的影响。为此可另附加与敏感丝相近的固定线圈, 并与之反相串接在一起, 则附加线圈接收的仅是涡流磁场产生的信号, 正好能抵消掉涡流的影响。

由表 2 可看出, 对于合金铝杆, 当质点速度大于一定值后, 随着质点速度的增加误差有所增大, 这除了涡流的影响外, 敏感丝粘贴质量不高也是原因之一。但可以说在相当速度段范围内误差仍然是较小的。

#### 4 结束语

质点速度的磁电法测量从原理上讲是很简单的, 但要保证足够的测试精度则需要解决引线的引出, 克服涡流、杆整体运动的影响等技术上的难题。我们在上述方面作了一些初步工作, 取得了较满意的结果。

显见, 如能获得更强的稳定磁场, 则可延伸可测速度的下限。由于敏感丝和待测杆件是线接触, 粘贴情况不及应变片有利, 故当质点速度较高时可能会造成局部脱胶甚至引出线的折断, 这使测量上限受到一定限制。

质点速度的磁电测量法虽然是一个经典的方法, 但在实用上仍然是很有前途和生命力的。相信通过进一步深入研究, 它必将在材料研究方面得到更广泛的应用。

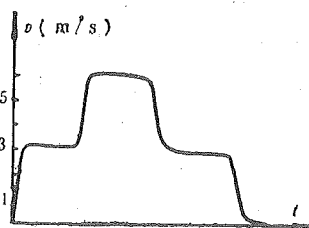


图 7 铝合金杆纵向表面质点速度波形

## 参 考 文 献

- [1] Ripperger E A and Yeakley L M, *Experimental Mechanics*, 3(1963), 47—56.
- [2] Malven L E, *Experimental Mechanics*, 6(1969), 255—262.

# The Electromagnetic Method for Measurement of Particle Velocity With Stress Wave Propagating Along Bar

Feng Xiaozhong Yang Jiyao

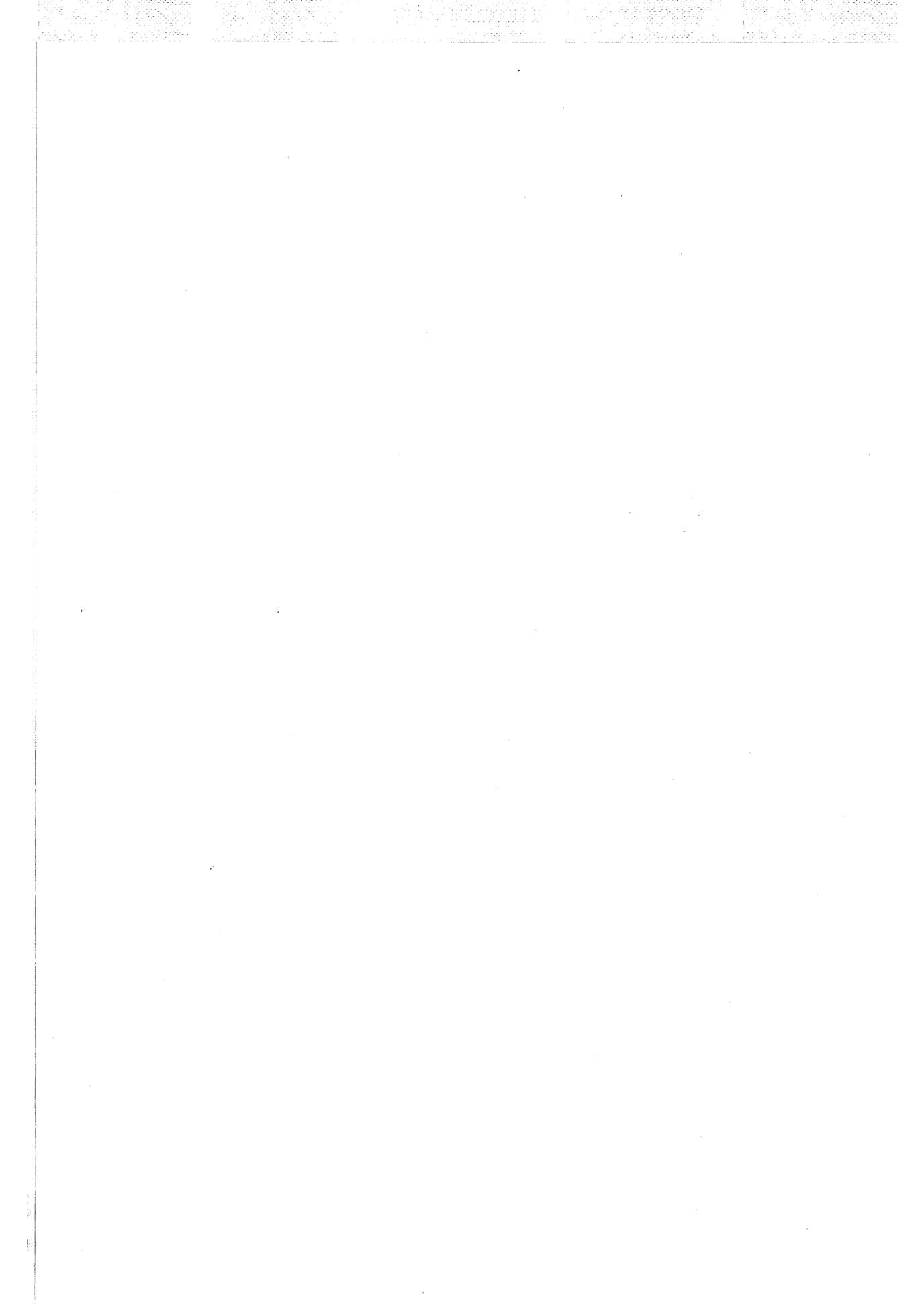
(Department of Modern Mechanics)

### Abstract

It is very important to obtain the particle velocity for the establishment of constitutive relations of viscoelastic or viscoplastic materials. The principles and techniques to measure the particle velocity by use of electromagnetic method are introduced in this paper. The error is also analysed. In particular, as practical examples, the particle velocities in PMMA and Aluminum bars under impact loadings are measured. The results are compared with that of higher accurate method.

Key words: particle velocity, electromagnetic measurement, sensitive wire.





# 中国科学技术大学学报编委会

主 编: 龚 昇

副主编: (按姓氏笔划排序)

冯克勤 伍小平 刘耀阳

汪克林 张懋森 钱景仁

杨延龄

责任编辑: 袁克林

英文编辑: 王 琳

## 中 国 科 学 技 术 大 学 学 报

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(专辑)

第 20 卷

Vol.20

总第 71 期

Sum No. 71

编辑出版: 《中国科学技术大学学报》编辑部

(安徽省合肥市金寨路 96 号)

印 刷: 中国科学技术大学印刷厂

国内总发行: 合 肥 市 邮 局

订 购 处: 全 国 各 地 邮 局

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司

(中国国际书店, 北京 399 信箱)

**Edited and Published by:**

The Editorial Board of

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

96 Jinzhai Road of  
Hefei, Anhui, China 230026

**Distributed by:**

China International Bookstore

P. O. Box 399 Beijing, China

国内统一刊号: CN34—1054

邮政编码: 230026

邮政代号: 26—31

国外代号: Q527

1990年4月出版